

Kapitel 6

Zweite Quantisierung

6.1 Identische Teilchen

6.1.1 Ununterscheidbarkeit, Permutationen

Aus der klassischen Mechanik ist man es gewohnt, daß in einem System mit N identischen Teilchen jedes eindeutig identifiziert werden kann (man könnte z. B. Nummern verteilen). In der Quantenmechanik ist das grundlegend anders: Hier sind *identische Teilchen grundsätzlich ununterscheidbar!* Das bedeutet, daß der Hamiltonian des Systems invariant unter Vertauschung irgend zweier Teilchen ist:

$$H(1,2,3,\dots,N) = H(2,1,3,\dots,N)$$

Die guten Quantenzahlen des i -ten Teilchens (Ort, Spin etc.) sind hier einfach mit ‘ i ’ bezeichnet. Man sagt auch, die Permutation zweier Teilchen ist eine “Symmetrie des Systems”. Ein Hamiltonian, der dieser Forderung genügt, ist beispielsweise

$$H = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r}_i) \right) + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^N V(\vec{r}_i - \vec{r}_j) .$$

Produkt der Hilberträume

Da man N Teilchen betrachtet, die alle einzeln durch je einen Satz dynamischer Variablen bestimmt sind (Ort, Impuls, Spin), folgt, daß der Hilbert-Raum des Gesamtsystems ein *direktes Produkt* ist:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$$

Ein Zustand ist deshalb auch ein Produkt (eigentlich ein direktes Produkt) von Zuständen aus den Einzel-Hilbert-Räumen, bzw. eine Linearkombination von solchen Produkten,

$$\begin{aligned} \Psi(1,2,\dots,N) &= \Psi_1(x_1) \Psi_2(x_2) \dots \Psi_N(x_N) \\ &+ \Psi'_1(x_1) \Psi'_2(x_2) \dots \Psi'_N(x_N) + \dots \end{aligned} \quad (6.1)$$

Im folgenden untersuchen wir die Eigenschaften der Wellenfunktion (6.1) unter Vertauschung der Indizes.

Permutationen

Zunächst führen wir den Operator \mathcal{P} ein, der eine Permutation der Argumente von ψ bewirkt,

$$\mathcal{P}\psi(1, 2, \dots, N) \equiv \psi(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N).$$

Die Symbole $(\alpha_1, \dots, \alpha_N)$ stehen dabei für eine Umnummerierung der alten Argumente $1 \dots N$, wie z.B.

$$(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = (2, 1, 3) \quad \text{bedeutet} \quad \begin{cases} 1 \rightarrow 2 \\ 2 \rightarrow 1 \\ 3 \rightarrow 3 \end{cases}$$

Es gibt bekanntlich genau $N!$ solcher Umnummerierungen. Die Invarianz des Hamiltonian unter einer solchen Permutation scheidet sich dann als

$$\mathcal{P}H\mathcal{P}^{-1} = H \quad \Leftrightarrow \quad [\mathcal{P}, H] = 0,$$

denn ein Operator \mathcal{P} ist genau dann eine Symmetrie des Systems wenn er mit dem Hamilton-Operator vertauscht.

Transpositionen

Bei einer *Transpositionen* P_{ij} werden einfach die i -te mit der j -ten Quantenzahl vertauscht,

$$P_{ij} \quad \text{bedeutet} \quad \begin{cases} i \rightarrow j \\ j \rightarrow i \\ k \rightarrow k, \quad \forall k \neq i, j \end{cases}$$

Bei einem N -Teilchen-System gibt es $N(N-1)/2$ Transpositionen, es gilt

$$P_{ii} = \mathbf{1}, \quad P_{ij} = P_{ji}.$$

Zwei Transpositionen P_{ij} und P_{kl} vertauschen dann, wenn die Zahlen i, j, k, l paarweise verschieden (oder gleich) sind.

Permutationen als Produkt von Transpositionen

Jede beliebige Permutation \mathcal{P} läßt sich als ein Produkt von Transpositionen P_{ij} darstellen, wie z.B.

$$(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = (2, 3, 1) \quad \Leftrightarrow \quad \left\{ \begin{array}{l} 1 \rightarrow 2 \\ 2 \rightarrow 3 \\ 3 \rightarrow 1 \end{array} \right\} \quad \Leftrightarrow \quad P_{23}P_{21},$$

denn

$$P_{23}P_{21}(1, 2, 3) = P_{23}(2, 1, 3) = (2, 3, 1).$$

Eigenschaften von Transpositionen

Transpositionen sind speziellen Permutationen und vertauschen daher mit dem Hamiltonian. Es gilt:

$$[P_{ij}, H] = 0, \quad P_{ij}^2 = 1, \quad P_{ij}^\dagger = P_{ij} = P_{ij}^{-1}.$$

P_{ij} hat die Eigenwerte ± 1 und daher ist P_{ij} hermitesch und unitär.

Gerade und ungerade Permutationen - Parität

Eine Permutation \mathcal{P} heißt *ungerade*, wenn sie aus einer ungeraden Zahl von Transpositionen aufgebaut ist, sonst *gerade*. Man spricht von der ‘Parität’ der Permutation.

N-Teilchen Zustand in Ein-Teilchen-Basis

Es gilt nun herauszufinden, wie ein N -Teilchen-Zustand genau aussieht. Man geht am besten von einer Einteilchen-Basis $\{|\lambda_i\rangle\}$ aus. Ein Zustand des Gesamtsystems kann dann z. B. so aussehen:

$$|\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N\rangle = |\lambda_1\rangle_1 |\lambda_2\rangle_2 \cdots |\lambda_N\rangle_N \quad (6.2)$$

Das bedeutet, das Teilchen 1 (Index ‘1’ am Ket-Vektor) befindet sich im Einteilchen-Zustand $|\lambda_1\rangle$ usw. Die Transposition P_{12} wirkt dann so:

$$P_{12}|\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_N\rangle = |\lambda_2, \lambda_1, \lambda_3, \dots, \lambda_N\rangle = |\lambda_2\rangle_1 |\lambda_1\rangle_2 |\lambda_3\rangle_3 \cdots |\lambda_N\rangle_N \quad (6.3)$$

Jetzt befindet sich also Teilchen 1 im Zustand $|\lambda_2\rangle$ und Teilchen 2 im Zustand $|\lambda_1\rangle$.

Beispiel: 2 Teilchen

Es ist $N! = 2$, und $\mathcal{P} \in \{\mathbf{1}, P_{12}\}$, mit

$$\mathbf{1}|\lambda_1, \lambda_2\rangle = |\lambda_1, \lambda_2\rangle, \quad P_{12}|\lambda_1, \lambda_2\rangle = |\lambda_2, \lambda_1\rangle.$$

Durch Anwendung der Transposition können nur die beiden Zustände $|\lambda_1, \lambda_2\rangle$ und $|\lambda_2, \lambda_1\rangle$ erzeugt werden. Da \mathcal{P} mit H vertauscht, kann man ein gemeinsames Eigenfunktions-System finden. Eigenvektoren zu P_{12} gehören zu den Eigenwerten ± 1 . Also bilden wir die symmetrische und die antisymmetrische Linearkombination der beiden Zustände:

$$\begin{aligned} |\lambda_1, \lambda_2\rangle_S &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\lambda_1, \lambda_2\rangle + |\lambda_2, \lambda_1\rangle \right) && : \text{symmetrisch} \\ |\lambda_1, \lambda_2\rangle_A &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\lambda_1, \lambda_2\rangle - |\lambda_2, \lambda_1\rangle \right) && : \text{antisymmetrisch} \end{aligned}$$

Es gilt dann

$$\begin{aligned} P_{12} |\lambda_1, \lambda_2\rangle_S &= +|\lambda_1, \lambda_2\rangle_S \\ P_{12} |\lambda_1, \lambda_2\rangle_A &= -|\lambda_1, \lambda_2\rangle_A \end{aligned}$$

Antisymmetrische (symmetrische) Zustände kehren ihr Vorzeichen unter Vertauschung der Indizes (nicht) um.

Beispiel: 3 Teilchen

$N = 3$: Es ist $N! = 6$, und es gibt die drei Transpositionen P_{12} , P_{23} und P_{13} . Die symmetrischen und antisymmetrischen Linearkombinationen aus den sechs Zuständen $|\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\rangle$, $|\lambda_2, \lambda_1, \lambda_3\rangle$

usw. lauten:

$$\begin{aligned}
 |\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\rangle_S &:= \frac{1}{\sqrt{6}} \left(|\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\rangle + |\lambda_1, \lambda_3, \lambda_2\rangle + |\lambda_2, \lambda_1, \lambda_3\rangle \right. \\
 &\quad \left. + |\lambda_2, \lambda_3, \lambda_1\rangle + |\lambda_3, \lambda_1, \lambda_2\rangle + |\lambda_3, \lambda_2, \lambda_1\rangle \right) \\
 |\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\rangle_A &:= \frac{1}{\sqrt{6}} \left(|\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\rangle - |\lambda_1, \lambda_3, \lambda_2\rangle - |\lambda_2, \lambda_1, \lambda_3\rangle \right. \\
 &\quad \left. + |\lambda_2, \lambda_3, \lambda_1\rangle + |\lambda_3, \lambda_1, \lambda_2\rangle - |\lambda_3, \lambda_2, \lambda_1\rangle \right)
 \end{aligned}$$

Nun gilt wieder

$$P_{ij}|\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\rangle_{S/A} = \pm|\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\rangle_{S/A} \quad \text{bei} \quad i \neq j. \quad (6.4)$$

Außer der symmetrischen und der antisymmetrischen Linearkombination gibt es noch vier weitere, die auf den beiden bereits gefundenen senkrecht stehen, jedoch nicht gleichzeitig Eigenfunktionen aller drei Transpositionen sind. Es stellt sich die Frage, welche dieser sechs Kombinationen physikalische Bedeutung haben.

Symmetrie für N Teilchen

Es ist zu bemerken, dass die P_{ij} i.A. nicht miteinander vertauschen, es also nicht unbedingt gemeinsame Eigenfunktionen geben müsste. Die total antisymmetrische $|\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle_A$ und die symmetrischen Wellenfunktionen $|\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle_S$ kann man jedoch definieren und per Konstruktion zeigen, dass

$$\begin{aligned}
 \mathcal{P}|\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle_S &= |\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle_S \\
 \mathcal{P}|\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle_A &= (-1)^{\pi_{\mathcal{P}}} |\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle_A,
 \end{aligned}$$

wobei $\pi_{\mathcal{P}}$ die (minimale) Zahl der Transpositionen angibt, aus denen \mathcal{P} aufgebaut ist, so daß

$$(-1)^{\pi_{\mathcal{P}}} = \begin{cases} 1 & \text{falls } \mathcal{P} \text{ gerade} \\ -1 & \text{falls } \mathcal{P} \text{ ungerade} \end{cases}.$$

Die symmetrischen bzw. antisymmetrischen N -Teilchen-Zustände lauten dann in voller Allgemeinheit:

$$|\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle_S = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathcal{P}} \mathcal{P}|\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle \quad (6.5)$$

$$|\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathcal{P}} (-1)^{\pi_{\mathcal{P}}} \mathcal{P}|\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle \quad (6.6)$$

Der Ket $|\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle$ bedeutet dabei einen Produktzustand wie in (6.2). Die Summe geht über alle $N!$ Permutationen.

Die Erfahrung zeigt, daß andere als symmetrische oder antisymmetrische Zustände in der Natur für identische Teilchen *nicht vorkommen*.

Slater Determinante

Die antisymmetrische Kombination (6.6) läßt sich auch noch anders schreiben. Es handelt sich

nämlich genau um die Definition einer *Determinante* mit den Einteilchen-Wellenfunktionen als Einträge:

$$|\lambda_1, \dots, \lambda_N\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |\lambda_1\rangle_1 & |\lambda_1\rangle_2 & \cdots & |\lambda_1\rangle_N \\ |\lambda_2\rangle_1 & |\lambda_2\rangle_2 & \cdots & |\lambda_2\rangle_N \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |\lambda_N\rangle_1 & |\lambda_N\rangle_2 & \cdots & |\lambda_N\rangle_N \end{vmatrix} \quad (6.7)$$

Dieser Ausdruck heißt *Slater-Determinante*. Durch die Determinantenform wird die Antisymmetrie unter Transpositionen sofort deutlich: Ein Austausch zweier Teilchen entspricht nämlich dem Austausch zweier Zeilen in der Determinante. Andere Zustände aus \mathcal{H} mit komplizierterer Symmetrie als (6.5) und (6.6) bzw. (6.7) kommen aller Erfahrung nach in der Natur nicht vor.

6.1.2 Bosonen und Fermionen

Nach den Ausführungen des vorigen Abschnittes kann der gesamte Hilbert-Raum N identischer Teilchen als direkte Summe dreier Räume geschrieben werden:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_N \\ &= \mathcal{H}_S \oplus \mathcal{H}_A \oplus \mathcal{H}_R \end{aligned}$$

Dabei enthält \mathcal{H}_A alle antisymmetrischen und \mathcal{H}_S alle symmetrischen Linearkombinationen aus den Einteilchen-Zuständen, und in \mathcal{H}_R stecken alle Zustände komplizierterer Symmetrie.

Observablen

Wir betrachten nun eine Observable A (also einen hermiteschen Operator). Die Anteile von A , die auf die Einzelteilchen separat wirken, seien mit $A^{(1)}$ bezeichnet. Es gilt

$$A^{(1)} = \sum_{i=1}^N A(i). \quad (6.8)$$

Hier ist i die Nummer eines Teilchens und $A(i)$ der Einteilchen-Operator, der eben auf dieses eine Teilchen wirkt. Ein gemeinsames Potential für alle Teilchen wäre ein Beispiel. Die Anteile in A , die Zweiteilchen-Wechselwirkungen beschreiben, bezeichnen wir mit $A^{(2)}$. Es gilt dann

$$A^{(2)} = \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^N A(i, j), \quad (6.9)$$

wobei $A(i, j)$ eine Wechselwirkung des i -ten mit dem j -ten Teilchen beschreibt. Der Operator A ist offensichtlich invariant gegen eine Vertauschung $i \leftrightarrow j$. Das heißt: Nur die symmetrischen Funktionen der Observablen der Einzelteilchen bilden eine physikalische Observable des Gesamtsystems.

Observable und Permutations-Symmetrie

Wir zeigen nun, daß die Anwendung einer Observablen auf einen Zustand die Symmetrie-Eigenschaft dieses Zustandes nicht verändert, daß also

$$A\mathcal{H}_S \subset \mathcal{H}_S \quad \text{und} \quad A\mathcal{H}_A \subset \mathcal{H}_A. \quad (6.10)$$

Zunächst ist festzustellen, daß

$$[A, P_{ij}] = 0 \quad \Rightarrow \quad [A, \mathcal{P}] = 0 .$$

Wenn aber die Wahl einer bestimmten Permutation keine Rolle spielen soll, dann ist jeder Meßprozeß am System nur bis auf eine *Austauschentartung* eindeutig. Das heißt insbesondere, daß durch solche Messungen niemals der Zustand jedes einzelnen Teilchens festgelegt werden kann. Es gilt

$$P_{ij}|\Psi\rangle_{S/A} = \pm|\Psi\rangle_{S/A} ,$$

und weiter

$$P_{ij}A|\Psi\rangle_{S/A} = AP_{ij}|\Psi\rangle_{S/A} = \pm A|\Psi\rangle_{S/A} .$$

Also bleibt die Symmetrie-Eigenschaft des Zustandes auch nach Anwendung des Operators A erhalten. Es folgt, daß es keine Matrixelemente für Observablen gibt, die symmetrische und antisymmetrische Zustände mischen. Das gilt auch, wenn man die zeitliche Entwicklung der Zustände mit in Betracht zieht, da $[U, \mathcal{P}] = 0$.

Spin-Statistik-Theorem

Die Erfahrung zeigt, dass die Wellenfunktionen ununterscheidbarer Teilchen (d.h. der Elementarteilchen) entscheidenen Einschränkungen unterliegt. Das *Spin-Statistik-Theorem* kann man zudem auch mit Hilfe der Quantenfeldtheorie herleiten.¹

Spin-Statistik-Theorem

Die Zustände eines Systems aus N ununterscheidbarer Teilchen sind entweder total symmetrisch oder total antisymmetrisch bzgl. Teilchenaustausch. Diese Symmetriebedingung für die N -Teilchen Wellenfunktionen werden eineindeutig durch den Spin der Elementarteilchen bestimmt.

Gemischte Symmetrien kommen in der Natur nicht vor. Damit lassen sich alle Elementarteilchen in zwei Gruppen einteilen.

- Bosonen

Man nennt Teilchen mit symmetrischen N -Teilchen-Wellenfunktionen *Bosonen*, sie haben ganzzahligen Spin.

Photonen, Gluonen, π -Mesonen und die Austauschteilchen der schwachen Wechselwirkung W^\pm und Z^0 sind Bosonen.

- Fermionen

Fermionen haben antisymmetrischen Wellenfunktionen und halbzahligen Spin.

Beispiele für Fermionen sind Leptonen (Elektron) und Quarks bzw. Baryonen (Neutron, Proton).

¹Ein Beweis findet sich in R. F. Streater und A. S. Wightman. "PCT, Spin and Statistics, and all that." Benjamin/Cummings, Reading, Mass., 1964.

Wir bemerken noch am Rande, dass Elementarteilchen nach Definition keine innere Struktur haben, also Punktteilchen sind.

Pauli Prinzip

Die Forderung nach Antisymmetrie bei Fermionen hat wichtige Konsequenzen. Zwei identische Fermionen können niemals den gleichen Einteilchen-Zustand einnehmen. Dieses Gesetz ist als *Pauli-Prinzip* bekannt. Zum Beweis betrachte man einen antisymmetrischen N -Teilchen-Zustand, in dem zwei Einteilchen-Zustände gleich sind. Es gilt:

$$|\lambda_1, \dots, \lambda_i, \dots, \lambda_j, \dots, \lambda_N\rangle = -|\lambda_1, \dots, \lambda_j, \dots, \lambda_i, \dots, \lambda_N\rangle$$

Es folgt hiermit sofort, daß

$$|\lambda_1, \dots, \lambda_i, \dots, \lambda_j, \dots, \lambda_N\rangle = 0, \quad \text{falls} \quad |\lambda_i\rangle = |\lambda_j\rangle .$$

Zwei identische Fermionen dürfen also nie in allen Einteilchen-Quantenzahlen gleichzeitig übereinstimmen, denn das hätte zur Folge, daß der N -Teilchen Zustand nicht existierte (man sieht das auch schon in (6.7): Die Determinante verschwindet, wenn zwei Zeilen gleich sind). Folglich muß bei der Auffüllung von Zuständen mit Fermionen stets das Pauli-Prinzip beachtet werden. Das Periodensystem der Elemente entsteht auf diese Art.

6.2 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

6.2.1 Fockraum

Großkanonischer Zustandsraum

Bisher haben wir immer einen Hilbertraum mit fester Teilchenzahl betrachtet, z.B. $N = 2$. Wir können nun aber den Raum Hilbertraum erweitern und eine beliebige Anzahl von (hier: identischen) Teilchen zulassen:

$$\mathcal{H}_{A/S} = \mathcal{H}_{A/S}^{(0)} \otimes \mathcal{H}_{A/S}^{(1)} \otimes \mathcal{H}_{A/S}^{(2)} \otimes \dots ,$$

wobei der hochgestellte Index (N) die Anzahl Teilchen im Raum $\mathcal{H}_{A/S}^{(N)}$ anzeigt. Den (Produkt-) Raum $\mathcal{H}_{A/S}$ nennt man den *Fockraum*, es ist der Zustandsraum der großkannoischen Statistik.

Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Man kann nun “Absteige-” und “Aufsteigeoperatoren” zwischen Segmenten des Fockraums mit verschiedenen Teilchenzahlen definieren. Diese Operatoren erzeugen und vernichten als Teilchen, man nehmt sie demzufolge die *Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren*. Sie spielen eine zentrale Rolle bei allen ernsthaften Rechnungen innerhalb der Quantenmechanik.

Zweite Quantisierung

Das Segment des Fockraumes ohne ein einziges Teilchen nennt man das Vakuum, wir bezeichnen es mit

$$|0\rangle \quad : \text{Vakuum} .$$

Die (basisunabhängige) Notation für einen Zustand mit N Teilchen mit (vollständigen) Quantenzahlen $\alpha_1, \dots, \alpha_N$ (z.B. $(\alpha_i = k_i, \sigma_i$ für Elektronen) bezeichnen wir mit

$$|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle \quad : N\text{-Teilchen Zustand .}$$

Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren bezeichnen wir mit $\mathbf{c}_\alpha^\dagger$ und \mathbf{c}_α für Fermionen und $\mathbf{b}_\alpha^\dagger$ und \mathbf{b}_α für Bosonen. Sie sind via

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_\alpha^\dagger|0\rangle &= |\alpha\rangle, & \mathbf{c}_\alpha|\alpha\rangle &= |0\rangle & : \text{Fermionen ,} \\ \mathbf{b}_\alpha^\dagger|0\rangle &= |\alpha\rangle, & \mathbf{b}_\alpha|\alpha\rangle &= |0\rangle & : \text{Bosonen} \end{aligned}$$

definiert, diese Darstellung nennt man auch *zweite Quantisierung*. Für einen allgemeinen N -Teilchenzustand gilt analog

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_\alpha^\dagger|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle &= |\alpha, \alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle, & \mathbf{c}_\alpha|\alpha, \alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle &= |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle, \\ \mathbf{b}_\alpha^\dagger|\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle &= |\alpha, \alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle, & \mathbf{b}_\alpha|\alpha, \alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle &= |\alpha_1, \dots, \alpha_N\rangle. \end{aligned}$$

Das Vakuum enthält keine Teilchen, also

$$\mathbf{c}_\alpha|0\rangle \equiv 0,$$

denn es ist nicht möglich Teilchen aus dem Vakuum zu entfernen.

6.2.2 Vertauschungsrelationen

Zentral ist nun die folgende Fragestellung (hier am Beispiel von 2-Fermionen): Sind die Zustände

$$\mathbf{c}_\alpha^\dagger\mathbf{c}_\beta^\dagger|0\rangle \quad \text{und} \quad \mathbf{c}_\beta^\dagger\mathbf{c}_\alpha^\dagger|0\rangle$$

gleich oder unterscheiden sie sich durch eine Phase? Mehr als durch eine Phase können sie sich nicht unterscheiden, denn $\mathbf{c}_\alpha^\dagger\mathbf{c}_\beta^\dagger|0\rangle$ und $\mathbf{c}_\beta^\dagger\mathbf{c}_\alpha^\dagger|0\rangle$ haben identische Quantenzahlen. Die Antwort hierauf wird durch die Vertauschungsrelationen gegeben. Wir definieren denn Kommutator $[\cdot]_-$ und den Antikommutator $[\cdot]_+$ via

$$[A, B]_- = AB - BA, \quad [A, B]_+ = AB + BA.$$

Zudem ist auch das Symbol $\{A, b\}$ für den Antikommutator gebräuchlich.

Bosonen

Für Bosonen und diskrete Quantenzahlen sind die Vertauschungsrelationen

$$[\mathbf{b}_\alpha, \mathbf{b}_\beta]_- = 0, \quad [\mathbf{b}_\alpha^\dagger, \mathbf{b}_\beta^\dagger]_- = 0, \quad [\mathbf{b}_\alpha, \mathbf{b}_\beta^\dagger]_- = \delta_{\alpha, \beta}.$$

gültig. Für kontinuierliche Quantenzahlen ersetzen wir $\delta_{\alpha, \beta} \rightarrow \delta(\alpha - \beta)$. Bosonen unterschiedlicher Quantenzahlen vertauschen also. Bezüglich der Eingangsfrage gilt:

$$|\alpha, \beta\rangle = \mathbf{b}_\alpha^\dagger\mathbf{b}_\beta^\dagger|0\rangle = \mathbf{b}_\beta^\dagger\mathbf{b}_\alpha^\dagger|0\rangle = |\beta, \alpha\rangle.$$

Eine Permutation von zwei Indizes führt also nicht zu einer zusätzlichen Phase.

Fermionen

Für Fermionen lauten die Vertauschungsrelationen

$$[\mathbf{c}_\alpha, \mathbf{c}_\beta]_+ = 0, \quad [\mathbf{c}_\alpha^\dagger, \mathbf{c}_\beta^\dagger]_+ = 0, \quad [\mathbf{c}_\alpha, \mathbf{c}_\beta^\dagger]_+ = \delta_{\alpha,\beta}.$$

Bezüglich der Eingangsfrage gilt:

$$|\alpha, \beta\rangle = \mathbf{c}_\alpha^\dagger \mathbf{c}_\beta^\dagger |0\rangle = -\mathbf{c}_\beta^\dagger \mathbf{c}_\alpha^\dagger |0\rangle = -|\beta, \alpha\rangle.$$

Eine Permutation von zwei Indizes führt also nicht zu einer zusätzlichen Phase. Insbesondere folgt hieraus für $\alpha = \beta$ das Pauli-Prinzip,

$$|\alpha, \alpha\rangle = -|\alpha, \alpha\rangle = 0.$$

Zwei Fermionen können nicht die gleichen Quantenzahlen haben.

Teilchenzahl-Operator

Aus den Vertauschungsrelationen folgt zudem, daß die Operatoren

$$\mathbf{n}_\alpha = \mathbf{c}_\alpha^\dagger \mathbf{c}_\alpha, \quad \mathbf{n}_\alpha = \mathbf{b}_\alpha^\dagger \mathbf{b}_\alpha$$

die Teilchenzahloperatoren für Fermionen und Bosonen sind. Für Fermionen gilt

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_\alpha |0\rangle &= \mathbf{c}_\alpha^\dagger \mathbf{c}_\alpha |0\rangle = 0 \\ \mathbf{n}_\alpha |\alpha\rangle &= \mathbf{c}_\alpha^\dagger \mathbf{c}_\alpha \mathbf{c}_\alpha^\dagger |0\rangle = \mathbf{c}_\alpha^\dagger (1 - \mathbf{c}_\alpha^\dagger \mathbf{c}_\alpha) |0\rangle = \mathbf{c}_\alpha^\dagger |0\rangle - \mathbf{c}_\alpha^\dagger \mathbf{c}_\alpha^\dagger \mathbf{c}_\alpha |0\rangle = |\alpha\rangle. \end{aligned}$$

Für Bosonen gilt

$$\mathbf{n}_\alpha (\mathbf{b}_\alpha^\dagger)^N |0\rangle = N (\mathbf{b}_\alpha^\dagger)^N |0\rangle,$$

wie man leicht rekursiv beweisen kann.

Normierung

Fermi-Zustände sind von sich aus normiert, da die Besetzungszahlen nur Null oder Eins sind:

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \langle 0 | \mathbf{c}_\alpha \mathbf{c}_\alpha^\dagger |0\rangle = \langle 0 | 1 - \mathbf{c}_\alpha^\dagger \mathbf{c}_\alpha |0\rangle = \langle 0 | 0 \rangle = 1.$$

Der normierte bosonische Zustand mit N Bosonen im gleichen Orbital α ist

$$|\alpha^N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} (\mathbf{b}_\alpha^\dagger)^N |0\rangle,$$

wie man rekursiv beweisen kann. Hieraus folgt für das Matrixelement:

$$\mathbf{b}_\alpha^\dagger |\alpha^N\rangle = \frac{\sqrt{N+1}}{\sqrt{N+1}} \frac{1}{\sqrt{N!}} (\mathbf{b}_\alpha^\dagger)^{N+1} |0\rangle = \sqrt{N+1} |\alpha^{N+1}\rangle.$$

Man beachte, dass der Normierungsfaktor $1/\sqrt{N!}$ auch im kohärente Zustand (5.40) des Lichtfeldes auftritt. Dieses ist kein Zufall, den Photonen sind Bosonen.

6.3 Licht-Materie-Wechselwirkung in zweiter Quantisierung

Wir wollen nun, in Verbindung mit Kapitel 5, die Wechselwirkung von Licht mit Materie untersuchen. Die Darstellung der Materie-Zustände in zweiter Quantisierung wird es uns dabei erlauben, das Konzept der *Feynman Diagramme* einzuführen, welches sowohl in der Vielteilchentheorie wie auch in der Theorie der Elementarteilchen eine zentrale Rolle spielt.

Da wir jetzt alles in zweiter Quantisierung aufschreiben werden, verzeihen wir darauf Operatoren durch Fettdruck auszuzeichnen.

6.3.1 Licht-Materie Hamiltonian in zweiter Quantisierung

Wir beschreiben die Wechselwirkung von Photonen und Elektronen komplett in zweiter Quantisierung. Der Hamiltonian lautet

$$H = H_{mat} + H_I + H_{em} ,$$

wobei H_{mat} die Anteile jeweils die Elektronen alleine, H_I die Wechselwirkung mit dem Strahlungsfeld (5.47), und H_{em} das elektromagnetische Feld alleine beschreiben:

$$H_{mat} = \int d^3r \psi^\dagger(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) \quad (6.11)$$

$$H_I = \int d^3r \psi^\dagger(\vec{r}) \left(-\frac{e}{mc} \vec{A}_{op} \cdot \vec{p} + \frac{e^2}{2mc^2} (\vec{A}_{op})^2 \right) \psi(\vec{r}) \quad (6.12)$$

$$H_{em} = \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{\vec{q}} \left(a_{\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \right) \quad (6.13)$$

Dabei ist

$$\vec{A}_{op} = \sum_{\vec{q}} \sqrt{\frac{2\pi \hbar c^2}{V \omega_{\vec{q}}}} \left(a_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} + a_{\vec{q}}^\dagger e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \right) \vec{u}_{\vec{q}}$$

das Vektorpotential des Lichtfeldes, vergleiche (5.21) und (5.47).

- Die Operatoren $\psi^\dagger(\vec{x})$ und $\psi(\vec{x})$ sind die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Elektronen am Orte \vec{x} .
- Die Summation über den Polarisationsindex ist in die \vec{q} -Summation gesteckt worden.
- Die Kletter-Operatoren $a_{\vec{q}}^\dagger$ und $a_{\vec{q}}$ für das Lichtfeld sind im Heisenberg-Bild, also zeitabhängig.
- Der gesamte Hamiltonian wirkt in einem Produkt-Raum aus den beiden Fock-Räumen für Elektronen und Photonen:

$$\mathcal{H}_{Materie} \otimes \mathcal{H}_{Photonen} .$$

Feldoperatoren

Wir wollen zunächst freie Elektronen untersuchen, es ist also $V(\vec{r}) = 0$. Als vollständiges Orthonormalsystem für die Feldoperatoren der Elektronen bieten sich dann ebene Wellen an,

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{V}} c_{\vec{k}}, \quad \Psi_{\vec{k}}^\dagger(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} \frac{e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{V}} c_{\vec{k}}^\dagger,$$

mit dem (Anti-) Kommutationrelationen

$$\begin{aligned} [\Psi^\dagger(\vec{x}), \Psi^\dagger(\vec{y})]_+ &= 0, & [\Psi(\vec{x}), \Psi(\vec{y})]_+ &= 0, & [\Psi(\vec{x}), \Psi^\dagger(\vec{y})]_+ &= \delta(\vec{x} - \vec{y}), \\ [c_{\vec{k}}^\dagger, c_{\vec{p}}^\dagger]_+ &= 0, & [c_{\vec{k}}, c_{\vec{p}}]_+ &= 0, & [c_{\vec{k}}, c_{\vec{p}}^\dagger]_+ &= \delta_{\vec{k}, \vec{p}}. \end{aligned}$$

Dispersionsrelation

Damit können wir H_{mat} vollständig in Kletter-Operatoren ausdrücken:

$$H_{mat} = \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{1}{V} \int d^3 r \underbrace{e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}}}_{= \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \hbar^2 \vec{k}^2 / 2m} c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}'},$$

wobei $\epsilon_k = \hbar^2 \vec{k}^2 / 2m$ als Dispersionsrelation bezeichnet wird, also

$$H_{mat} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} \epsilon_k n_{\vec{k}}, \quad (6.14)$$

wenn wir den Besetzungszahloperator $n_{\vec{k}}$ verwenden.

Die Interpretation von (6.14) ist sehr einfach: Die Energie eines Vielteilchenzustandes ist (ohne Wechselwirkung) einfach die Summe der besetzten Einteilchenniveaus. Man beachte, dass diese einfache Darstellung zusammenbricht, sobald man die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen berücksichtigt.

Paramagnetischer Störterm

Mit dem Anteil H_I werden wir später Störungsrechnung betreiben. Ihn spaltet man am besten in seine beiden Summanden auf: $H_I = H_I' + H_I''$, wobei der paramagnetische Term H_I' linear im Vektorpotential ist und der diamagnetische Term H_I'' quadratisch. Wir behandeln zunächst den paramagnetischen Anteil.

$$\begin{aligned} H_I' &= \frac{1}{V} \int d^3 r \sum_{\vec{k}_1} e^{-i\vec{k}_1\cdot\vec{r}} c_{\vec{k}_1}^\dagger \left(-\frac{e\hbar}{imc} \sum_{\vec{q}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_{\vec{q}}}} \left(a_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} + a_{\vec{q}}^\dagger e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \right) \vec{u}_{\vec{q}} \cdot \vec{\nabla} \right) \sum_{\vec{k}_2} e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{r}} c_{\vec{k}_2} \\ &= \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}} \left(M_1(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}) c_{\vec{k}_1}^\dagger c_{\vec{k}_2} a_{\vec{q}} + M_1(\vec{k}_1, \vec{k}_2, -\vec{q}) c_{\vec{k}_1}^\dagger c_{\vec{k}_2} a_{\vec{q}}^\dagger \right), \end{aligned} \quad (6.15)$$

wobei \vec{q} wieder den Polarisationsindex beinhaltet. Es ist

$$\begin{aligned}
 M_1(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}) &= \frac{1}{V} \int e^{-i\vec{k}_1 \vec{r}} \left(-\frac{e\hbar}{imc} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_{\vec{q}}}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \vec{u}_{\vec{q}} \cdot (i\vec{k}_2) e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}} \right) d^3r \\
 &= -\frac{e\hbar}{Vmc} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_{\vec{q}}}} (\vec{u}_{\vec{q}} \cdot \vec{k}_2) \int e^{i(\vec{q} + \vec{k}_2 - \vec{k}_1) \cdot \vec{r}} d^3r \\
 &= -\frac{e\hbar}{mc} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_{\vec{q}}}} (\vec{u}_{\vec{q}} \cdot \vec{k}_2) \delta_{\vec{k}_1, \vec{q} + \vec{k}_2}. \tag{6.16}
 \end{aligned}$$

Der letzte Ausdruck (6.16) ist nichts weiter als die Impulserhaltung. Der Anteil H'_I beschreibt durch seine zwei Terme in (6.15) zwei Arten von Prozessen:

- Der erste Term vernichtet ein Photon \vec{q} und ein Elektron \vec{k}_2 und erzeugt ein Elektron \vec{k}_1 , dabei ist der totale Impuls erhalten: $\vec{k}_1 = \vec{q} + \vec{k}_2$.
- Der zweite Term erzeugt ein Photon \vec{q} und ein Elektron \vec{k}_1 und vernichtet ein Elektron \vec{k}_2 . Der Gesamtimpuls ist wegen $\vec{k}_2 = \vec{q} + \vec{k}_1$ erhalten.

Vereinfachung

Man kann leicht zeigen, daß der zweite Term in (6.15) das hermitesch Konjugierte des ersten ist. Im ersten Term steht nämlich

$$\vec{u}_{\vec{q}} \cdot \vec{k}_2 = \vec{u}_{\vec{q}} \cdot (\vec{k}_1 - \vec{q}) = \vec{u}_{\vec{q}} \cdot \vec{k}_1,$$

also kann man beim Übergang zum zweiten Term statt $\vec{q} \rightarrow -\vec{q}$ auch den Austausch $\vec{k}_1 \leftrightarrow \vec{k}_2$ vornehmen. Dann ist das hermitesch Konjugierte des zweiten Terms gleich

$$\left(\sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}} M_1(\vec{k}_2, \vec{k}_1, \vec{q}) c_{\vec{k}_1}^\dagger c_{\vec{k}_2} a_{\vec{q}}^\dagger \right)^\dagger = \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}} M_1(\vec{k}_2, \vec{k}_1, \vec{q}) c_{\vec{k}_2}^\dagger c_{\vec{k}_1} a_{\vec{q}} = \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}} M_1(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}) c_{\vec{k}_1}^\dagger c_{\vec{k}_2} a_{\vec{q}},$$

und das ist gleich dem ersten Term. Der paramagnetische Anteil H'_I der Licht-Materie-Wechselwirkung schreibt sich also einfach als

$$H'_I = \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}} \left(M_1(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}) c_{\vec{k}_1}^\dagger c_{\vec{k}_2} a_{\vec{q}} + \text{h.c.} \right). \tag{6.17}$$

Feynman-Diagramme

Die beiden Prozesse, die H'_I beschreibt, können durch einfache Diagramme visualisiert werden. Abb. 6.1 links zeigt den ersten Prozeß, die Vernichtung eines Photons \vec{q} unter Streuung eines Elektrons \vec{k}_2 nach \vec{k}_1 . Das rechte Diagramm stellt den dazu hermitesch konjugierten Prozeß dar, die Erzeugung eines Photons unter Streuung eines Elektrons.

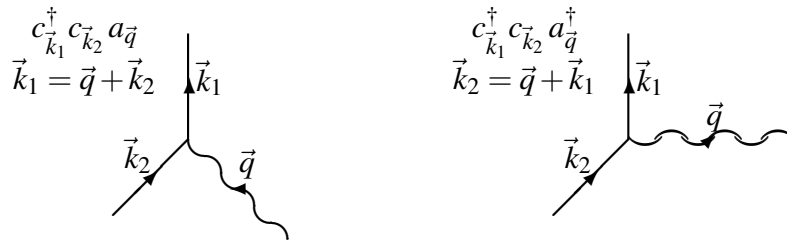


Abbildung 6.1: Prozesse erster Ordnung Störungsrechnung in H_I' . Der rechte Prozeß ist der hermitesch Konjugierte des linken.

Feynman-Diagramme

Feynman-Diagramme sind die graphische Darstellung störungstheoretischer Prozesse. Dabei entsprechen die Linien den beteiligten ein- und ausgehenden Teilchen und die Vertizes den Matrixelementen der Wechselwirkung.

Feynman-Diagramme dienen nicht nur der Veranschaulichung. In der Vielteilchentheorie und in der Theorie der Elementarteilchen steht jedes Feynman-Diagramm für einen präzisen mathematischen störungstheoretischen Ausdruck.

Impulserhaltung an den Vertices

Ein Punkt, an dem sich verschiedene Teilchenlinien treffen, heißt *Vertex*. Das Kronecker-Delta in M_1 verlangt, daß an einem Vertex der Gesamtimpuls der vernichteten gleich dem Gesamtimpuls der erzeugten Teilchen ist.

Diamagnetischer Störterm

Der Anteil H_I'' im Hamiltonian enthält vier Terme, die aus dem Produkt \vec{A}^2 kommen:

$$\begin{aligned}
 H_I'' &= \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \sum_{\vec{q}_1, \vec{q}_2} \left(M_2(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}_1, \vec{q}_2) c_{\vec{k}_1}^\dagger c_{\vec{k}_2} a_{\vec{q}_1} a_{\vec{q}_2} + \right. \\
 &\quad + M_2(\vec{k}_1, \vec{k}_2, -\vec{q}_1, \vec{q}_2) c_{\vec{k}_1}^\dagger c_{\vec{k}_2} a_{\vec{q}_1}^\dagger a_{\vec{q}_2} + \\
 &\quad + M_2(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}_1, -\vec{q}_2) c_{\vec{k}_1}^\dagger c_{\vec{k}_2} a_{\vec{q}_1} a_{\vec{q}_2}^\dagger + \\
 &\quad \left. + M_2(\vec{k}_1, \vec{k}_2, -\vec{q}_1, -\vec{q}_2) c_{\vec{k}_1}^\dagger c_{\vec{k}_2} a_{\vec{q}_1}^\dagger a_{\vec{q}_2}^\dagger \right) = \quad (6.18) \\
 &= \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \sum_{\vec{q}_1, \vec{q}_2} \left(M_2(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}_1, \vec{q}_2) c_{\vec{k}_1}^\dagger c_{\vec{k}_2} a_{\vec{q}_1} a_{\vec{q}_2} + M_2(\vec{k}_1, \vec{k}_2, -\vec{q}_1, \vec{q}_2) c_{\vec{k}_1}^\dagger c_{\vec{k}_2} a_{\vec{q}_1}^\dagger a_{\vec{q}_2} + \text{h.c.} \right)
 \end{aligned}$$

Dabei ist

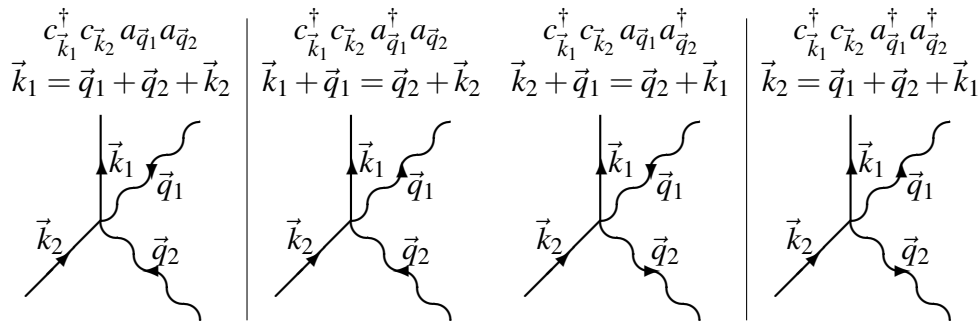


Abbildung 6.2: Prozesse erster Ordnung Störungsrechnung in H_I'' . Die mittleren beiden Graphen beschreiben Beiträge zur Compton-Streuung. Die rechten beiden Diagramme sind die hermitesch Konjugierten der linken.

$$\begin{aligned}
 M_2(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}_1, \vec{q}_2) &= \frac{2\pi\hbar c^2}{V} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\vec{q}_1} \omega_{\vec{q}_2}}} \frac{1}{V} \frac{e^2}{2mc^2} \int e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}} e^{i(\vec{q}_1 + \vec{q}_2) \cdot \vec{r}} e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}} (\vec{u}_{\vec{q}_1} \cdot \vec{u}_{\vec{q}_2}) d^3r \\
 &= \frac{2\pi\hbar c^2}{V} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\vec{q}_1} \omega_{\vec{q}_2}}} \frac{e^2}{2mc^2} (\vec{u}_{\vec{q}_1} \cdot \vec{u}_{\vec{q}_2}) \delta_{\vec{k}_1, \vec{k}_2 + \vec{q}_1 + \vec{q}_2}.
 \end{aligned} \tag{6.19}$$

Die vier Terme in (6.18) beschreiben Vertices, an denen jeweils zwei Elektronen und zwei Photonen beteiligt sind. Abb. 6.2 zeigt die zugehörigen Feynman-Graphen. Die Größen M_1 und M_2 legen jeweils fest, mit welcher Wahrscheinlichkeit die zugehörigen Prozesse auftreten können.

Compton Streuung

Die mittleren beiden Graphen in der Abbildung zeigen die Streuung eines Photons an einem (freien) Elektron, also die *Compton-Streuung* (“ein Photon” ist es ja eigentlich nicht — es wird ein Photon vernichtet und ein anderes erzeugt, zumindest kann man es sich so veranschaulichen). Die anderen beiden Diagramme beschreiben Emissions- und Absorptionsprozesse mit zwei Photonen. An einem Vertex, der durch H_I'' erzeugt wird, sind immer zwei Photonenlinien beteiligt.

6.3.2 Nichtrelativistische Bremsstrahlung

Im folgenden untersuchen wir die Streuung eines Elektrons an einem Potential, z. B. einem feststehenden (weil im Vergleich zum Elektron schweren) Kern. Das geladene Teilchen wird dabei beschleunigt und strahlt Energie in Form von Photonen ab. Dieser Effekt ist als *Bremsstrahlung* bekannt, er wird in jeder Zahnarztpraxis benutzt um geeignete Strahlung für Röntgenaufnahmen zu produzieren. Es soll $v/c \ll 1$, also der nichtrelativistische Grenzfall gelten.

Störterme

Wir interessieren uns nur für die Emission eines einzigen Photons, also ist H_I' der Wechselwirkungsterm. Außerdem soll auch das Potential $V_K(\vec{r})$ eines Kerns aus dem Target als Störung

behandelt werden. Der gesamte Störoperator lautet somit

$$V_0 = H'_I + V_K(\vec{r}).$$

Wir bemerken, dass H'_I hier nicht vorkommt, da der diamagnetische Term in niedrigster Ordnung die Rutherford-Streuung beschreibt. In zweiter Quantisierung haben wir

$$H'_I = \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}} \left(M_1(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}) c_{\vec{k}_1}^\dagger c_{\vec{k}_2} a_{\vec{q}} + \text{h.c.} \right) \quad (6.20)$$

und

$$V_K = \int d^3r \psi_{\vec{r}}^\dagger V_K(\vec{r}) \psi_{\vec{r}} \quad \text{mit} \quad \psi_{\vec{r}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} c_{\vec{k}}.$$

Keine Impulserhaltung

Die explizite Form des Störpotentials ist

$$\begin{aligned} V_K &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \int d^3r e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}} V_K c_{\vec{k}_1}^\dagger c_{\vec{k}_2} = \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \tilde{V}_K(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) c_{\vec{k}_1}^\dagger c_{\vec{k}_2} \quad \text{mit} \quad \tilde{V}_K(\vec{k}) = \int V_K(\vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d^3r. \end{aligned}$$

Das Potential V_K ist reell, also ist die Fourier-Transformierte \tilde{V}_K hermite-symmetrisch, d. h. $\tilde{V}_K(-\vec{k}) = \tilde{V}_K^*(\vec{k})$.

Wir beachten, dass der Gesamtimpuls nicht erhalten ist, denn der Hamiltonian ist nicht translationsinvariant. Bei der Streuung an V_K kann Impuls an das Gitter abgegeben werden.

Goldene Regel

Mit dem Störoperator V_0 sollen nun Übergänge induziert werden. Fermis goldene Regel für die Übergangsrates lautet

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_i - E_f) |M_{if}|^2 \quad (6.21)$$

mit

$$M_{if} = M_{if}^{(1)} + M_{if}^{(2)}.$$

Die Energien E_i und E_f bedeuten die Gesamtenergien von Elektronen und Strahlungsfeld vor und nach dem Übergang. Anfangs- und Endzustand sind

$$|i\rangle = c_{\vec{k}}^\dagger |0\rangle : \text{Kein Photon, ein Elektron } \hbar\vec{k}. \quad E_i = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \quad (6.22)$$

$$|f\rangle = c_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{q}}^\dagger |0\rangle : \text{Ein Photon } \hbar\vec{q}, \text{ ein Elektron } \hbar\vec{k}'. \quad E_f = \frac{\hbar^2 \vec{k}'^2}{2m} + \hbar c q \quad (6.23)$$

Dabei ist $q = |\vec{q}|$.

Übergangsrates.

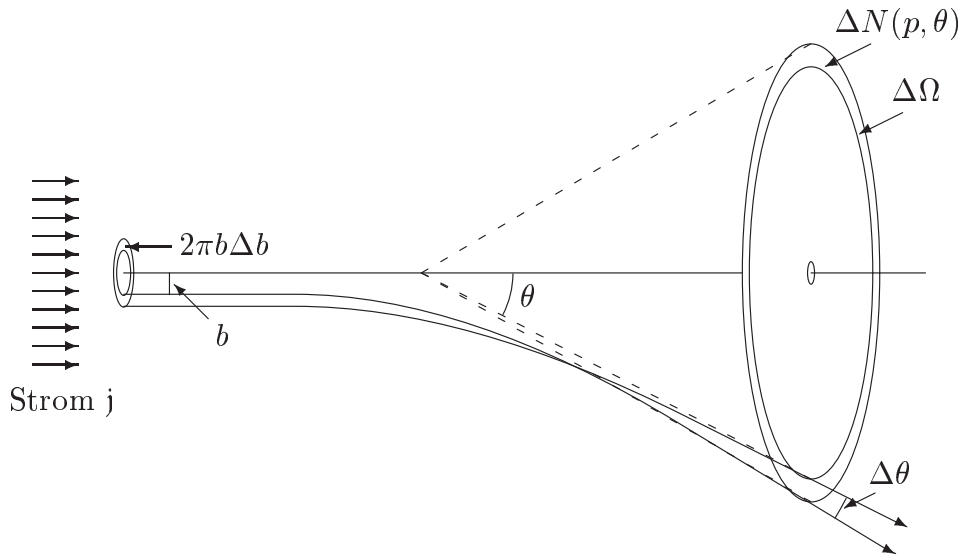


Abbildung 6.3: Zur Geometrie der elastischen Streuung. Die Fläche $\Delta\sigma$ des einfallenden Strahles ist $\Delta\sigma = 2\pi\Delta b$ und der ausfallende Raumwinkel $\Delta\Omega$.

Mit Hilfe der Goldenen Regel wollen wir einen differentiellen Streuquerschnitt berechnen, und betrachten zunächst den allgemeinen Ausdruck für die Übergangsrate. Wir wiederholen hier kurz die definition des differentiellen Streuquerschnittes, wie er aus der Mechanik bekannt ist.

Angenommen, ein Teilchenstrom der Dichte j_i (Teilchenzahl pro Fläche und Zeit, i für 'initial') trifft auf ein Streupotential. Dann wird ein Detektor, der im Raumwinkel-Element $d\Omega$ und im Bereich der Impulsbeträge zwischen k' und $k' + dk'$ die gestreuten Teilchen zählt, eine gewisse Zählrate (Ereignisse pro s) messen. Diese Rate ist gleich

$$\frac{V}{(2\pi)^3} k'^2 dk' d\Omega \Gamma_{i \rightarrow f} = j_i d\sigma, \quad (6.24)$$

wobei $d\sigma$ ein differentiales Flächenelement senkrecht zu einfallenden Teilchenstrom j_i ist und $\Gamma_{i \rightarrow f}$ die Übergangsrate in den Endzustand \vec{k}' , siehe Abb. 6.3.

Der Ausdruck (6.24) leitet sich aus der Erhaltung des Teilchenstrom her und beinhaltet eine Integration der Übergangsrate über ein kleines Element $d^3k' = k'^2 dk' d\Omega$ des Impulsraumes, nämlich genau das Element, in dem der Detektor empfindlich ist. Jetzt kommt es darauf an, wie man den Meßvorgang genau gestaltet.

Allgemeiner Streuquerschnitt

Wir müssen im folgenden etwas genauer spezifizieren, was der Detektor eigentlich mißt. Falls der Detektor *wellenlängendispersiv* arbeitet, ist die interessierende Größe

$$\frac{d^2\sigma}{dk' d\Omega}(k', \Omega) = \frac{1}{j_i} \frac{V}{(2\pi)^3} k'^2 \Gamma_{i \rightarrow f}.$$

Der Streuquerschnitt ist ein Maß dafür, wie stark das Streuzentrum in den Raumwinkel $d\Omega$ und in den Impulsbereich zwischen k' und $k' + dk'$ streut.

Differentieller Streuquerschnitt

Angenommen, der Detektor ist nicht nur für den Impulsbereich dk' um k herum empfindlich, sondern zählt einfach alle in $d\Omega$ gestreuten Teilchen ohne Rücksicht auf ihre Energie. Man integriert dann die linke Seite von (6.24) über dk' und nennt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\Omega) := \frac{1}{j_i} \frac{V}{(2\pi)^3} \int k'^2 \Gamma_{i \rightarrow f} dk'$$

den *differentiellen Streuquerschnitt* für die Streuung nach Ω .

Endzustände bei der Bremsstrahlung

Im Fall der Bremsstrahlung gibt es allerdings noch eine Komplikation. Man hat es ja nach der Streuung mit zwei Teilchen zu tun, dem Elektron $\hbar\vec{k}'$ und dem Photon $\hbar\vec{q}$. Die Energie des Photons ist nicht festgelegt, sondern gehorcht einer gewissen Verteilung. Der Detektor für die Photonen soll wellenlängendispersiv arbeiten, der für die gestreuten Elektronen dagegen nicht. Den bei der Bremsstrahlung interessieren wir uns in erster Sicht für die Wellenlänge des erzeugten Photons (wichtig für Anwendungen wie Röntgenaufnahmen), aber nicht für die Energie des gestreuten Elektrons.

Wir fragen also jetzt nach dem differentiellen Streuquerschnitt für die Streuung eines Elektrons in den Raumwinkel $d\Omega_{\vec{k}'}$ unter Aussendung eines Photons mit einem Impuls zwischen $\hbar q$ und $\hbar(q + \Delta q)$ in den Raumwinkel $d\Omega_{\vec{q}}$. Man schreibt diese Größe als

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_{\vec{k}'} d\Omega_{\vec{q}} dq}(\Omega_{\vec{k}'}, q, \Omega_{\vec{q}}).$$

Es erweist sich als günstig, die Geschwindigkeiten

$$\vec{v} := \frac{\hbar\vec{k}}{m} \quad \text{und} \quad \vec{v}' := \frac{\hbar\vec{k}'}{m}$$

einzuführen. Die eintreffende Teilchenstromdichte ist einfach gleich

$$j_i = \frac{v}{V},$$

und der gesuchte Streuquerschnitt ergibt sich zu

$$\boxed{\frac{d^3\sigma}{d\Omega_{\vec{k}'} d\Omega_{\vec{q}} dq} = \frac{V}{v} \left(\frac{V}{(2\pi)^3} \right)^2 q^2 \int \Gamma_{i \rightarrow f} k'^2 dk'}. \quad (6.25)$$

Das Periodisierungsvolumen fällt heraus, denn wie gleich klar wird, enthält $\Gamma_{i \rightarrow f}$ einen Faktor V^{-3} . Unser Ziel ist die Berechnung von (6.25). Dazu benötigt man zunächst die Matrixelemente M_{if} in der goldenen Regel (6.21).

Störungsrechnung erster Ordnung

Der Anteil V_K enthält keine Erzeuger für Photonen, also kann er in erster Ordnung keine Übergänge zwischen (6.22) und (6.23) verursachen. Den einzigen Beitrag wird der h.c.-Term in H'_I liefern. Seine Terme sind proportional zu $c_{\vec{k}_1}^\dagger c_{\vec{k}_2} a_{\vec{q}}^\dagger$, und das zugehörige Feynman-Diagramm zeigt Abb. 6.1 rechts. Allerdings gilt Impuls- und Energie-Erhaltung, und diese beiden Forderungen lassen sich nicht gleichzeitig erfüllen. Das sieht man so ein:

Sei p^μ der Viererimpuls des eintreffenden und p'^μ der des austretenden Elektrons, ferner q^μ der des Photons (wir setzen temporär $\hbar = 1$). Dann gilt

$$m^2 c^2 = p^\mu p_\mu = (p'^\mu + q^\mu) (p'_\mu + q_\mu) .$$

Die rechte Seite ergibt mit $q^\mu q_\mu = 0$ (das Photon ist masselos):

$$m^2 c^2 + 0 + p'^\mu q_\mu + q^\mu p'_\mu = m^2 c^2 + 2p'^\mu q_\mu$$

Daraus folgt $p'^\mu q_\mu = 0$. Im Ruhesystem des austretenden Elektrons ist

$$p'^\mu = (mc, 0) \quad \text{und} \quad q^\mu = \left(\frac{\hbar\omega_{\vec{q}}}{c}, \vec{q} \right) ,$$

also gilt

$$p'^\mu q_\mu = mc \hbar\omega_{\vec{q}} = 0 .$$

Die Energie des Photons verschwindet, den betrachteten Prozeß gibt es also nicht. Die Bremsstrahlung ist ein Effekt zweiter Ordnung Störungsrechnung mit V_0 .

Störungsrechnung zweiter Ordnung

Das Matrixelement $M_{if}^{(2)}$ lautet

$$M_{if}^{(2)} = \sum_m \frac{\langle f|V_0|m\rangle \langle m|V_0|i\rangle}{E_i - E_m + i\eta \hbar} , \quad \text{mit} \quad V_0 = H_I' + V_K , \quad (6.26)$$

was wir aus der QM-I, Theorie der Störungsrechnung, wissen. Um in der folgenden Rechnung nicht den Überblick zu verlieren, bedarf es etwas Buchhaltung. Für den Zwischenzustand $|m\rangle$ gibt es zwei Möglichkeiten, damit der Zähler unter der Summe nicht verschwindet.

(a) Zwischenzustand ohne Photon

Der Zwischenzustand enthält kein Photon, sondern nur ein "intermediäres" Elektron mit Impuls $\hbar\vec{k}_z$,

$$|m_a\rangle = c_{\vec{k}_z}^\dagger |0\rangle, \quad E_m^a = \frac{\hbar^2 \vec{k}_z^2}{2m} .$$

Der Zähler von (6.26) lautet

$$\langle f|H_I' + V_K|m_a\rangle \langle m_a|H_I' + V_K|i\rangle = \langle f|H_I'|m_a\rangle \langle m_a|V_K|i\rangle , \quad (6.27)$$

denn H_I' erzeugt mit seinem h.c.-Anteil genau das im Endzustand benötigte Photon, V_K hingegen gar keines. Den Feynman-Graphen zeigt Abb. 6.4 links.

(b) Zwischenzustand mit Photon

Der Zwischenzustand enthält ein Photon mit Impuls q und ein Elektron mit Impuls $\hbar\vec{k}_z$, Ein Photon $\hbar\vec{q}$, ein Elektron $\hbar\vec{k}_z$.

$$|m_b\rangle = c_{\vec{k}_z}^\dagger a_{\vec{q}}^\dagger |0\rangle, \quad E_m^b = \frac{\hbar^2 \vec{k}_z^2}{2m} + \hbar c q .$$



Abbildung 6.4: Beiträge zweiter Ordnung Störungsrechnung zur Bremsstrahlung. Der Zwischenzustand enthält entweder kein (links) oder ein (rechts) Photon. Impulserhaltung gilt nur am Vertex mit dem Photon. Die gepunktete Linie bedeutet die Wechselwirkung mit dem Kernpotential.

Der Zähler von (6.26) lautet

$$\langle f|V_K|m_b\rangle\langle m_b|H_I'|i\rangle, \quad (6.28)$$

und der Feynman-Graph ist in Abb. 6.4 rechts zu sehen. Von H_I' in den Matrixelementen schlägt immer nur der h.c.-Teil zu, der andere liefert keinen Beitrag. Die Summe in $M_{if}^{(2)}$ geht dann über alle \vec{k}_z des intermediären Elektrons und über die Fälle (a) und (b).

Die Emission der Bremsstrahlung läuft also in zwei Stufen ab: der Streuung am Kern und der Emission eines Photons (oder umgekehrt). Es folgt die Berechnung der Matrixelemente.

(a) Zwischenzustand ohne kein Photon - Matrixelemente

Zu berechnen ist (6.27). Es ist

$$\begin{aligned} \langle m_a|V_K|i\rangle &= \langle 0|c_{\vec{k}_z} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} c_{\vec{k}_1}^\dagger \tilde{V}_K(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) c_{\vec{k}_2} c_{\vec{k}}^\dagger |0\rangle \\ &= \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \langle 0| \left(c_{\vec{k}_z} c_{\vec{k}_1}^\dagger \right) \tilde{V}_K(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \left(c_{\vec{k}_2} c_{\vec{k}}^\dagger \right) |0\rangle \\ &= \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \delta_{\vec{k}_z, \vec{k}_1} \tilde{V}_K(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \delta_{\vec{k}_2, \vec{k}} = \tilde{V}_K(\vec{k}_z - \vec{k}) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \langle f|H_I'|m_a\rangle &= \langle 0|c_{\vec{k}'} a_{\vec{q}} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}_1} M_1(\vec{k}_1, \vec{k}_2, -\vec{q}_1) c_{\vec{k}_1}^\dagger c_{\vec{k}_2} a_{\vec{q}_1}^\dagger c_{\vec{k}_z}^\dagger |0\rangle \\ &= \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}_1} \langle 0| \left(c_{\vec{k}'} c_{\vec{k}_1}^\dagger \right) \left(a_{\vec{q}} a_{\vec{q}_1}^\dagger \right) \left(c_{\vec{k}_2} c_{\vec{k}_z}^\dagger \right) |0\rangle M_1(\vec{k}_1, \vec{k}_2, -\vec{q}_1) \\ &= \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}_1} \delta_{\vec{k}', \vec{k}_1} \delta_{\vec{q}, \vec{q}_1} \delta_{\vec{k}_2, \vec{k}_z} M_1(\vec{k}_1, \vec{k}_2, -\vec{q}_1) \\ &= -\frac{e\hbar}{mc} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_{\vec{q}}}} \delta_{\vec{k}_z, \vec{q} + \vec{k}'} \left(\vec{u}_{\vec{q}} \cdot \vec{k}_z \right). \end{aligned}$$

Der erste Beitrag zu $M_{if}^{(2)}$ ist also unter Beachtung von $\vec{u}_{\vec{q}}\vec{q} = 0$

$$M_{if}^{(2)}(a) = \sum_{\vec{k}_z} \frac{\langle f|H_I'|m_a\rangle\langle m_a|V_K|i\rangle}{E_i - E_m^a + i\eta\hbar} \stackrel{\eta \rightarrow 0}{=} -\frac{e\hbar}{mc} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_{\vec{q}}}} \frac{\tilde{V}_K(\vec{q} + \vec{k}' - \vec{k}) (\vec{u}_{\vec{q}} \cdot \vec{k}')}{\hbar^2 (\vec{k}^2 - (\vec{q} + \vec{k}')^2)/2m}.$$

Der Nenner des letzten Bruches verdient eine genauere Betrachtung. Er lautet

$$N_a = \frac{\hbar^2 \vec{k}'^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k}'^2 + \vec{q}^2 + 2\vec{q} \cdot \vec{k}').$$

Wegen der Erhaltung der Energie,

$$E_f = \frac{\hbar^2 \vec{k}'^2}{2m} + \hbar c q = E_i = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m},$$

läßt er sich auch als

$$N_a = \hbar c q - \frac{\hbar^2 \vec{q}^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{m} \vec{q} \cdot \vec{k}' = \hbar c q \left(1 - \frac{\hbar \vec{q} \cdot \vec{k}'}{m c q} - \frac{\hbar \vec{q}^2}{2m c q} \right) \quad (6.29)$$

schreiben. Der zweite Term in der Klammer ist aber

$$\frac{\hbar \vec{k}'}{m} \cdot \frac{\vec{q}}{c q} \approx \frac{p'}{v' m} \frac{v' q}{c q} \approx \frac{v'}{c},$$

wobei v' die Geschwindigkeit des Elektrons nach dem Stoss ist. Der dritte Term von (6.29) ist nochmals von der Größenordnung v/c kleiner, da q wesentlich kleiner als die Elektronenimpulse sein soll. Deswegen nähert man für den nichtrelativistischen Fall $N_a \approx \hbar c q = \hbar \omega_{\vec{q}}$.

(b) Zwischenzustand mit Photon - Matrixelemente

Die Rechnung geht analog zum Fall (a) und das Ergebnis für den zweiten Beitrag in $M_{if}^{(2)}$ ist

$$M_{if}^{(2)}(b) = \sum_{\vec{k}_z} \frac{\langle f|V_K|m_b\rangle\langle m_b|H_I'|i\rangle}{E_i - E_m^b + i\eta\hbar} \stackrel{\eta \rightarrow 0}{=} -\frac{e\hbar}{mc} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_{\vec{q}}}} \frac{\tilde{V}(\vec{q} + \vec{k}' - \vec{k}) \vec{u}_{\vec{q}} \cdot \vec{k}'}{\hbar^2 (\vec{k}^2 - (\vec{q} - \vec{k})^2)/2m - \hbar c q}.$$

Für den Nenner gilt wieder

$$\begin{aligned} N_b &= \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} - \left(\frac{\hbar^2 \vec{q}^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \vec{q} \cdot \vec{k}}{m} \right) - \hbar c q = \\ &= -\hbar c q \left(1 + \frac{\hbar \vec{q}^2}{2m c q} - \frac{\hbar \vec{q} \cdot \vec{k}}{m c q} \right) \approx -\hbar \omega_{\vec{q}}. \end{aligned}$$

Summe der Matrixelemente - Kernpotential

Die beiden Zwischenzustände (mit und ohne Photon) zusammen ergeben nun

$$M_{if}^{(2)} = M_{if}^{(2)}(a) + M_{if}^{(2)}(b) = -\frac{e\hbar}{mc} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_{\vec{q}}}} \frac{(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{u}_{\vec{q}}}{\hbar\omega_{\vec{q}}} \tilde{V}_K(\vec{q} + \vec{k}' - \vec{k}). \quad (6.30)$$

Bisher haben wir über das Kernpotential keine genauere Aussage gemacht. Ab jetzt soll jedoch

$$V_K(\vec{r}) = -\frac{Ze^2}{r}$$

sein. Für die Fourier-Transformierte $\tilde{V}_K\vec{k}$ gilt dann

$$\tilde{V}_K\vec{k} = -\frac{Ze^2}{V} \int_V \frac{e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{r} d^3r = -\frac{Ze^2}{V} \int_V \left(-\frac{1}{k^2}\right) \frac{\Delta e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{r} d^3r.$$

Zweimalige partielle Integration und die Ersetzung

$$\Delta \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\vec{r})$$

ergibt

$$\tilde{V}_K\vec{k} = \frac{Ze^2}{Vk^2} \int_V \left(\Delta \frac{1}{r}\right) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} d^3r = -\frac{4\pi Ze^2}{Vk^2}. \quad (6.31)$$

Damit wird

$$M_{if}^{(2)} = \frac{4\pi Ze^3 \hbar}{mc} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_{\vec{q}}}} \frac{(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{u}_{\vec{q}}}{V \hbar\omega_{\vec{q}} (\vec{q} + \vec{k}' - \vec{k})^2}.$$

Niederenergiestreuung

Wir nehmen nun an, daß die Energie des Photons $\omega := \omega_{\vec{q}}$ viel kleiner ist als die der Elektronen, und setzen

$$(\vec{q} + \vec{k}' - \vec{k})^2 \approx (\vec{k}' - \vec{k})^2 := (\Delta\vec{k})^2 = \frac{m^2}{\hbar^2} (\Delta\vec{v})^2.$$

Daraus folgt gleichzeitig $|\vec{v}| = |\vec{v}'|$, denn wenn das Photon vernachlässigt wird, ist die Streuung des Elektrons elastisch. Für die Übergangsrate ergibt sich so

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_f - E_i) \left| M_{if}^{(2)} \right|^2 = \dots = \frac{64\pi^4 Z^2 e^6 \hbar^2 (\vec{u}\Delta\vec{v})^2}{V^3 \omega^3 m^4 (\Delta\vec{v})^4} \delta(E_i - E_f).$$

Ist ϑ der Winkel zwischen der Geschwindigkeiten \vec{v} und \vec{v}' vor und nach dem Stoss, dann gilt noch

$$|\Delta\vec{v}| = 2v \sin \frac{\vartheta}{2}.$$

Differentielle Streuquerschnitt für die Bremsstrahlung

Der differentielle Streuquerschnitt (6.25) kann jetzt berechnet werden:

$$\begin{aligned} \frac{d^3\sigma}{d\Omega_{\vec{k}'}d\Omega_{\vec{q}}dq} &= \frac{V}{v} \left(\frac{V}{(2\pi)^3} \right)^2 q^2 \int \Gamma_{i \rightarrow f} k'^2 dk' = \\ &= \frac{64\pi^4 Z^2 \hbar^2 e^6 q^2}{(2\pi)^6 \omega^3 m^4} \int \frac{(\vec{u} \cdot \Delta\vec{v})^2 k'^2}{16v^5 \sin^4 \frac{\vartheta}{2}} \delta(E_i - E_f) dk' \end{aligned}$$

Hier bahnt sich schon ein Rutherford-Streuquerschnitt an. Im Integranden hängt nur k'^2 und die δ -Funktion von k' ab, außerdem ist

$$\delta(E_i - E_f) = \delta\left(\frac{\hbar^2 \vec{k}'^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}\right) = \frac{2m}{\hbar^2} \delta(\vec{k}'^2 - \vec{k}^2).$$

Das Integral lässt sich jetzt leicht ausführen:

$$\int k'^2 \delta(\vec{k}'^2 - \vec{k}^2) dk' = \int \frac{\zeta}{2\sqrt{\zeta}} \delta(\zeta - \vec{k}^2) d\zeta = \frac{k}{2} = \frac{mv}{2\hbar}.$$

Zusammen mit $q = \omega/c$ wird dann

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_{\vec{k}'}d\Omega_{\vec{q}}d\omega} = \frac{Z^2 e^4}{m^2 v^4 \sin^4 \frac{\vartheta}{2}} \frac{(\vec{u} \cdot \Delta\vec{v})^2 e^2}{16\pi^2 c^2 \hbar \omega}. \quad (6.32)$$

Im ersten Faktor erkennt man den Rutherford-Streuquerschnitt wieder, und der zweite Faktor gibt die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür an, zusätzlich noch die Emission eines Photons der Energie $\hbar\omega_{\vec{q}}$ im Raumwinkel $d\Omega_{\vec{q}}$ zu beobachten.