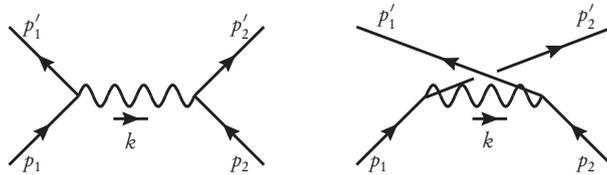

Quantentheorie II



Hendrik van Hees
Institut für Theoretische Physik
Johann-Wolfgang-Goethe-Universität Frankfurt
hees@fias.uni-frankfurt.de

15. November 2015

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	3
1 Erinnerung an die Quantenmechanik I	9
1.1 Die Grundpostulate der Quantentheorie	9
1.2 Der Hilbertraum	10
1.3 Lineare Operatoren im Hilbertraum	15
1.4 Verträglichkeit von Observablen	20
1.5 Die Heisenbergsche Unschärferelation	23
1.6 Unitäre Abbildungen	24
1.7 Unitäre Symmetrietransformationen	25
1.8 Die Dynamik im Schrödingerbild	29
1.9 Bildtransformationen	33
1.10 Das Heisenbergbild	35
1.11 Der Propagator als Green-Funktion der Schrödingergleichung	38
1.12 Die Green-Funktion für ein freies Schrödingereteilchen	41
1.13 Die Zeitentwicklung in einem beliebigen Bild (Dirac-Bild)	43
1.14 Gemischte Zustände	49
1.15 Die Bewegungsgleichung für den Statistischen Operator	51
1.16 Zusammengesetzte Systeme	52
1.17 Reduzierte Statistische Operatoren	54
2 Galilei-Symmetrie	57
2.1 Die Galileigruppe in der Newtonschen Mechanik	57
2.2 Hamiltonsche kanonische Mechanik	62
2.3 Kanonische Transformationen	64
2.4 Das Noether-Theorem (klassisch)	66
2.5 Quantentheoretische Formulierung von Symmetrieprinzipien	70
2.6 Die Realisierungen der Galilei-Gruppe in der Quantentheorie	73
2.7 Nichtrelativistische Elementarteilchen	76
2.8 Die unitären irreduziblen Darstellungen der Drehgruppe	81
2.9 Das Noether-Theorem (quantenmechanisch)	84
2.10 Einteilchenzustände für Teilchen mit Spin s	85

INHALTSVERZEICHNIS

2.11	Die Pauli-Gleichung	88
2.12	Der Stern-Gerlach-Versuch	97
3	Erinnerung an die Statistische Thermodynamik	103
3.1	Die Entropie	103
3.2	Das großkanonische Ensemble	104
3.3	Phänomenologische Thermodynamik	106
3.4	Legendre-Transformationen thermodynamischer Potentiale	107
4	Vielteilchensysteme aus freien Teilchen	109
4.1	Ein System von zwei ununterscheidbaren Teilchen	109
4.2	Systeme von N ununterscheidbaren Teilchen und Fockraum	110
4.3	Fockraumformulierung für Observablen	113
4.3.1	Die Teilchendichte	113
4.3.2	Einteilchenoperatoren	114
4.3.3	Zweiteilchenoperatoren	117
4.3.4	Formulierung als Quantenfeldtheorie	118
4.3.5	Kanonische Feldquantisierung	119
4.3.6	Das Noether-Theorem im Feldformalismus	123
4.4	Fockräume freier Bosonen und Fermionen	130
4.5	Gleichgewichtsthermodynamik idealer Gase	132
4.5.1	Der klassische Grenzfall	136
4.5.2	Das entartete Fermi-Gas	138
4.5.3	Das entartete Bose-Gas	140
5	Vielteilchensysteme wechselwirkender Teilchen	143
5.1	Zweiteilchen-Streuung	143
5.1.1	Quantenfeldtheorie im Wechselwirkungsbild	144
5.1.2	Der Wirkungsquerschnitt	146
5.1.3	Das optische Theorem	154
5.1.4	Die Born-Reihe	155
5.1.5	Das Wicksche Theorem und Feynman-Diagramme	156
5.1.6	Anwendung auf das Yukawa- und Coulombpotential	163
6	Einführung in die relativistische Quantentheorie	167
6.1	Relativistische Raumzeitstruktur und Lorentzgruppe	167
6.2	Das klassische Teilchenbild	172
6.2.1	Die relativistische Kinematik freier Punktteilchen	172
6.2.2	Laborsystem	175
6.2.3	Schwerpunktsystem	176
6.2.4	Relativistisches Punktteilchen im äußeren elektromagnetischen Feld	177
6.3	Das klassische elektromagnetische Feld	180

INHALTSVERZEICHNIS

6.3.1	Die Maxwellgleichungen im Vakuum	180
6.3.2	Die relativistisch kovariante Form der Maxwellgleichungen	183
6.3.3	Lösung der quellenfreien Maxwellgleichungen	185
6.3.4	Lösung der Maxwellgleichungen bei vorgegebenen Quellen	187
6.3.5	Kanonische Formulierung der Elektrodynamik	190
6.3.6	Anwendung des Noether-Theorems auf die Elektrodynamik	191
6.4	Quantisierung des elektromagnetischen Feldes	194
6.5	Das Verhalten der Felder unter Poincaré-Transformationen	200
6.6	Das freie Dirac-Feld	203
6.7	Quantisierung des freien Dirac-Feldes	209
6.8	Poincaré-Symmetrie der quantisierten Dirac-Theorie	213
6.9	Die diskreten Symmetrietransformationen P , C und T	215
6.9.1	Raumspiegelungen	215
6.9.2	Ladungskonjugation	216
6.9.3	Zeitumkehr	217
6.9.4	Sesquilinearformen der Diracfelder	218
7	Einführung in die Quantenelektrodynamik	221
7.1	Klassische Elektrodynamik als Eichtheorie	221
7.2	Spinor-QED in Coulombbeziehung	225
7.3	Der invariante Streuquerschnitt	232
7.4	Beispiele für QED-Wirkungsquerschnitte	235
7.4.1	Kinematik für Zweiteilchenstreuprozesse	235
7.4.2	$e^+ + e^- \rightarrow \mu^+ + \mu^-$	237
7.4.3	Møller-Streuung	240
7.4.4	Bhabha-Streuung	241
7.4.5	Compton-Streuung	243
A	Gaußintegrale	247
A.1	Das eindimensionale Gaußintegral	247
A.2	Mehrdimensionale Gaußintegrale	248
B	Einige Integrale mit Bose- und Fermiverteilungen	251
B.1	Integrale zum idealen Gas	251
C	Formeln für die QED	255
C.1	Dirac-Spinoren	255
C.2	Polarisationsvektoren für Photonen	256
	Literaturverzeichnis	259

INHALTSVERZEICHNIS

Inhaltsübersicht und Literaturempfehlungen

Die Vorlesung Höhere Quantenmechanik (Quantenmechanik 2) beschäftigt sich mit der quantentheoretischen Beschreibung von nichtrelativistischen Vielteilchensystemen und führt in die Quantentheorie relativistischer Teilchen ein.

Der eigentliche Vorlesungsstoff beginnt mit Kapitel 2 dieses Manuskripts. Im ersten Kapitel werden die Inhalte der Vorlesung „Quantenmechanik I“ kurz zusammengefaßt, um die in dieser Vorlesung verwendete Notation zu definieren.

In Kapitel 2 beschäftigen wir uns zunächst mit der Beschreibung der Symmetrien von Raum und Zeit in der nichtrelativistischen Physik befassen, also der Realisierung der **Galilei-Invarianz** in der Quantentheorie. Die Durchführung dieser Betrachtungen führt zu einer Charakterisierung des nichtrelativistischen Elementarteilchens durch seine Masse und seinen Spin sowie zur Algebra der Observablenoperatoren, aus der der quantenmechanische Hilbertraum für ein freies Teilchen konstruiert werden kann.

Nach dieser Vorbereitung werden wir uns mit dem quantenmechanischen Formalismus der Vielteilchensysteme aus ununterscheidbaren Teilchen auseinandersetzen, der schließlich auf die **Feldquantisierung** für **Bosonen oder Fermionen** führt.

Um uns der relativistischen Beschreibung von Quantensystemen zu nähern, beschäftigen wir uns zunächst mit der **Poincaré-Symmetrie** und der **Lorentz-Invarianz** und deren quantentheoretischer Realisierung. Wie wir dann sehen werden, scheitert der Versuch einer **Einteilchen-Quantentheorie** im relativistischen Fall, d.h. es kann nicht wie in der nichtrelativistischen Physik eine konsistente Beschreibung eines einzelnen (mit einem äußeren Potential wechselwirkenden) Teilchens durch eine relativistische Wellenfunktion gefunden werden. Es zeigt sich aber, daß im Rahmen der Feldquantisierung eine relativistische Quantentheorie, die auf einfachen Grundannahmen (**Lorentz-Invarianz**, **Lokalität** und **Mikrokausalität**) beruht, realisiert werden kann. Physikalisch ist das dadurch verständlich, daß bei Kollisionen von Teilchen mit relativistischen Energien neue Teilchen erzeugt oder auch Teilchen vernichtet werden können, so daß eine **Vielteilchenbeschreibung** im relativistischen Bereich in gewisser Weise natürlich ist. Wir werden die Vorlesung mit einigen einfachen Anwendungen der relativistischen Quantenfeldtheorie in der Quantenelektrodynamik beschließen.

Als grundlegendes Lehrbuch empfehle ich [Sch08], das auch als „E-Book“ innerhalb des Netzes der JLU heruntergeladen werden kann.

Für die Vorbereitung dieses Manuskripts wurden noch folgende Lehrbücher verwendet

- für Grundlagen der Quantentheorie: [Fic79, ST93, GY03, Bal98]
- für die relativistische Quantenfeldtheorie: [Ryd96, Wei95]

Warnung: Dieses Skript wird im Laufe dieser Vorlesung (WS 2010/2011) neu erstellt. Trotz aller Bemühungen wird es noch Tippfehler geben. Falls Ihnen welche auffallen, bitte melden Sie diese sofort!

INHALTSVERZEICHNIS

Danksagung: Ich danke Stefan Strauss und Alexander Goritschnig für das Korrekturlesen des Manuskripts, was sehr geholfen hat, dem Tippfehlerteufel ein wenig Einhalt zu gebieten.

Kapitel 1

Erinnerung an die Quantenmechanik I

In diesem Kapitel rekapitulieren wir kurz die wesentlichen mathematischen Grundlagen der Quantenmechanik wie sie aus der Vorlesung „Quantenmechanik I“ bekannt sein sollten. Dabei liegt der Schwerpunkt auf den Begriffen des quantenmechanischen Zustandes und der Observablen, wobei wir uns der darstellungsfreien Beschreibung mittels **Operatoren** und **Vektoren im Hilbertraum** in der **Diracschen Bra-Ket-Schreibweise** bedienen. Wichtig ist dabei auch die Beschreibung der **Dynamik quantenmechanischer Systeme**, wobei die Verteilung der Zeitabhängigkeit auf Zustandsvektoren und Operatoren, die Observable repräsentieren, weitgehend willkürlich ist. Wir besprechen die für das folgende wichtigsten **Bilder der Zeitentwicklung**, nämlich **Schrödinger-, Heisenberg- und Dirac-Bild**. Bzgl. der **physikalischen Interpretation der Quantenmechanik**, die auch heute noch als nicht endgültig geklärt gelten darf, folge ich der **Minimalen Statistischen Interpretation** [Bal70, Bal98], da mir diese als die bislang in sich konsistenteste und der tatsächlichen Anwendung der Quantentheorie auf reale Phänomene durch die Mehrheit der Physiker am nächsten kommende Auffassung erscheint. Wir werden auf solche Grundlagenfragen in dieser Vorlesung aus Zeitgründen allerdings nur wenig eingehen können.

1.1 Die Grundpostulate der Quantentheorie

In diesem Abschnitt stellen wir die grundlegendsten Begriffe der quantentheoretischen Beschreibung zusammen, wobei wir uns als Beispiel eines einzelnen Elektrons in einem äußeren Potential bedienen wollen (z.B. dem einfachsten Modell des Wasserstoffatoms als einem Elektron im Coulombfeld eines als ruhend angenommenen Protons).

Wir stellen zunächst die Struktur der Quantentheorie in einigen **Grundpostulaten** zusammen und erläutern sie dann genauer:

1. Der Zustand eines quantenmechanischen Systems wird durch einen normierten Vektor $|\psi\rangle$ eines Hilbertraums \mathcal{H} repräsentiert.
2. Jede physikalische Observable O wird durch einen (auf einem dichten Teilraum von \mathcal{H} definierten) selbstadjungierten Operator \mathbf{O} repräsentiert.
Die möglichen Meßwerte der Observablen sind durch die (verallgemeinerten) Eigenwerte des ihr zugeordneten Operators gegeben.
3. Die (verallgemeinerten) Eigenvektoren $|o, \alpha\rangle$ des Operators \mathbf{O} zum (verallgemeinerten) Eigen-

wert o können normiert und zueinander orthogonal bzw. auf die δ -Distribution normiert gewählt werden, d.h. so, daß

$$\langle o', \alpha' | o, \alpha \rangle = \delta o' - o \delta(\alpha' - \alpha). \quad (1.1.1)$$

Dabei bezeichnet α einen oder mehrere Parameter, die im Falle einer Entartung des Eigenraums die Eigenvektoren durchnummerieren. Diese Parameter können sowohl kontinuierliche als auch diskrete Werte durchlaufen, und die δ -Symbole in Gl. (1.1.1) bezeichnen entsprechend δ -Distributionen oder Kronecker- δ 's. Ist das System bei einer Messung der Observablen O im normierten Zustand $|\psi\rangle$ präpariert, so ist die Wahrscheinlichkeit, bei der Messung der Observablen O den Eigenwert o des ihr zugeordneten Operators \mathbf{O} zu finden, ist durch die **Bornsche Formel**

$$w_\psi(o) = \sum \int d\alpha |\langle o, \alpha | \psi \rangle|^2 \quad (1.1.2)$$

gegeben, wobei das kombinierte Summations-Integrations-Symbol den kontinuierlichen und die Summe über den diskreten Teil des Parameters α bedeutet.

4. Die Dynamik des Systems wird eindeutig durch die Zuordnung eines selbstadjungierten nach unten beschränkten Operators \mathbf{H} , des **Hamiltonoperators** des Systems, bestimmt.

Ist \mathbf{O} der die Observable O repräsentierende selbstadjungierte Operator, so repräsentiert die kovariante Zeitableitung

$$\dot{\mathbf{O}} = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{O}, \mathbf{H}] + \partial_t^{\text{expl}} \mathbf{O} \quad (1.1.3)$$

die zeitliche Ableitung $\dot{\mathbf{O}}$ der Observablen O .

1.2 Der Hilbertraum

Erinnern wir uns zur Erläuterung dieser Grundpostulate zunächst an den Begriff des **Hilbertraums**. Dieser ist zunächst einmal ein **Vektorraum** über dem Körper der komplexen Zahlen, d.h. für irgendwelche Elemente $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle \in \mathcal{H}$ und Zahlen $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$ gibt es die Verknüpfung der **Addition von Vektoren** $|\psi\rangle + |\phi\rangle$ und der **Multiplikation eines Vektors mit einer komplexen Zahl** $\lambda_1 |\psi\rangle$, die folgende Eigenschaften besitzen:

$$|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle = |\psi_2\rangle + |\psi_1\rangle \quad (1.2.1)$$

$$(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) + |\psi_3\rangle = |\psi_1\rangle + (|\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle) \quad (1.2.2)$$

$$\exists 0 \in \mathcal{H} : |\psi_1\rangle + 0 = |\psi_1\rangle, \quad (1.2.3)$$

$$\lambda_1(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = \lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_1|\psi_2\rangle, \quad (1.2.4)$$

$$(\lambda_1 + \lambda_2)|\psi_1\rangle = \lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_1\rangle, \quad (1.2.5)$$

$$\underbrace{0}_{\in \mathbb{C}} |\psi_1\rangle = \underbrace{0}_{\in \mathcal{H}}, \quad 1|\psi\rangle = |\psi\rangle. \quad (1.2.6)$$

Daraus ergibt sich unter anderem auch, daß es zu jedem Vektor $|\psi\rangle$ einen Vektor $|\!-\!\psi\rangle := (-1)|\psi\rangle =: -|\psi\rangle$ gibt, so daß $|\psi\rangle + |\!-\!\psi\rangle = 0$. Wegen (1.2.6) und (1.2.5) ist nämlich

$$0 = (1-1)|\psi\rangle = 1|\psi\rangle + (-1)|\psi\rangle =: |\psi\rangle + |\!-\!\psi\rangle. \quad (1.2.7)$$

Weiter ist auf dem Hilbertraum noch ein **Skalarprodukt**, das zwei Vektoren $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$ auf eine komplexe Zahl $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$ abbildet, definiert. Es besitzt die folgenden Eigenschaften:

$$\langle \psi_1 | \lambda_1 \psi_2 + \lambda_2 \psi_3 \rangle = \lambda_1 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle + \lambda_2 \langle \psi_1 | \psi_3 \rangle, \quad (1.2.8)$$

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle^* \quad (1.2.9)$$

$$\langle \psi | \psi \rangle \geq 0, \quad (1.2.10)$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = 0 \Leftrightarrow |\psi\rangle = 0. \quad (1.2.11)$$

Eine wichtige Folgerung aus (1.2.8) und (1.2.9) ist

$$\langle \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 | \psi_3 \rangle = \lambda_1^* \langle \psi_1 | \psi_3 \rangle + \lambda_2^* \langle \psi_2 | \psi_3 \rangle, \quad (1.2.12)$$

d.h. das Skalarprodukt ist bzgl. des zweiten Arguments **linear** aber bzgl. des ersten Arguments **antilinear**, d.h. die Zahlenfaktoren in der Linearkombination sind beim Herausziehen aus dem ersten Argument komplex zu konjugieren. Der Beweis folgt einfach aus (1.2.9) und (1.2.8) sowie einfachen Eigenschaften der komplexen Konjugation für komplexe Zahlen:

$$\begin{aligned} \langle \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 | \psi_3 \rangle &= (\langle \psi_3 | \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle)^* = (\lambda_1 \langle \psi_3 | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \psi_3 | \psi_2 \rangle)^* \\ &= \lambda_1^* \langle \psi_3 | \psi_1 \rangle^* + \lambda_2^* \langle \psi_3 | \psi_2 \rangle^* = \lambda_1^* \langle \psi_1 | \psi_3 \rangle + \lambda_2^* \langle \psi_2 | \psi_3 \rangle. \end{aligned} \quad (1.2.13)$$

Auf dem Hilbertraum wird mit dem Skalarprodukt zugleich auch eine **Norm** definiert:

$$\|\psi\| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle} \geq 0. \quad (1.2.14)$$

Diese Definition erfüllt in der Tat die Eigenschaften einer Vektorraumnorm, d.h. es gilt

$$\|\lambda\psi\| = |\lambda| \|\psi\|. \quad (1.2.15)$$

Der Beweis ist eine sehr einfache *Übungsaufgabe*.

Etwas schwieriger ist der Beweis der **Dreiecksungleichung**

$$\|\psi_1 + \psi_2\| \leq \|\psi_1\| + \|\psi_2\|. \quad (1.2.16)$$

Dazu betrachten wir

$$\begin{aligned} \|\psi_1 + \psi_2\|^2 &= \langle \psi_1 + \psi_2 | \psi_1 + \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle + \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle + \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle + \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle \\ &= \|\psi_1\|^2 + \|\psi_2\|^2 + \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle + \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle. \end{aligned} \quad (1.2.17)$$

Nun ist (1.2.16) offenbar gleichbedeutend mit

$$\|\psi_1 + \psi_2\|^2 \stackrel{?}{\leq} \|\psi_1\|^2 + \|\psi_2\|^2 + 2\|\psi_1\| \|\psi_2\|. \quad (1.2.18)$$

Wir müssen also nachweisen, daß

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle + \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = 2\operatorname{Re}(\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle) \stackrel{?}{\leq} 2\|\psi_1\| \|\psi_2\|. \quad (1.2.19)$$

Dazu beweisen wir die auch für sich genommen wichtige **Cauchy-Schwarzsche Ungleichung**

$$|\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle| \leq \|\psi_1\| \|\psi_2\|. \quad (1.2.20)$$

Wir können dabei annehmen, daß $|\psi_1\rangle \neq 0$ und $|\psi_2\rangle \neq 0$, denn andernfalls wären beide Seiten der Ungleichung $= 0$, und somit die Behauptung erfüllt.

Zum Beweis von (1.2.20) setzen wir

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle - \frac{\langle\psi_2|\psi_1\rangle}{\|\psi_2\|^2} |\psi_2\rangle. \quad (1.2.21)$$

Dann folgt aus der positiven Definitheit des Skalarprodukts (1.2.10)

$$0 \leq \langle\psi|\psi\rangle = \|\psi_1\|^2 + \frac{|\langle\psi_2|\psi_1\rangle|^2}{\|\psi_2\|^2} - 2 \frac{|\langle\psi_2|\psi_1\rangle|^2}{\|\psi_2\|^2} = \|\psi_1\|^2 - \frac{|\langle\psi_2|\psi_1\rangle|^2}{\|\psi_2\|^2}, \quad (1.2.22)$$

und daraus folgt durch einige einfache Umformungen (1.2.20). Daraus ergibt sich aber sofort auch (1.2.19), denn es gilt

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle + \langle\psi_2|\psi_1\rangle \leq |\langle\psi_1|\psi_2\rangle + \langle\psi_2|\psi_1\rangle| \leq 2|\langle\psi_1|\psi_2\rangle| \leq 2\|\psi_1\|\|\psi_2\|. \quad (1.2.23)$$

Damit ist die Dreiecksungleichung (1.2.18) bewiesen.

Physikalisch impliziert die Hilbertraumstruktur der Zustände das **Superpositionsprinzip**, dem gemäß für zwei oder mehr Zustandsvektoren auch jede Linearkombination wieder einen möglichen Zustand repräsentiert.

Wichtige **Beispiele** für konkrete Hilberträume, die in der Quantentheorie eine Rolle spielen, sind der **Hilbertsche Funktionenraum der quadratintegrierbaren Funktionen** $L^2(\mathbb{R}^3)$ und der **Hilbertsche Folgenraum der quadratsummierbaren Folgen** ℓ^2 .

Der erste Fall $L^2(\mathbb{R}^3)$ entspricht der Formulierung der Quantentheorie als **Schrödingersche Wellenmechanik**. Dabei werden die quantenmechanischen Zustände durch Funktionen $\psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ repräsentiert, für die das Integral

$$\langle\psi|\psi\rangle = \|\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\psi(\vec{x})|^2 \quad (1.2.24)$$

existiert. Für zwei solcher Funktionen existiert dann auch das Skalarprodukt

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle := \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi_1^*(\vec{x})\psi_2(\vec{x}). \quad (1.2.25)$$

Es ist eine einfache *Übungsaufgabe* nachzuweisen, daß die Axiome (1.2.1-1.2.6) und (1.2.8-1.2.11) gelten. Hinsichtlich (1.2.11) müssen wir allerdings vereinbaren, daß wir Funktionen, für die (1.2.24) verschwindet mit der Funktion $\psi(\vec{x}) \equiv 0$ identifizieren. Das bedeutet anders ausgedrückt, daß zwei Funktionen bereits als gleich angesehen werden, wenn sie sich nur in abzählbar vielen Stellen des \mathbb{R}^3 voneinander unterscheiden.

Entsprechend besteht der Folgenraum ℓ^2 aus allen Folgen $\psi = (\psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$, für die

$$\langle\psi|\psi\rangle = \|\psi\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} |\psi_n|^2 \quad (1.2.26)$$

existiert, und das Skalarprodukt wird durch

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_{1n}^* \psi_{2n} \quad (1.2.27)$$

definiert. Die Darstellung der quantenmechanischen Zustandsvektoren als solche Folgen führt zur Formulierung der Quantentheorie als **Heisenbergsche Matrizenmechanik**.

Der Zusammenhang zwischen diesen verschiedenen Darstellungen der Quantentheorie ist durch den **Diracschen darstellungsfreien Formalismus** im abstrakten Hilbertraum \mathcal{H} , wie wir ihn hier zusammenfassen, gegeben. Wir kommen darauf weiter unten noch zurück.

Betrachten wir also wieder den abstrakten Hilbertraum \mathcal{H} . Die wichtigste Begriffsbildung, die wir aus dem gegebenen Axiomensystem aufbauen können, ist der der **Konvergenz** und der damit zusammenhängenden **vollständigen Orthonormalsysteme**. Eine Folge von Vektoren $(|\psi_n\rangle)_{n \in \mathbb{N}}$ heißt konvergent gegen einen Vektor $|\psi\rangle$ im Sinne der Hilbertraum-Norm (1.2.14), wenn

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\psi_n - \psi\| = 0 \quad (1.2.28)$$

gilt.

Im folgenden wird weiterhin postuliert, daß der **Hilbertraum vollständig** ist, d.h. jede **Cauchy-Folge** zu einem Vektor im Hilbertraum konvergiert. Dabei heißt $(|\psi_n\rangle)_{n \in \mathbb{N}}$ definitionsgemäß Cauchy-Folge genau dann, wenn zu jedem $\epsilon > 0$ eine natürliche Zahl $N \in \mathbb{N}$ existiert, so daß für alle $m, n \in \mathbb{N}$ mit $m, n > N$

$$\|\psi_m - \psi_n\| < \epsilon \quad (1.2.29)$$

gilt. Wir bemerken ohne Beweis, daß sowohl der Hilbertsche Funktionenraum L^2 als auch der Hilbertsche Folgenraum ℓ^2 vollständig ist (zu solchen eher mathematischen Fragestellungen sei auf [FK07, FK08, FK06] verwiesen).

Eine Folge von Vektoren $(|u_n\rangle)_{n \in \mathbb{N}}$ heißt **Orthonormalsystem**, wenn für alle $m, n \in \mathbb{N}$

$$\langle u_m | u_n \rangle = \delta_{mn} := \begin{cases} 1 & \text{falls } m = n, \\ 0 & \text{falls } m \neq n \end{cases} \quad (1.2.30)$$

ist. Falls die Reihe

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n |u_n\rangle \quad (1.2.31)$$

konvergiert, gilt offenbar

$$\langle u_m | \psi \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n \langle u_m | u_n \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n \delta_{mn} = \psi_m. \quad (1.2.32)$$

Ist umgekehrt ein beliebiger Vektor $|\psi\rangle$ gegeben und definieren wir

$$\psi_n = \langle u_n | \psi \rangle, \quad (1.2.33)$$

so ist die Reihe (1.2.31) konvergent, denn für jede Partialsumme gilt

$$0 \leq \left\| \psi - \sum_{n=1}^N \psi_n |u_n\rangle \right\|^2 = \|\psi\|^2 + \left\| \sum_{n=1}^N \psi_n |u_n\rangle \right\|^2 - \left\langle \psi \left| \sum_{n=1}^N \psi_n |u_n\rangle \right. \right\rangle - \left\langle \sum_{n=1}^N \psi_n |u_n\rangle \left| \psi \right. \right\rangle \quad (1.2.34)$$

Nun ist aber

$$\left\| \sum_{n=1}^N \psi_n |u_n\rangle \right\|^2 = \sum_{n,m=1}^N \psi_m^* \psi_n \underbrace{\langle u_m | u_n \rangle}_{=\delta_{mn}} = \sum_{n=1}^N |\psi_n|^2 \quad (1.2.35)$$

und

$$\left\langle \psi \left| \sum_{n=1}^N \psi_n u_n \right. \right\rangle = \sum_{n=1}^N \psi_n \langle \psi | u_n \rangle = \sum_{n=1}^N |\psi_n|^2 = \left\langle \psi \left| \sum_{n=1}^N \psi_n u_n \right. \right\rangle^* = \left\langle \sum_{n=1}^N \psi_n u_n \left| \psi \right. \right\rangle. \quad (1.2.36)$$

Dies in (1.2.35) eingesetzt liefert die **Besselsche Ungleichung**

$$\left\| \sum_{n=1}^N \psi_n |u_n\rangle \right\|^2 = \sum_{n=1}^N |\psi_n|^2 \leq \|\psi\|^2. \quad (1.2.37)$$

Die Teilsummenfolge der aus den positiven Gliedern $|\psi_n|^2$ gebildeten Reihe ist also beschränkt und diese folglich konvergent. Nennen wir den entsprechenden Grenzwert

$$\sum_{n=1}^{\infty} |\psi_n|^2 = L^2. \quad (1.2.38)$$

Daraus folgt, daß die Teilsummenfolge

$$|S_k\rangle = \sum_{n=1}^k \psi_n |u_n\rangle \quad (1.2.39)$$

eine Cauchyfolge ist, denn zu $\epsilon > 0$ können wir ein $N > 0$ angeben, so daß für alle $n > N$

$$\left| L^2 - \sum_{k=1}^n |\psi_k|^2 \right| < \frac{\epsilon^2}{2} \quad (1.2.40)$$

ist. Dann gilt aber für die Teilsummenfolge (1.2.39) für alle $m > n > N$:

$$\|S_m - S_n\|^2 = \left\| \sum_{k=n+1}^m \psi_k |u_k\rangle \right\|^2 = \sum_{k=n+1}^m |\psi_k|^2 \leq \left| L^2 - \sum_{k=1}^n |\psi_k|^2 \right| + \left| L^2 - \sum_{k=1}^m |\psi_k|^2 \right| \stackrel{(1.2.40)}{\leq} \epsilon^2, \quad (1.2.41)$$

d.h. für alle $m > n > N$ gilt

$$\|S_m - S_n\| < \epsilon. \quad (1.2.42)$$

Da wir oben $\epsilon > 0$ beliebig wählen konnten, ist also (1.2.39) eine Cauchyfolge und folglich (wegen der Vollständigkeit des Hilbertraums) die Reihe (1.2.31) mit den Koeffizienten (1.2.33) gegen einen Vektor $|\psi'\rangle$ konvergent:

$$|\psi'\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n |u_n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |u_n\rangle \langle u_n | \psi \rangle. \quad (1.2.43)$$

Ein Orthonormalsystem heißt **vollständig**, wenn für jeden Vektor $|\psi\rangle$ die Reihe gegen diesen Vektor konvergiert, wenn also in (1.2.43) $|\psi'\rangle = |\psi\rangle$ ist. Dies können wir symbolisch auch dadurch ausdrücken, daß wir

$$\sum_{n=1}^{\infty} |u_n\rangle \langle u_n| = \mathbb{1} \quad (1.2.44)$$

schreiben. Dabei ist $\mathbb{1}$ der **Einheitsoperator im Hilbertraum \mathcal{H}** , d.h. für jeden Vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ gilt

$$\mathbb{1} |\psi\rangle = |\psi\rangle. \quad (1.2.45)$$

Weiter definieren wir das **dyadische Produkt** zweier Vektoren $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ als den Operator, der einen beliebigen Vektor $|\psi_3\rangle$ in den Vektor

$$(|\psi_1\rangle\langle\psi_2|)|\psi_3\rangle = |\psi_1\rangle\langle\psi_2|\psi_3\rangle \quad (1.2.46)$$

abbildet. Eine Summe oder unendliche Reihe dyadischer Produkte wirkt entsprechend auf Vektoren gemäß

$$\left(\sum_n |\psi_1\rangle\langle\phi_n|\right)|\psi_2\rangle = \sum_n |\psi_1\rangle\langle\phi_n|\psi_2\rangle. \quad (1.2.47)$$

Damit ist die Gültigkeit von (1.2.44) in der Tat gleichbedeutend mit

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |u_n\rangle\langle u_n|\psi\rangle \quad (1.2.48)$$

also mit der **Vollständigkeit** des Orthonormalsystems $(|u_n\rangle)_{n \in \mathbb{N}}$.

Es ist sehr leicht, ein **Beispiel** für ein vollständiges Orthonormalsystem (VONS) im Folgenraum ℓ^2 anzugeben. Offenbar ist ein solches nämlich durch

$$u_n = (0, 0, \dots, \underbrace{1}_{n\text{-ter Eintrag}}, 0, \dots) \quad (1.2.49)$$

gegeben. Es gilt jedenfalls

$$\langle u_n | u_m \rangle = \delta_{nm}, \quad (1.2.50)$$

und ist dann

$$\psi = (\psi_1, \psi_2, \dots) \in \ell^2, \quad (1.2.51)$$

so ist offenbar in der Tat

$$\psi_n = \langle u_n | \psi \rangle \quad (1.2.52)$$

und weiter

$$\sum_{n=1}^{\infty} \psi_n u_n = (\psi_1, \psi_2, \dots) = \psi. \quad (1.2.53)$$

Also ist (1.2.49) tatsächlich ein VONS.

Auf dem Funktionenraum L^2 ist ein VONS z.B. durch die **Energieeigenfunktionen des Harmonischen Oszillators** gegeben. Wir können auf den Beweis hier nicht eingehen und verweisen diesbezüglich auf die oben zitierte mathematische Literatur.

Wir bemerken noch, daß ein Hilbertraum, in dem es wenigstens ein **VONS aus abzählbar vielen Vektoren** gibt, genauer als **separabler Hilbertraum** bezeichnet wird. Da die Hilberträume ℓ^2 und L^2 separabel sind und die Quantentheorie eines Teilchens in diesen Hilberträumen formulierbar ist, ist also der quantenmechanische Hilbertraum in diesem Falle separabel. Für die praktische Anwendung der Quantentheorie spielt dies allerdings eher eine untergeordnete Rolle.

1.3 Lineare Operatoren im Hilbertraum

Mit diesen Betrachtungen haben wir das 1. Postulat für unsere Zwecke hinreichend erläutert. Wenden wir uns also dem 2. Postulat zu. Dazu rekapitulieren wir zunächst einmal den Begriff des **linearen Operators**. Es sei $\mathcal{D} \subseteq \mathcal{H}$ ein Untervektorraum von \mathcal{H} . Ein Operator $\mathbf{O} : \mathcal{D} \rightarrow \mathcal{H}$ heißt linear, wenn

für alle Vektoren $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{D}$ und alle Zahlen $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$ (für die voraussetzungsgemäß auch der Vektor $\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle \in \mathcal{D}$ ist)

$$\mathbf{O}(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1\mathbf{O}|\psi_1\rangle + \lambda_2\mathbf{O}|\psi_2\rangle \quad (1.3.1)$$

gilt.

Existiert zu dem linearen Operator \mathbf{O} ein linearer Operator $\mathbf{O}^\dagger : \mathcal{D} \rightarrow \mathcal{H}$, so daß für alle $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{D}$

$$\langle \psi_1 | \mathbf{O} \psi_2 \rangle = \langle \mathbf{O}^\dagger \psi_1 | \psi_2 \rangle \quad (1.3.2)$$

gilt, so heißt \mathbf{O}^\dagger der zu \mathbf{O} **adjungierte Operator**. Gilt für einen Operator $\mathbf{O}^\dagger = \mathbf{O}$, so heißt er **hermitesch**. Ist für jeden Vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{D}$ auch $\mathbf{O}|\psi\rangle \in \mathcal{D}$ und ist \mathcal{D} **dicht im Hilbertraum** \mathcal{H} , so heißt \mathbf{O} **selbstadjungiert**. Ein Untervektorraum \mathcal{D} heißt dabei dicht im Hilbertraum, wenn es zu jedem $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ eine Folge $(|\psi_n\rangle)_{n \in \mathbb{N}}$ mit $|\psi_n\rangle \in \mathcal{D}$ gibt, so daß

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |\psi_n\rangle = |\psi\rangle. \quad (1.3.3)$$

Postulat 2 besagt nun, daß die Observablen im quantenmechanischen Formalismus durch selbstadjungierte Operatoren im Hilbertraum repräsentiert werden.

Beispiele für selbstadjungierte Operatoren im Funktionenraum sind die Operatoren für die Orts- und Impulskomponenten \mathbf{x}_k und \mathbf{p}_k ($k \in \{1, 2, 3\}$), die durch

$$\mathbf{x}_k \psi(\vec{x}) = x_k \psi(\vec{x}), \quad \mathbf{p}_k \psi(\vec{x}) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} \psi(\vec{x}) \quad (1.3.4)$$

gegeben sind. Es ist offensichtlich, daß diese Operatoren nicht auf dem ganzen Hilbertraum definiert sein können. Betrachten wir zum Beispiel die Funktion

$$\psi(\vec{x}) = \frac{\sin(\vec{k} \cdot \vec{x})}{\vec{k} \cdot \vec{x}} \in L^2, \quad (1.3.5)$$

so ist $\mathbf{x}_k \psi(\vec{x}) \notin L^2$. Entsprechendes gilt für den Impulsoperator. Ohne dies hier formal beweisen zu wollen, können wir als dichten Teilraum \mathcal{D} für den Definitionsbereich für die Orts- und Impulsoperatoren den sog. **Schwartzschen Raum der schnell fallenden Funktionen** wählen. Dies ist der Raum der beliebig oft stetig partiell differenzierbaren Funktionen, deren Beträge im Unendlichen schneller abfallen als jedes Polynom $P(\vec{x})$, d.h. für jedes $\psi \in \mathcal{D}$ strebt für jedes Polynom $P(\vec{x}) \psi(\vec{x}) \rightarrow 0$, wenn \vec{x} in irgendeiner Richtung $\rightarrow \infty$ gesetzt wird. Es ist eine einfache *Übungsaufgabe*, zu zeigen, daß die so definierten Operatoren **selbstadjungiert** sind.

Ist nun \mathbf{O} ein linearer Operator, so heißt $|u_o\rangle$ **Eigenvektor** von \mathbf{O} zum Eigenwert o , wenn

$$\mathbf{O} |u_o\rangle = o |u_o\rangle \quad (1.3.6)$$

ist.

In der Quantentheorie müssen wir aber diesen Begriff des Eigenvektors **verallgemeinern**. Wir gehen hier auf die mathematisch strenge Begründung dieser Verallgemeinerung nicht ein, sondern verweisen diesbezüglich auf die mathematische Spezialliteratur (z.B. [FK08]) oder für eine modernere Formulierung mittels sogenannten „rigged Hilbert spaces“ [Bal98, GP90]. Für diese Vorlesung reicht die übliche weniger strikte Handhabung, wie sie in der Physik üblich ist, vollends aus.

Machen wir uns daher die Problematik an einem typischen Beispiel klar und betrachten den Impulsoperator (1.3.4) im L^2 . Der Einfachheit halber betrachten wir ein Teilchen, das sich nur eindimensional entlang der x -Achse bewegt. Der Hilbertraum ist dann einfach $L^2(\mathbb{R})$, der Raum der quadratintegrablen Funktionen $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$. Wir suchen also Eigenwerte und Eigenfunktionen für den Differentialoperator $\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$, d.h. wir suchen Lösungen der Differentialgleichung

$$\mathbf{p}u_p(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} u_p(x) = p u_p(x). \quad (1.3.7)$$

Offensichtlich gibt es zunächst für $p \in \mathbb{C}$ eine Lösung, nämlich

$$u_p(x) = N_p \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right). \quad (1.3.8)$$

Dabei ist $N_p = \text{const.}$ Offensichtlich ist für kein p die Funktion $u_p \in \mathcal{D}$. Sie liegt noch nicht einmal in L^2 ! Für $p \in \mathbb{R}$ ist allerdings die Funktion wenigstens beschränkt, während sie für $\text{Im } p \neq 0$ für $x \rightarrow \infty$ unbeschränkt ist. Wie wir gleich noch sehen werden, ist es für die Quantenmechanik allerdings nicht so wichtig, daß wir es mit echten Eigenvektoren zu tun haben. Vielmehr ist die Entwicklung beliebiger Zustandsvektoren nach Eigenvektoren, die im Falle selbstadjungierter Operatoren orthonormiert gewählt werden können, wichtig. Existieren wie hier keine echten Eigenvektoren, so existieren doch welche im Sinne verallgemeinerter Funktionen oder **Distributionen**. In der Tat gilt im gegebenen Fall der **verallgemeinerten Impulseigenfunktionen** für $p, p' \in \mathbb{R}$

$$\begin{aligned} \langle u_{p'} | u_p \rangle &= N_{p'}^* N_p \int_{\mathbb{R}} dx \exp\left[\frac{i(p-p')x}{\hbar}\right] = |N_p|^2 2\pi \delta\left(\frac{p-p'}{\hbar}\right) \\ &= 2\pi \hbar |N_p|^2 \delta(p-p'). \end{aligned} \quad (1.3.9)$$

Hierbei ist δ die **Diracsche δ -Distribution**¹. Üblicherweise wählt man in der nichtrelativistischen Quantentheorie die Normierungskonstante in (1.3.8) so, daß

$$\langle u_{p'} | u_p \rangle = \delta(p-p') \Rightarrow |N_p| = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}} \quad (1.3.10)$$

gilt. Wie wir weiter unten noch genauer ausführen werden, ist die nun immer noch unbestimmte **Phase** der Wellenfunktion irrelevant. Wir können also $N_p = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$ wählen. Damit sind unsere verallgemeinerten Impulseigenfunktionen durch die **ebenen Wellen**

$$u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) \quad (1.3.11)$$

gegeben.

Untersuchen wir nun, in welchem Sinne dieses verallgemeinerte Orthonormalsystem **vollständig** ist. Zunächst müssen wir für eine Funktion $\psi \in L^2$ gemäß (1.2.48) das verallgemeinerte Skalarprodukt

$$\tilde{\psi}(p) = \langle u_p | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) \psi(x) \quad (1.3.12)$$

¹Näheres zur Fouriertransformation und zur δ -Distribution finden Sie in [CH10].

bilden. Weiter haben wir die Funktion

$$\psi'(x) = \int_{\mathbb{R}} dp \tilde{\psi}(p) u_p(x) = \int_{\mathbb{R}} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tilde{\psi}(p) \exp\left(+\frac{ipx}{\hbar}\right) \quad (1.3.13)$$

zu betrachten. Wegen der Fourierschen Umkehrformel gilt in der Tat

$$\psi'(x) = \psi(x), \quad (1.3.14)$$

so daß also unser verallgemeinertes orthonormales System u_p von Impulseigenfunktionen in der Tat vollständig ist. Man spricht auch vom Übergang von der **Ortsdarstellung** $\psi(x)$ des quantenmechanischen Zustandes zur **Impulsdarstellung** $\tilde{\psi}(p)$.

Genauso können wir natürlich auch nach den Eigenfunktionen des Ortsoperators fragen. Es sei also $u_x(x')$ Eigenvektor zum Ortsoperator, d.h. es soll gelten

$$\mathbf{x}u_x(x') = x'u_x(x') \stackrel{!}{=} xu_x(x') \Rightarrow (x-x')u_x(x') = 0. \quad (1.3.15)$$

Folglich muß also $x \in \mathbb{R}$ und

$$u_x(x') = \delta(x' - x) \quad (1.3.16)$$

sein, wobei wir wieder die Normierung in der üblichen Form für kontinuierliche Eigenwerte gewählt haben. Es ist klar, daß dies wieder ein vollständiger Satz verallgemeinerter Eigenfunktionen ist, denn es gilt für $\psi \in \mathcal{D}$

$$\psi(x') = \int_{\mathbb{R}} dx u_x^*(x') \psi(x) = \int_{\mathbb{R}} dx \delta(x-x') \psi(x'). \quad (1.3.17)$$

Wir können nun den Zusammenhang dieser wellenmechanischen Formulierung zum abstrakten Hilbertraumformalismus vollziehen. Es sei also $|\psi\rangle$ ein Zustandsket im Definitionsbereich \mathcal{D} der Operatoren \mathbf{x} und \mathbf{p} . Mit $|x\rangle$ bzw. $|p\rangle$ bezeichnen wir die verallgemeinerten Eigenvektoren dieser Operatoren. Dann ist

$$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle, \quad \tilde{\psi}(p) = \langle p | \psi \rangle, \quad (1.3.18)$$

$$u_x(x') = \langle x' | x \rangle = \delta(x' - x), \quad (1.3.19)$$

$$u_p(x) = \langle x | p \rangle = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right), \quad (1.3.20)$$

$$u_x(p) = \langle p | x \rangle = \langle x | p \rangle^* = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right). \quad (1.3.21)$$

Die Vollständigkeitsrelationen für die verallgemeinerten Eigenkets lauten dann

$$\int_{\mathbb{R}} dx |x\rangle \langle x| = \mathbb{1}, \quad \int_{\mathbb{R}} dp |p\rangle \langle p| = \mathbb{1}. \quad (1.3.22)$$

Durch Einschieben solcher Identitäten können wir leicht von einer Darstellung in die andere umrechnen. Deshalb hat man in der Frühzeit der Quantentheorie diesen auf Dirac zurückgehenden Formalismus auch als **Transformationstheorie** bezeichnet. Wollen wir z.B. den Ortsoperator in der Impulsdarstellung finden, müssen wir berechnen

$$\mathbf{x}\tilde{\psi}(p) := \langle p | \mathbf{x} \psi \rangle. \quad (1.3.23)$$

Es ist klar, daß sich hier ein Einschleiben der Identität $\mathbb{1}$ mit verallgemeinerten Ortseigenvektoren empfiehlt:

$$\mathbf{x}\tilde{\psi}(p) = \int_{\mathbb{R}} dx \langle p|x \rangle \langle x|\mathbf{x}\psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \langle p|x \rangle \langle \mathbf{x}x|\psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx x \langle p|x \rangle \langle x|\psi \rangle. \quad (1.3.24)$$

Nun ist aber

$$\langle p|x \rangle = \langle x|p \rangle^* = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) \Rightarrow x \langle p|x \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \langle p|x \rangle. \quad (1.3.25)$$

Wir können also schreiben

$$\mathbf{x}\tilde{\psi}(p) = i\hbar \frac{d}{dp} \int_{\mathbb{R}} dx \langle p|x \rangle \langle x|\psi \rangle = i\hbar \frac{d}{dp} \tilde{\psi}(p). \quad (1.3.26)$$

Der **Ortsoperator in der Impulsdarstellung** ist also $i\hbar d/dp$.

Wie wir anhand dieser Beispiele gesehen haben, besitzen selbstadjungierte Operatoren stets ein **reelles Spektrum**², und die dazugehörigen (verallgemeinerten) Eigenvektoren zu verschiedenen Spektralwerten sind zueinander (im verallgemeinerten Sinne) orthogonal. Ohne Beweis nehmen wir an, daß diese (verallgemeinerten) Eigenzustände nach geeigneter Normierung insgesamt ein **vollständiges (verallgemeinertes) Orthogonalsystem** bilden. Im folgenden schreiben wir bei allgemeinen Betrachtungen die Gleichungen stets für diskrete Eigenwerte. Für verallgemeinerte Eigenwerte gelten die Gleichungen entsprechend im Sinne von Distributionen. Sind z.B. o_1 und o_2 echte voneinander verschiedene reelle Eigenwerte eines selbstadjungierten Operators, so gilt

$$\langle o_1|o_2 \rangle = 0 \quad \text{falls} \quad o_1 \neq o_2. \quad (1.3.27)$$

Falls die Werte hingegen zum kontinuierlichen Teil des Spektrums des Operators gehören, gilt (nach entsprechender Normierung)

$$\langle o_1|o_2 \rangle = \delta(o_1 - o_2). \quad (1.3.28)$$

Wir wollen die Orthogonalität (1.3.27) der Eigenvektoren und die Realität der Spektralwerte selbstadjungierter Operatoren beweisen. Seien also $|o_k\rangle$ Eigenvektoren des selbstadjungierten Operators \mathbf{O} zu den Eigenwerten o_k . Wir nehmen an, daß all diese Vektoren auf 1 normiert sind, d.h.

$$\langle o_k|o_k \rangle = 1. \quad (1.3.29)$$

Zum Beweis, daß die Eigenwerte reell sind, verwenden wir die Selbstadjungiertheit des Operators \mathbf{O} :

$$o_1 = \langle o_1|\mathbf{O}o_1 \rangle = \langle \mathbf{O}^\dagger o_1|o_1 \rangle = \langle \mathbf{O}o_1|o_1 \rangle = o_1^* \langle o_1|o_1 \rangle = o_1^*. \quad (1.3.30)$$

Das bedeutet aber in der Tat, daß $o_1 \in \mathbb{R}$ ist. Weiter gilt einerseits

$$\langle o_1|\mathbf{O}o_2 \rangle = o_2 \langle o_1|o_2 \rangle, \quad (1.3.31)$$

denn $|o_2\rangle$ ist Eigenvektor von \mathbf{O} zum Eigenwert o_2 . Andererseits gilt aber wegen der Selbstadjungiertheit von \mathbf{O} und der Realität von o_1

$$\langle o_1|\mathbf{O}o_2 \rangle = \langle \mathbf{O}^\dagger o_1|o_2 \rangle = \langle \mathbf{O}o_1|o_2 \rangle = o_1 \langle o_1|o_2 \rangle. \quad (1.3.32)$$

²Man nennt die Menge aller echten und verallgemeinerten Eigenwerte eines Operators sein **Spektrum**.

Ziehen wir dieses Resultat von (1.3.31) ab, erhalten wir schließlich

$$(o_2 - o_1) \langle o_1 | o_2 \rangle = 0. \quad (1.3.33)$$

Falls nun $o_1 \neq o_2$, d.h. $o_2 - o_1 \neq 0$ ist, folgt daraus in der Tat (1.3.28).

Falls es zu einem Eigenwert o_k von \mathbf{O} mehr als einen linear unabhängigen Eigenvektor gibt, bezeichnen wir die Eigenzustände mit $|o_k, \alpha\rangle$, wobei α eine diskrete oder kontinuierliche Variable ist, welche die verschiedenen Eigenvektoren zu diesem gleichen Eigenwert durchnummeriert. Man nennt diesen Eigenwert dann **entartet**. Diese Vektoren spannen den **Eigenraum** des Operators zum Eigenwert o_k auf. Wir können dann mit Hilfe des **Schmittschen Orthonormierungsverfahrens** [CH10] dafür sorgen, daß die Eigenvektoren in diesem Unterraum wieder ein Orthonormalsystem bilden, d.h. im Falle diskreter Werte α

$$\langle o_k, \alpha | o_k, \alpha' \rangle = \delta_{\alpha, \alpha'} = \begin{cases} 1 & \text{falls } \alpha = \alpha', \\ 0 & \text{falls } \alpha \neq \alpha' \end{cases} \quad (1.3.34)$$

und für kontinuierliche Werte

$$\langle o_k, \alpha | o_k, \alpha' \rangle = \delta(\alpha - \alpha'). \quad (1.3.35)$$

1.4 Verträglichkeit von Observablen

Damit haben wir alle Vorbereitungen getroffen, um die physikalische Bedeutung der Zustandsvektoren, die durch das **Bornsche Postulat** (1.1.2) gegeben ist, auszuarbeiten. Zunächst wollen wir klären, wie eine **vollständige Präparation eines Zustandes** erfolgen kann. Wir werden sehen, daß wir dazu einen **vollständigen Satz kompatibler Observabler** für das betrachtete System festlegen müssen. Wir wollen also zunächst überlegen, wann zwei oder mehrere Observable zugleich einen wohlbestimmten Wert besitzen können.

Nach dem Postulat (1.1.2) besitzt eine Observable A einen wohlbestimmten Wert genau dann, wenn der Systemzustand $|\psi\rangle = |a_k, \alpha_j\rangle$ ist, wobei a_k ein Eigenwert des der Observablen zugeordneten selbstadjungierten Operators \mathbf{A} ist. Wir nehmen der Einfachheit halber wieder an, daß die Eigenwerte dieses Operators (und die Werte α_j im Fall der Entartung) nur diskrete Werte annehmen. Wir gehen weiter unten noch auf den Fall des kontinuierlichen Spektrums näher ein. Ist das System nämlich im Zustand $|\psi\rangle$ mit $\|\psi\| = 1$ präpariert, so ist die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung von A den Wert a_k zu finden

$$w_\psi(a_k) = \sum_j |\langle a_k, \alpha_j | \psi \rangle|^2. \quad (1.4.1)$$

Da nun voraussetzungsgemäß die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_{jk} |a_k, \alpha_j\rangle \langle a_k, \alpha_j| = \mathbb{1} \quad (1.4.2)$$

gilt und folglich

$$\sum_{jk} \langle \psi | a_k, \alpha_j \rangle \langle a_k, \alpha_j | \psi \rangle = \sum_k w_\psi(a_k) = \langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad (1.4.3)$$

ist und $w_\psi(a_k) \geq 0$ ist, ist also $w_\psi(a_k) = 1$ genau dann, wenn

$$|\psi\rangle = \sum_j c_j |a_k, \alpha_j\rangle \quad \text{mit} \quad \sum_j |c_j|^2 = 1 \quad (1.4.4)$$

für genau einen Eigenwert a_k ist. Für alle anderen Eigenwerte $a_{k'}$ muß dann außerdem $w_\psi(a_{k'}) = 0$ sein, und nur genau in diesem Falle besitzt die Observable A aufgrund der Präparation des Systems im Zustand $|\psi\rangle$ den wohlbestimmten Wert a_k . Es muß also $|\psi\rangle$ tatsächlich ein Eigenvektor zu diesem Meßwert a_k sein.

In dem Fall, daß a_k ein entarteter Eigenwert ist, d.h. wenn es mehrere linear unabhängige Eigenvektoren zu diesem Eigenwert gibt, genügt eine Festlegung der Observablen A auf diesen Wert nicht, um den Zustand eindeutig festzulegen, und wir müssen eine weitere Observable B messen, um den Zustand genauer zu bestimmen. Dabei müssen wir allerdings darauf achten, daß diese Messung mit der Festlegung des Meßwertes der Observablen A **kompatibel** ist. Es muß also für jeden möglichen Meßwert a_k der Observablen A und jeden möglichen Meßwert b_l der Observablen B wenigstens ein **gemeinsamer Eigenvektor** der dazugehörigen Operatoren \mathbf{A} und \mathbf{B} existieren. Nehmen wir also an, daß dies der Fall ist und bezeichnen diese gemeinsamen Eigenvektoren mit $|a_k, b_l, \beta_m\rangle$, wobei β_m wieder die, bei einer möglicherweise immer noch bestehenden Entartung dieser gemeinsamen Eigenwerte, zueinander orthonormiert gewählten Eigenvektoren durchnumeriert. Wir wollen nun herausfinden, was dies für die Operatoren \mathbf{A} und \mathbf{B} bedeutet.

Dazu bemerken wir, daß wir wegen der Vollständigkeit der gemeinsamen Eigenvektoren

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \sum_{klm} \mathbf{A} |a_k, b_l, \beta_m\rangle \langle a_k, b_l, \beta_m| = \sum_{klm} a_k |a_k, b_l, \beta_m\rangle \langle a_k, b_l, \beta_m|, \\ \mathbf{B} &= \sum_{klm} \mathbf{B} |a_k, b_l, \beta_m\rangle \langle a_k, b_l, \beta_m| = \sum_{klm} b_l |a_k, b_l, \beta_m\rangle \langle a_k, b_l, \beta_m|. \end{aligned} \quad (1.4.5)$$

schreiben können. Das bedeutet aber

$$\begin{aligned} \mathbf{AB} &= \sum_{klm} \sum_{k'l'm'} a_k b_{l'} |a_k, b_l, \beta_m\rangle \underbrace{\langle a_k, b_l, \beta_m | a_{k'}, b_{l'}, \beta_{m'} \rangle}_{\delta_{kk'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}} \langle a_{k'}, b_{l'}, \beta_{m'}| \\ &= \sum_{klm} a_k b_l |a_k, b_l, \beta_m\rangle \langle a_k, b_l, \beta_m| = \mathbf{BA}. \end{aligned} \quad (1.4.6)$$

Die Reihenfolge der Operatormultiplikation ist in diesem Fall also unerheblich, d.h. die Operatoren **kommutieren**. Definieren wir also den Kommutator zweier beliebiger Operatoren \mathbf{A} und \mathbf{B} vermöge

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] := \mathbf{AB} - \mathbf{BA}, \quad (1.4.7)$$

bedeutet unsere obige Rechnung, daß es für das Vorliegen eines vollständigen Orthonormalsystems von gemeinsamen Eigenvektoren zweier selbstadjungierter Operatoren *notwendig* ist, daß der Kommutator dieser Operatoren verschwindet:

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = 0. \quad (1.4.8)$$

Man kann zeigen, daß diese Bedingung auch *hinreichend* ist.

Um nun also den Zustand des Systems $|\psi\rangle$ vollständig festzulegen, müssen wir die Werte eines **vollständigen Satzes voneinander unabhängiger miteinander kompatibler Observabler** A, B, C, \dots bestimmen. Dabei heißt ein Satz von Observablen kompatibel, wenn die dazugehörigen selbstadjungierten Operatoren untereinander kommutieren, so daß ein vollständiges Orthonormalsystem von simultanen Eigenzuständen dieser Operatoren existiert. Ein Satz solcher kompatibler Observabler heißt vollständig, wenn es zu allen möglichen Tupeln von Eigenwerten (a, b, c, \dots) **genau einen linear unabhängigen simultanen Eigenvektor** gibt. Die Unabhängigkeit der Observablen bedeutet, daß nicht ein Operator \mathbf{Z} in dem Satz als Funktion der übrigen Operatoren geschrieben werden kann, d.h. $\mathbf{Z} \neq f(\mathbf{A}, \mathbf{B}, \dots, \mathbf{Y})$.

In diesem Zusammenhang ist insbesondere die **Exponentialabbildung** eines Operators

$$\exp(\lambda \mathbf{A}) := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\lambda^k}{k!} \mathbf{A}^k \quad (1.4.9)$$

wichtig. Dabei bezeichnet λ eine beliebige reelle oder komplexe Zahl. Es ist dann auch klar, daß die Ableitung nach dem Parameter λ durch

$$\frac{d}{d\lambda} \exp(\lambda \mathbf{A}) = \mathbf{A} \exp(\lambda \mathbf{A}) = \exp(\lambda \mathbf{A}) \mathbf{A} \quad (1.4.10)$$

gegeben ist.

Wir müssen nun noch kurz auf die Besonderheiten eingehen, die sich für eventuell auftretende kontinuierliche Spektralwerte von Operatoren ergeben. Formal sind dann in dem oben zusammengefaßten Formalismus zunächst lediglich die Summen durch die entsprechenden Integrale zu ersetzen. Die wesentlichste Änderung liegt eher in der Interpretation der Resultate.

Nehmen wir der Einfachheit halber an, wir hätten ein System von nur einem Freiheitsgrad vorliegen, d.h. schon ein Operator \mathbf{A} bildet einen vollständigen Satz. Um ein konkretes Beispiel vor Augen zu haben, betrachten wir wieder ein Teilchen, das sich nur entlang der \mathbf{x} -Achse bewegt, und wir können dann die Ortskoordinate x als diese Observable wählen. Wir gelangen dann, wie oben ausgeführt, zur Formulierung der Quantenmechanik als Wellenmechanik in der Ortsdarstellung. Wie wir ebenfalls oben gesehen haben, besitzt der dazugehörige Ortsoperator \mathbf{x} ganz \mathbb{R} als Spektrum. Es liegen hier also keine diskreten Eigenwerte vor. Die dazugehörigen verallgemeinerten Eigenvektoren $|x\rangle$ sind **keine Hilbertraumvektoren** sondern Distributionen über dem entsprechenden dicht definierten Unterraum \mathcal{D} , der den Definitionsbereich des Operators \mathbf{x} bildet. Entsprechend können wir das Teilchen **nie präzise lokalisieren**. Ein echter Hilbertraumzustand, der ein Teilchen beschreibt, das sich „in der Nähe“ des Ortes x_0 aufhält, wird durch

$$|\psi_{x_0}\rangle = \int_{\mathbb{R}} dx A_{x_0}(x) |x\rangle \quad (1.4.11)$$

gegeben sein. Die Wellenfunktion ist

$$\psi_{x_0}(x) = \langle x | \psi_{x_0} \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx' A_{x_0}(x') \underbrace{\langle x | x' \rangle}_{\delta(x-x')} = A_{x_0}(x). \quad (1.4.12)$$

Dabei muß $A_{x_0} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ eine quadratintegrale Funktion sein. Damit $|\psi_{x_0}\rangle$ auf 1 normiert ist, verlangen wir

$$\langle \psi_{x_0} | \psi_{x_0} \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx |\psi_{x_0}(x)|^2 = \int_{\mathbb{R}} dx |A_{x_0}(x)|^2 = 1. \quad (1.4.13)$$

Da gemäß dem Bornschen Postulat (1.1.2) die Wahrscheinlichkeitsverteilung, das Teilchen am Ort x zu finden, durch

$$w(x) = |\psi_{x_0}(x)|^2 \quad (1.4.14)$$

gegeben ist, wird die Lokalisierung „in der Nähe von x_0 “ lediglich bedeuten, daß diese Wahrscheinlichkeitsverteilung um x_0 stark gepeakt ist. Sie wird aber eine gewisse **Breite** aufweisen. Entsprechend wird der **Erwartungswert** für den Ort

$$\langle x \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx x |\psi_{x_0}(x)|^2 = \int_{\mathbb{R}} \langle \psi_{x_0} | \mathbf{x} x \rangle \langle x | \psi_{x_0} \rangle = \langle \psi_{x_0} | \mathbf{x} \psi_{x_0} \rangle \quad (1.4.15)$$

mit einer gewissen **statistischen Unsicherheit** Δx „in der Nähe von x_0 “ liegen. Diese Unsicherheit kann, wie in der **Statistik** üblich, durch die **Standardabweichung** definiert werden:

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle \psi_{x_0} | \mathbf{x}^2 \psi_{x_0} \rangle - \langle x \rangle^2}. \quad (1.4.16)$$

1.5 Die Heisenbergsche Unschärferelation

Eine wichtige Folgerung aus der statistischen Interpretation des quantentheoretischen Zustandsbegriffs über die Bornsche Regel (1.1.2) ist die **Heisenbergsche Unschärferelation**. Seien dazu A und B zwei Observablen, die zueinander kompatibel oder inkompatibel sein können, und $|\psi\rangle$ irgendein Zustand³ des Systems. Dann gibt es eine **untere Schranke** für das Unschärfeprodukt $\Delta A \Delta B$.

Heisenberg ist auf diese Folgerung anhand des Beispiels von Ort und Impuls gekommen. Haben wir nämlich, wie in dem gerade besprochene Beispiel der Lokalisierung eines Teilchens in der Nähe des Ortes x_0 , eine Wellenfunktion $\psi_{x_0}(x)$, die scharf um diesen Ort gepeakt ist, so wird die entsprechende Impulsverteilung durch die Fouriertransformierte der Wellenfunktion gegeben sein (vgl. (1.3.12)). Die daraus resultierende Impulsverteilung wird aber desto breiter und entsprechend Δp desto größer sein je schärfer die Ortsverteilung (also je kleiner Δx) ist.

Der bis jetzt entwickelte quantentheoretische Formalismus läßt bereits eine Quantifizierung der Schranke für ΔA und ΔB zu. Um diese zu finden, definieren wir hilfsweise die neuen Operatoren

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} - \langle A \rangle \mathbb{1}, \quad \mathbf{B}' = \mathbf{B} - \langle B \rangle \mathbb{1}. \quad (1.5.1)$$

Die Erwartungswerte sind dabei bzgl. des betrachteten Zustandes $|\psi\rangle$ zu bilden. Dann gilt nämlich

$$\langle A' \rangle = \langle B' \rangle = 0, \quad \Delta A^2 = \langle A'^2 \rangle, \quad \Delta B^2 = \langle B'^2 \rangle, \quad [\mathbf{A}', \mathbf{B}'] = [\mathbf{A}, \mathbf{B}]. \quad (1.5.2)$$

Es sei weiter $\lambda \in \mathbb{R}$. Dann definieren wir das quadratische Polynom

$$P(\lambda) = \langle (\mathbf{A}' + i\lambda \mathbf{B}') \psi | (\mathbf{A}' + i\lambda \mathbf{B}') \psi \rangle = \langle \psi | (\mathbf{A}' - i\lambda \mathbf{B}') (\mathbf{A}' + i\lambda \mathbf{B}') \psi \rangle. \quad (1.5.3)$$

Ausmultiplizieren des Operatorprodukts liefert dann unter Verwendung von (1.5.2)

$$P(\lambda) = \Delta A^2 + \lambda^2 \Delta B^2 + \lambda \langle \psi | i[\mathbf{A}, \mathbf{B}] \psi \rangle. \quad (1.5.4)$$

Da \mathbf{A} und \mathbf{B} selbstadjungiert sind, gilt

$$\{i[\mathbf{A}, \mathbf{B}]\}^\dagger = -i(\mathbf{A}\mathbf{B} - \mathbf{B}\mathbf{A})^\dagger = -i(\mathbf{B}^\dagger \mathbf{A}^\dagger - \mathbf{A}^\dagger \mathbf{B}^\dagger) = -i(\mathbf{B}\mathbf{A} - \mathbf{A}\mathbf{B}) = +i[\mathbf{A}, \mathbf{B}]. \quad (1.5.5)$$

Es ist also auch $i[\mathbf{A}, \mathbf{B}]$ selbstadjungiert und folglich der Koeffizient von λ in (1.5.4) reell:

$$\langle \psi | i[\mathbf{A}, \mathbf{B}] \psi \rangle \in \mathbb{R}. \quad (1.5.6)$$

Das quadratische Polynom (1.5.4) ist also reell und wegen der positiven Definitheit des Skalarprodukts gilt für alle $\lambda \in \mathbb{R}$

$$P(\lambda) \geq 0. \quad (1.5.7)$$

³Es ist hier wichtig, daß es sich um einen „echten“ Hilbertraumvektor handelt und nicht um einen verallgemeinerten Eigenvektor zu einem Wert im kontinuierlichen Spektrum eines Operators!

Demnach besitzt dieses Polynom entweder eine einzige doppelte reelle Nullstelle oder zwei verschiedene zueinander komplex konjugierte Nullstellen. Nach der Lösungsformel für quadratische Gleichungen muß also für die Diskriminante des Polynoms

$$\frac{1}{4} \langle \psi | i[\mathbf{A}, \mathbf{B}] \psi \rangle^2 - \Delta A^2 \Delta B^2 \leq 0 \quad (1.5.8)$$

oder

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | i[\mathbf{A}, \mathbf{B}] \psi \rangle| \quad (1.5.9)$$

gelten. Dies ist die **Heisenbergsche Unschärferelation** für irgendwelche Observablen A und B . Sind insbesondere A und B kompatibel, können also deren Werte simultan scharf festgelegt werden, so kommutieren die entsprechenden Operatoren \mathbf{A} und \mathbf{B} , und die rechte Seite der Ungleichung verschwindet, und die Ungleichung ergibt dann keine echte Einschränkung für das Produkt der Standardabweichungen.

Betrachten wir die Unschärferelation insbesondere für **Ort und Impuls**. Aus der konkreten Darstellung der entsprechenden Operatoren für die Orts- und Impulskomponenten im Ortsraum (1.3.4) ergeben sich die Kommutatorrelationen (**Heisenberg-Algebra**)

$$[\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k] = [\mathbf{p}_j, \mathbf{p}_k] = 0, \quad [\mathbf{x}_j, \mathbf{p}_k] = i\hbar \delta_{jk}. \quad (1.5.10)$$

Dies in (1.5.9) eingesetzt ergibt die bekannte Heisenbergsche Unschärferelation für Ort und Impuls

$$\Delta x_j \Delta p_k \geq \frac{\hbar}{2} \delta_{jk}. \quad (1.5.11)$$

Es können also nur Komponenten von Ort und in Impuls in zueinander senkrechten Richtungen gleichzeitig scharf bestimmt sein. Ein vollständiger Satz kompatibler Observabler kann in diesem Falle als die drei Orts- oder die drei Impulskomponenten oder z.B. x_1 und p_2, p_3 etc. gewählt werden.

1.6 Unitäre Abbildungen

Unitäre Abbildungen sind dadurch definiert, daß sie linear sind und Skalarprodukte beliebiger Vektoren ungeändert lassen, d.h. es gilt für alle Vektoren $|\psi\rangle_1, |\psi\rangle_2 \in \mathcal{H}$

$$\langle \mathbf{U}\psi_1 | \mathbf{U}\psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle. \quad (1.6.1)$$

Offensichtlich ist dies genau dann der Fall, wenn

$$\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} = \mathbb{1} \quad (1.6.2)$$

ist. Dies folgt daraus, daß für ein VONS $\{|u_j\rangle\}_{j \in \mathbb{N}}$ des Hilbertraums

$$\delta_{jk} = \langle \mathbf{U}u_j | \mathbf{U}u_k \rangle = \langle u_j | \mathbf{U}^\dagger \mathbf{U}u_k \rangle = (\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U})_{jk} \quad (1.6.3)$$

und folglich

$$\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} = \sum_{jk} \underbrace{(\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U})_{jk}}_{\delta_{jk}} |u_j\rangle \langle u_k| = \sum_j |u_j\rangle \langle u_j| = \mathbb{1} \quad (1.6.4)$$

ist. Also ist \mathbf{U} eine **umkehrbar eindeutige lineare Abbildung des Hilbertraums in sich**, d.h. der Operator besitzt ein Inverses, und es gilt

$$\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^\dagger. \quad (1.6.5)$$

Ein wichtiges Beispiel für unitäre Operatoren sind Operatoren der Form

$$\mathbf{U}(\lambda) = \exp(i\lambda\mathbf{A}) \quad \text{mit} \quad \mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger, \quad \lambda \in \mathbb{R}. \quad (1.6.6)$$

Aus der Reihendarstellung (1.4.9) folgert man nämlich sofort, daß

$$\mathbf{U}^\dagger(\lambda) = [\exp(i\lambda\mathbf{A})]^\dagger = \exp(-i\lambda\mathbf{A}^\dagger) = \exp(-i\lambda\mathbf{A}). \quad (1.6.7)$$

Nun ist offenbar

$$\mathbf{U}^\dagger(\lambda)\mathbf{U}(\lambda) = \exp(-i\lambda\mathbf{A})\exp(i\lambda\mathbf{A}) = \exp(0) = \mathbb{1}. \quad (1.6.8)$$

Dabei haben wir allerdings verwendet, daß wir für die Operatorexponentialabbildung für beliebige **kommutierende Operatoren \mathbf{A} und \mathbf{B}** die Gleichung

$$\exp(\mathbf{A})\exp(\mathbf{B}) = \exp(\mathbf{A} + \mathbf{B}) \quad \text{falls} \quad [\mathbf{A}, \mathbf{B}] = 0 \quad (1.6.9)$$

verwenden dürfen, als ob \mathbf{A} und \mathbf{B} reelle oder komplexe Zahlen wären. Daß dies tatsächlich der Fall ist, folgert man daraus, daß für *kommutierende* Operatoren die binomische Formel wie für Zahlen gilt, d.h.

$$(\mathbf{A} + \mathbf{B})^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \mathbf{A}^k \mathbf{B}^{n-k} \quad \text{falls} \quad [\mathbf{A}, \mathbf{B}] = 0. \quad (1.6.10)$$

Nun gilt

$$\exp(\mathbf{A})\exp(\mathbf{B}) = \sum_{n_1, n_2=0}^{\infty} \frac{1}{n_1! n_2!} \mathbf{A}^{n_1} \mathbf{B}^{n_2}. \quad (1.6.11)$$

Ohne Beweis nehmen wir an, daß wir diese Doppelreihe beliebig umordnen dürfen. Dann können wir stets Operatorprodukte mit gleichen $n = n_1 + n_2$ zusammenfassen. Es folgt

$$\exp(\mathbf{A})\exp(\mathbf{B}) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^n \frac{1}{k!(n-k)!} \mathbf{A}^k \mathbf{B}^{n-k} \stackrel{(1.6.10)}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\mathbf{A} + \mathbf{B})^n =: \exp(\mathbf{A} + \mathbf{B}). \quad (1.6.12)$$

Dabei haben wir die Beziehung

$$\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!} \quad (1.6.13)$$

verwendet. Es ist klar, daß wir all diese Manipulationen *nicht* hätten durchführen können, wenn \mathbf{A} und \mathbf{B} nicht kommutieren. Dann gilt auch (1.6.9) i.a. nicht mehr.

1.7 Unitäre Symmetrietransformationen

Als Symmetrietransformation bezeichnen wir eine umkehrbar eindeutige simultane Abbildung der Zustände $|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle$ und Operatoren $\mathbf{O} \rightarrow \mathbf{O}'$, die alle **physikalischen Aussagen** bzgl. des betrachteten Systems ungeändert lassen.

Betrachten wir die Abbildung

$$|\psi'\rangle = \mathbf{U}|\psi\rangle, \quad \mathbf{O}' = \mathbf{U}\mathbf{O}\mathbf{U}^\dagger \quad (1.7.1)$$

für einen beliebigen **unitären Operator** \mathbf{U} , so haben wir eine Symmetrietransformation vorliegen. Zum einen wird ein VONS von Eigenvektoren $|o, \alpha\rangle$ von \mathbf{O} in ein VONS $|o', \alpha'\rangle$ von Eigenvektoren von \mathbf{O}' zum gleichen Eigenwert $o' = o$ abgebildet:

$$\mathbf{O}'|o', \alpha'\rangle = \mathbf{U}\mathbf{O}\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U}|o, \alpha\rangle = \mathbf{U}\mathbf{O}|o, \alpha\rangle = o\mathbf{U}|o, \alpha\rangle = o|o', \alpha'\rangle. \quad (1.7.2)$$

Es ist also $|o', \alpha'\rangle$ in der Tat ein Eigenvektor des Operators \mathbf{O}' zum Eigenwert $o' = o$. Die Vollständigkeit dieses Systems von Eigenvektoren ergibt sich ebenfalls sofort aus der Unitarität von \mathbf{U} und der Vollständigkeit von $|o, \alpha\rangle$:

$$\sum_{o', \alpha'} |o', \alpha'\rangle\langle o', \alpha'| = \sum_{o, \alpha} \mathbf{U}^\dagger |o, \alpha\rangle\langle o, \alpha| \mathbf{U} = \mathbf{U}^\dagger \left(\sum_{o, \alpha} |o, \alpha\rangle\langle o, \alpha| \right) \mathbf{U} = \mathbf{U}^\dagger \mathbb{1} \mathbf{U} = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} = \mathbb{1}. \quad (1.7.3)$$

Es ist also auch das System $|o', \alpha'\rangle$ vollständig. Daß es auch ein Orthonormalsystem ist, folgt aus der Invarianz des Skalarprodukts (1.6.1). Es ist also auch $|o', \alpha'\rangle$ ein VONS. Aus der dazugehörigen Spektralzerlegung von \mathbf{O}' folgt daraus insbesondere auch sofort, daß mit \mathbf{O} auch \mathbf{O}' selbstadjungiert ist. Damit ist klar, daß bei einer Verwendung von \mathbf{O}' als Operator, der die Observable O repräsentiert, hinsichtlich der möglichen Meßwerte dieselben Vorhersagen gemacht werden wie wenn wir \mathbf{O} verwenden, denn das Spektrum beider Operatoren ist identisch. Im folgenden können wir also schreiben

$$\mathbf{U}|o, \alpha\rangle = |o, \alpha'\rangle. \quad (1.7.4)$$

Es bleiben auch alle Wahrscheinlichkeitsaussagen der Theorie erhalten, wenn wir entsprechend alle Zustände $|\psi\rangle$ gemäß (1.7.1) transformieren. So ist die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung der Observablen O einen bestimmten Wert o zu finden gemäß der Bornschen Regel durch

$$w_\psi(o) = \sum_\alpha |\langle o, \alpha | \psi \rangle|^2 = \sum_{\alpha'} |\langle o, \alpha' | \psi' \rangle|^2 \quad (1.7.5)$$

gegeben. Wir erhalten also dieselbe Wahrscheinlichkeitsverteilung für die möglichen Meßwerte, wenn wir statt der ursprünglichen Eigenvektoren $|u, \alpha\rangle$ und dem ursprünglichen Zustandsvektor ψ die gemäß (1.7.1) transformierten Vektoren verwenden. Insgesamt ändert sich also an den Vorhersagen eines quantentheoretischen Modells nichts, wenn man alle Vektoren und Operatoren dieser Transformation unterzieht. Sie ist also tatsächlich eine **Symmetrietransformation**.

Auch die Kommutatorrelationen ändern sich nicht, denn es gilt für irgendwelche zwei Operatoren \mathbf{A} und \mathbf{B}

$$\mathbf{A}'\mathbf{B}' = \mathbf{U}\mathbf{A}\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U}\mathbf{B}\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{U}\mathbf{A}\mathbf{B}\mathbf{U}^\dagger \quad (1.7.6)$$

und folglich

$$[\mathbf{A}', \mathbf{B}'] = \mathbf{U}[\mathbf{A}, \mathbf{B}]\mathbf{U}^\dagger. \quad (1.7.7)$$

Wir bemerken noch, daß auch allgemeinere Transformationen Symmetrietransformationen sein können, denn es müssen nicht die Skalarprodukte selbst ungeändert bleiben sondern nur ihre Beträge. Es muß also lediglich

$$|\langle \psi'_1 | \psi'_2 \rangle| = |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle| \quad (1.7.8)$$

gelten. Man kann zeigen, daß sich Abbildungen mit dieser Eigenschaft, die keine **unitären Abbildungen** der Art (1.7.1) sind, als sog. **antiunitäre Abbildungen** beschreiben lassen. Wir wollen dieses sog. **Theorem von Wigner und Bargmann** [Bar64, Mes99] hier nicht beweisen. In der Physik benötigt man diesen Fall für die Beschreibung der **Zeitumkehrsymmetrie**. Wir kommen darauf später noch im Zusammenhang mit der relativistischen Quantentheorie noch ausführlich zu sprechen.

Ein besonders einfacher (wenngleich wichtiger) Spezialfall einer unitären Symmetrie ist die **Phaseninvarianz** der Quantentheorie. Setzen wir nämlich

$$\mathbf{U} = \exp(i\varphi)\mathbb{1} \quad \text{mit} \quad \varphi \in \mathbb{R}, \quad (1.7.9)$$

so ist gemäß (1.7.1)

$$|\psi'\rangle = \exp(i\varphi)|\psi\rangle, \quad \mathbf{O}' = \mathbf{O}. \quad (1.7.10)$$

Daß \mathbf{U} unitär ist, ist klar, denn es gilt

$$\mathbf{U}^\dagger = \exp(-i\varphi)\mathbb{1}^\dagger = \exp(-i\varphi)\mathbb{1}. \quad (1.7.11)$$

Wir können also alle Vektoren $|\psi\rangle$ mit **demselben Phasenfaktor** multiplizieren, ohne daß sich an den Aussagen über das physikalische System etwas ändert, d.h. insbesondere, daß der Vektor $|\psi'\rangle = \exp(i\varphi)|\psi\rangle$ denselben Zustand des Systems repräsentiert wie $|\psi\rangle$.

Als weiteres weniger triviales Beispiel betrachten wir

$$\mathbf{U}_T(\vec{\xi}) = \exp\left(\frac{i\vec{\xi} \cdot \vec{\mathbf{p}}}{\hbar}\right). \quad (1.7.12)$$

Wir wollen zeigen, daß dieser Operator **räumliche Translationen** beschreibt. Das ist insofern plausibel als auch in der **klassischen Mechanik** der Impuls die zur **räumlichen Translationssymmetrie** gehörige Erhaltungsgröße und im Poissonklammernformalismus der Hamiltonschen Mechanik **Generator dieser räumlichen Translationen** ist (Noethertheorem! Vgl. [Hee08a]). Wir gehen darauf in Kapitel 2 dieses Manuskripts noch sehr genau ein.

Betrachten wir zunächst die Wirkung des Operators $\mathbf{U}_T(\vec{\xi})$ auf die Orts- und Impulsoperatoren gemäß (1.7.1). Da die Impulsoperatoren wegen (1.5.10) untereinander und folglich auch mit jeder Funktion von Impulsoperatoren vertauschen, gilt

$$\vec{\mathbf{p}}' = \mathbf{U}_T(\vec{\xi})\vec{\mathbf{p}}\mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}) = \vec{\mathbf{p}}\mathbf{U}_T(\vec{\xi})\mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}) = \vec{\mathbf{p}}. \quad (1.7.13)$$

Der Impulsoperator bleibt also ungeändert, so wie es ja räumlichen Translationen entspricht.

Etwas schwieriger ist die Herleitung der Transformation des Ortsoperators. Dazu betrachten wir den transformierten Operator als Funktion der Parameter $\vec{\xi}$:

$$\mathbf{x}'_j(\vec{\xi}) = \mathbf{U}_T(\vec{\xi})\mathbf{x}_j\mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}). \quad (1.7.14)$$

Bilden wir nun die Ableitung nach ξ_k :

$$\frac{\partial}{\partial \xi_k} \mathbf{x}'_j(\vec{\xi}) = \left[\frac{\partial}{\partial \xi_k} \mathbf{U}_T(\vec{\xi}) \right] \mathbf{x}_j \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}) + \mathbf{U}_T(\vec{\xi}) \mathbf{x}_j \frac{\partial}{\partial \xi_k} \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}). \quad (1.7.15)$$

Da alle drei Impulsoperatoren untereinander vertauschen, gilt

$$\frac{\partial}{\partial \xi_k} \mathbf{U}_T(\vec{\xi}) = \frac{i}{\hbar} \mathbf{U}_T(\vec{\xi}) \mathbf{p}_k, \quad \frac{\partial}{\partial \xi_k} \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}) = -\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_k \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}). \quad (1.7.16)$$

Dies in (1.7.15) eingesetzt ergibt nach einigen einfachen Umformungen

$$\frac{\partial}{\partial \xi_k} \mathbf{x}'_j(\vec{\xi}) = -\frac{i}{\hbar} \mathbf{U}_T(\vec{\xi}) \underbrace{[\mathbf{x}_j, \mathbf{p}_k]}_{i\hbar\delta_{jk}} \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}) = \delta_{jk} \mathbb{1} \quad (1.7.17)$$

Dies können wir wieder integrieren, um

$$\mathbf{x}'_j(\vec{\xi}) = \mathbf{x}'_j(0) + \xi_j \mathbb{1} \quad (1.7.18)$$

zu erhalten. Wegen $\mathbf{U}_T(0) = \mathbb{1}$ ist $\mathbf{x}'_j(0) = \mathbf{x}_j$, d.h. es gilt

$$\vec{\mathbf{x}}'(\vec{\xi}) = \vec{\mathbf{x}} + \vec{\xi} \mathbb{1}. \quad (1.7.19)$$

Auch dies entspricht der erwarteten Translation des Koordinatensystems um den Vektor $\vec{\xi}$.

Die Wirkung des Operators (1.7.12) auf die Hilbertraumvektoren untersuchen wir am einfachsten in der Ortsdarstellung. Zunächst gilt für die Ortseigenvektoren

$$\vec{\mathbf{x}} \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}) |\vec{x}\rangle \stackrel{(1.7.19)}{=} \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}) \vec{\mathbf{x}}' |\vec{x}\rangle = \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}) (\vec{\mathbf{x}} + \vec{\xi} \mathbb{1}) |\vec{x}\rangle = (\vec{x} + \vec{\xi}) \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}) |\vec{x}\rangle. \quad (1.7.20)$$

Es ist also $\mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}) |\vec{x}\rangle$ Eigenvektor des Ortsoperators zum Eigenwert $\vec{x} + \vec{\xi}$. Im folgenden wählen wir die Ortseigenvektoren als

$$|\vec{x}\rangle = \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{x}) |0\rangle. \quad (1.7.21)$$

Dabei bezeichnet $|0\rangle$ den Eigenvektor von $\vec{\mathbf{x}}$ zum Eigenwert 0. Da die simultanen Ortseigenvektoren bis auf einen Phasenfaktor eindeutig bestimmt sind, entspricht die Wahl (1.7.21) lediglich einer bequemen Phasenkonvention für die verallgemeinerten Ortseigenvektoren. Physikalische Aussagen sind nämlich unabhängig von der Wahl dieser Phasen.

Damit können wir aber die Wirkung des Translationsoperators auf die Wellenfunktion in der Ortsdarstellung berechnen

$$\begin{aligned} \psi'(\vec{x}) &= \langle \vec{x} | \mathbf{U}_T(\vec{\xi}) \psi \rangle = \langle \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{x}) 0 | \mathbf{U}_T(\vec{\xi}) \psi \rangle = \\ &= \langle \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{\xi}) \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{x}) 0 | \psi \rangle = \langle \mathbf{U}_T^\dagger(\vec{x} + \vec{\xi}) 0 | \psi \rangle = \psi(\vec{x} + \vec{\xi}). \end{aligned} \quad (1.7.22)$$

Die Wellenfunktion verhält sich also bzgl. Translationen wie ein **skalares Feld**.

Wir bemerken noch, daß die Translationen eine **Abelsche Gruppe** bilden. Die Hintereinanderausführung zweier Translationen um die Verschiebungsvektoren $\vec{\xi}_1$ bzw. $\vec{\xi}_2$ ergibt nämlich wieder eine Verschiebung mit dem Verschiebungsvektor $\vec{\xi}_1 + \vec{\xi}_2$. Dabei ist die Reihenfolge der Verschiebungen offenbar unerheblich, denn es gilt $\vec{\xi}_1 + \vec{\xi}_2 = \vec{\xi}_2 + \vec{\xi}_1$. In der Quantentheorie hatten wir die Translationen mit dem unitären Operator (1.2.35) dargestellt. Wegen der Kommutativität der Impulsoperatoren gilt (die übrigens bei den obigen Rechnungen bereits benutzte!) Beziehung

$$\mathbf{U}_T(\vec{\xi}_2) \mathbf{U}_T(\vec{\xi}_1) = \mathbf{U}_T(\vec{\xi}_1 + \vec{\xi}_2) = \mathbf{U}_T(\vec{\xi}_1) \mathbf{U}_T(\vec{\xi}_2). \quad (1.7.23)$$

Die Hintereinanderausführung der quantenmechanischen Translationsoperatoren liefert also dieselbe Gruppenbeziehung wie die Transformationsgruppe. MaW. bezeichnen wir die Translation des Ortsvektors mit $T(\vec{\xi})$, so gilt

$$T(\vec{\xi}_2) T(\vec{\xi}_1) = T(\vec{\xi}_1 + \vec{\xi}_2) = T(\vec{\xi}_1) T(\vec{\xi}_2), \quad (1.7.24)$$

d.h. die in diesem Fall abelsche Gruppenmultiplikation erfüllt dieselben Relationen wie sie auch die unitären Operatoren gemäß (1.7.23) besitzen. Wir haben also mit den unitären Transformationen (1.7.12) eine Abbildung der **Translationsgruppe** \mathcal{T} des \mathbb{R}^3 in die Gruppe der **unitären Transformationen**

im Hilbertraum $\mathcal{U}(\mathcal{H})$. Diese Abbildung der Gruppenelemente erfüllt dieselben Gruppenverknüpfungsregeln wie die Elemente der Gruppe selbst (vgl. (1.7.23) mit (1.7.24)!). Man nennt dies eine **unitäre Darstellung der Gruppe im Hilbertraum**.

Allgemein entspricht also einer Symmetriegruppe in der klassischen Theorie (hier der Newtonschen Mechanik) in der ihr entsprechenden Quantentheorie einer **unitären Darstellung** dieser Gruppe im Hilbertraum⁴. Man gelangt allerdings eher umgekehrt durch die Betrachtungen der unitären Darstellung der Symmetriegruppe der klassischen Theorie und durch Ableitung (analog zu unserem Vorgehen in Gl. (1.7.17)) zu den **Kommutatorrelationen** der entsprechenden selbstadjungierten Operatoren, aus denen sich wiederum die Eigenschaften der Wellenfunktionen dieser Quantentheorie und damit eine zur praktischen Lösung von physikalischen Problemen verwendbare Realisierung derselben ergibt. Wir könnten z.B. die oben besprochene Realisierung der nichtrelativistischen Quantentheorie eines Teilchens allein aus den Kommutatorregeln der Heisenberg-Algebra (1.5.10) gewinnen. Darauf kommen wir im nächsten Kapitel noch ausführlich zurück.

1.8 Die Dynamik im Schrödingerbild

Wir beschäftigen uns nun mit der Beschreibung der **Zeitentwicklung** der die Observablen repräsentierenden selbstadjungierten Operatoren und der Zustandsvektoren im Hilbertraum. Wir wollen zunächst die dynamische Beschreibung eines Quantensystems in einer speziellen Form, dem sog. **Schrödingerbild** gewinnen. Dieses erhalten wir durch unmittelbare Identifikation der Operatoren und Zustände mit den entsprechenden Elementen in der Ortsdarstellung. Die **Wellenfunktion** ist **zeitabhängig**, während die fundamentalen Observablen (z.B. Ort und Impuls für ein spinloses Teilchen), durch die sich alle anderen Observablenoperatoren ausdrücken lassen, durch **zeitunabhängige** Differentialoperatoren beschrieben werden. Die Zeitentwicklung der Wellenfunktion wird dabei durch die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \vec{x}) = \hat{H} \psi(t, \vec{x}) \quad (1.8.1)$$

beschrieben. Der **Hamiltonoperator**⁵ \mathbf{H} ist dabei für den einfachsten Fall eines Teilchens in einem äußeren Kraftfeld mit Potential V durch

$$\mathbf{H} = \frac{\vec{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\vec{\mathbf{x}}) \quad (1.8.2)$$

gegeben. Dieser besitzt wegen (1.3.4) in der in (1.8.1) benötigten Ortsdarstellung die Form

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \quad (1.8.3)$$

mit dem **Laplaceoperator**

$$\Delta = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (1.8.4)$$

Statt der hier angegebenen Form in kartesischen Koordinaten kann man ihn freilich in irgendwelchen anderen dem jeweiligen Problem angepaßten Koordinaten, z.B. Kugel- oder Zylinderkoordinaten, verwenden (s. dazu [CH10]). Da der Hamiltonoperator \mathbf{H} die **Zeitentwicklung** des Systems beschreibt,

⁴Die einzige Ausnahme bilden die Zeitumkehrtransformationen, die (wie schon oben erwähnt) durch eine antiunitäre Abbildung repräsentiert werden müssen.

⁵Um den Operator bzgl. der Ortsdarstellung von dem abstrakten Operator im Hilbertraum zu unterscheiden bezeichnen wir den ersteren mit \hat{H} und den letzteren mit \mathbf{H} . Der Zusammenhang ist durch $\hat{H}\psi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \mathbf{H} \psi \rangle$ gegeben.

repräsentiert er die **Energie** des Systems. Dies entspricht unserem Postulat 4, auf das wir gleich noch näher eingehen werden. Da \mathbf{H} selbstadjungiert ist, ist die Zeitentwicklung eine **unitäre Transformation**. Insbesondere bleibt die Normierung der Wellenfunktion zeitlich erhalten. Sind nämlich ψ_1 und ψ_2 irgendwelche Lösungen der Schrödingergleichung (1.8.1), so folgt

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi_1(t) | \psi_2(t) \rangle &= i\hbar \left(\left\langle \frac{d}{dt} \psi_1(t) \middle| \psi_2(t) \right\rangle + \left\langle \psi_1(t) \middle| \frac{d}{dt} \psi_2(t) \right\rangle \right) \\ &= \left\langle -i\hbar \frac{d}{dt} \psi_1(t) \middle| \psi_2(t) \right\rangle + \left\langle \psi_1(t) \middle| i\hbar \frac{d}{dt} \psi_2(t) \right\rangle \\ &= -\langle \mathbf{H} \psi_1(t) | \psi_2(t) \rangle + \langle \psi_1(t) | \mathbf{H} \psi_2(t) \rangle \\ &= -\langle \psi_1(t) | \mathbf{H} \psi_2(t) \rangle + \langle \psi_1(t) | \mathbf{H} \psi_2(t) \rangle = 0, \end{aligned} \quad (1.8.5)$$

d.h. die Skalarprodukte von beliebigen Zustandsvektoren ändern sich nicht mit der Zeit, und damit ist die Zeitentwicklung eine unitäre Transformation. Insbesondere bleibt die zum Anfangszeitpunkt vorgenommene **Normierung der Zustandsvektoren** erhalten:

$$\|\psi(t)\|^2 = \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = 1. \quad (1.8.6)$$

Da die Observablenoperatoren zeitunabhängig sind, sind auch deren **Eigenfunktionen zeitunabhängig**. Identifizieren wir also über die verallgemeinerten Eigenzustände des Ortsoperators die Wellenfunktionen mit Kets im Hilbertraum vermöge

$$|\psi(t)\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\vec{x}\rangle \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\vec{x}\rangle \psi(t, \vec{x}), \quad (1.8.7)$$

ist der Zustandsket eine Funktion der Zeit. Leiten wir diese Gleichung nach der Zeit ab, erhalten wir

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\vec{x}\rangle \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \vec{x}) \quad (1.8.8)$$

und mit der Schrödingergleichung (1.8.1)

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\vec{x}\rangle \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi(t, \vec{x}) = \frac{1}{i\hbar} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\vec{x}\rangle \langle \vec{x} | \mathbf{H} \psi(\vec{x}) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \mathbf{H} |\psi(t)\rangle. \quad (1.8.9)$$

Wir haben oben auch gesehen, daß aufgrund der Selbstadjungiertheit des Hamiltonoperators die Zeitentwicklung in der Ortsdarstellung durch eine unitäre Transformation der Wellenfunktion gegeben ist. Entsprechend verallgemeinert sich diese Beobachtung auf die darstellungsunabhängigen Zustandskets. Es gibt also für jedes $t > t_0$ eine unitäre Transformation $\mathbf{U}(t, t_0)$, so daß

$$|\psi(t)\rangle = \mathbf{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (1.8.10)$$

ist. Es muß natürlich insbesondere $\mathbf{U}(t_0, t_0) = \mathbb{1}$ gelten.

Um die Bewegungsgleichung für $\mathbf{U}(t, t_0)$ zu finden, leiten wir (1.8.10) nach der Zeit ab:

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = \left[\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}(t, t_0) \right] \mathbf{U}^\dagger(t, t_0) |\psi(t)\rangle. \quad (1.8.11)$$

Der Vergleich mit (1.8.9) ergibt

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}(t, t_0) \right] \mathbf{U}^\dagger(t, t_0) = \frac{1}{i\hbar} \mathbf{H}. \quad (1.8.12)$$

Nun gilt

$$\mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger = \mathbb{1} \Rightarrow (\partial_t \mathbf{U})\mathbf{U}^\dagger + \mathbf{U}(\partial_t \mathbf{U}^\dagger) = 0. \quad (1.8.13)$$

Die letzte Beziehung bedeutet, daß

$$\mathbf{H} = i\hbar[\partial_t \mathbf{U}(t, t_0)]\mathbf{U}^\dagger(t, t_0) \quad (1.8.14)$$

tatsächlich selbstadjungiert ist. Dies ist konsistent mit der Forderung, daß der Hamiltonoperator \mathbf{H} die Energie des Teilchens repräsentiert. Multiplizieren von (1.8.14) von rechts mit $i\hbar\mathbf{U}$ ergibt

$$i\hbar\partial_t \mathbf{U}(t, t_0) = \mathbf{H}\mathbf{U}(t, t_0). \quad (1.8.15)$$

Wir zeigen weiter, daß dabei \mathbf{H} lokal in der Zeit sein muß, d.h. \mathbf{H} hängt höchstens von t , nicht aber von t_0 ab. Dazu bemerken wir, daß der Zeitentwicklungsoperator \mathbf{U} die Bedingung

$$\mathbf{U}(t, t_0) = \mathbf{U}(t, t_1)\mathbf{U}(t_1, t_0) \quad (1.8.16)$$

erfüllen muß, denn die Hintereinanderausführung der Zeitentwicklung der Zustände von der Zeit t_0 bis zur Zeit t_1 und dann von t_1 bis t muß zusammengenommen der Zeitentwicklung von t_0 bis t entsprechen. Leitet man dies nach t ab und benutzt (1.8.15), folgt sofort, daß auch

$$\mathbf{H} = i\hbar\mathbf{U}^\dagger(t, t_1)\partial_t \mathbf{U}(t, t_1) \quad (1.8.17)$$

gilt, d.h. \mathbf{H} ist höchstens eine Funktion von t , nicht vom Anfangszeitpunkt t_0 . In abgeschlossenen Systemen ist \mathbf{H} definitionsgemäß zeitunabhängig.

Die genaue Form des Hamiltonoperators für ein gegebenes System ist natürlich durch physikalische Prinzipien zu gewinnen und kann nicht mathematisch hergeleitet werden. Als sehr tragfähig haben sich in der gesamten modernen Physik die Symmetrieprinzipien erwiesen, aus denen heraus man Wechselwirkungen postulieren kann. Dabei spielt das **Noethertheorem** eine wesentliche Rolle, also daß jeder unabhängigen Symmetrieoperation (das sind in der Quantentheorie im wesentlichen die unitären Transformationen), die den Hamiltonoperator invariant läßt, ein Erhaltungssatz entspricht. Durch die empirische Beobachtung von Erhaltungsgrößen lassen sich nun aber umgekehrt auch die Symmetrieprinzipien gewinnen, die zur Aufstellung des Hamiltonoperators benutzt werden können. Wir gehen auf diese fundamentalen Symmetrieprinzipien im nächsten Kapitel noch ausführlich ein.

Nehmen wir nun an, der Hamiltonoperator sei zeitunabhängig. In dem bis jetzt ausschließlich benutzten Schrödingerbild heißt das, daß er eine Funktion der fundamentalen Operatoren \vec{x} und \vec{p} und nicht der Zeit ist. Dann ist die Lösung der Differentialgleichung (1.8.15) formal sehr einfach. Wir können dann nämlich diese Gleichung genauso wie eine Differentialgleichung für komplexwertige Funktionen behandeln, denn es treten keine Probleme mit der Nichtkommutativität von Operatoren auf. Demnach ist die formale Lösung durch

$$\mathbf{U}(t, t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t - t_0)\mathbf{H}\right] \quad (1.8.18)$$

gegeben. Daß dies tatsächlich die Lösung ist, weist man sehr leicht durch Ableiten der Gleichung nach. Dabei ist es entscheidend, daß in diesem Fall \mathbf{U} mit \mathbf{H} für jedes t vertauscht. Wäre \mathbf{H} zeitabhängig, wäre dies nicht mehr unbedingt der Fall und die Lösung des Problems weitaus verwickelter. Wir kommen darauf weiter unten noch zurück.

Wichtig ist noch die Frage nach den stationären Zuständen. Dies war ja einer der Ausgangspunkte für die Entwicklung der Quantentheorie, nämlich die Lösung des Problems, wie es stabile Atome geben

kann, was klassisch ja nicht mit den Rutherford'schen Beobachtungen bzgl. der um den Kern „kreisenden“ Elektronen vereinbar ist. Für die Quantentheorie stellt das deshalb kein Problem dar, weil wir nach Zuständen suchen können, die sich zeitlich nicht ändern. Beobachtbar sind aber Zustände nicht direkt, nur die Meßwerte von Observablen (Eigenwerte der dazugehörigen Operatoren) am Einzelsystem bzw. deren Erwartungswerte und Wahrscheinlichkeiten für eine große Zahl von gleich präparierten Systemen (Ensembles). Das bedeutet aber, daß zwei Zustände $|\psi\rangle$ und $|\psi'\rangle$, die sich nur durch einen „Phasenfaktor“, also durch Multiplikation mit einer komplexen Zahl vom Betrag 1, unterscheiden, die gleiche physikalische Situation beschreiben und im Sinne der Quantentheorie als der gleiche Zustand angesehen werden müssen. Damit ist $|\psi(t)\rangle$ ein stationärer Zustand, wenn für jeden Zeitpunkt t eine reelle Zahl $\alpha(t)$ existiert, so daß

$$|\psi(t)\rangle_{\text{stat.}} = \exp[-i\alpha(t)]|\psi(t_0)\rangle_{\text{stat.}} \quad (1.8.19)$$

gilt.

Andererseits folgt aus (1.8.9) für einen stationären Zustand

$$\hbar\dot{\alpha}(t)|\psi(t)\rangle_{\text{stat.}} = \mathbf{H}(t)|\psi(t)\rangle_{\text{stat.}} \quad (1.8.20)$$

Das bedeutet aber, daß $|\psi(t)\rangle_{\text{stat.}}$ zu jedem Zeitpunkt ein Eigenvektor des Hamiltonoperators $\mathbf{H}(t)$ zum Eigenwert $\hbar\dot{\alpha}(t)$ sein muß. Es ist also notwendig

$$\mathbf{H}(t)|\psi(t_0)\rangle_{\text{stat.}} = E(t)|\psi(t_0)\rangle_{\text{stat.}} \quad \text{mit} \quad E(t) = \hbar\dot{\alpha}(t). \quad (1.8.21)$$

Falls \mathbf{H} zeitunabhängig ist, ist auch $E(t) = E = \text{const.}$, und es gilt wegen (1.8.18)

$$|\psi(t)\rangle_{\text{stat.}} = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E\right]|\psi(t_0)\rangle_{\text{stat.}} \quad (1.8.22)$$

Wir können also festhalten: Stationäre Zustände eines Systems sind genau die **Eigenzustände des Hamiltonoperators**. Wegen ihrer Wichtigkeit nennt man die Eigenwertgleichung des Hamiltonoperators in der Ortsdarstellung auch **zeitunabhängige Schrödingergleichung**.

Es ist klar, daß bei gegebener Anfangsbedingung in Form der Wellenfunktion $\psi_0(\vec{x}) = \psi(t_0, \vec{x})$ die allgemeine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung am einfachsten durch Entwicklung nach Energieeigenfunktionen gegeben ist. Ist nämlich $|E, \alpha\rangle$ ein vollständiger Satz von Energieeigenzuständen, wobei α eventuelle weitere den Zustand charakterisierende diskrete und kontinuierliche Parameter bezeichnet, so können wir (1.8.18) wie folgt verwenden:

$$\begin{aligned} \psi(t, \vec{x}) &= \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle = \langle \vec{x} | \mathbf{U}(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle = \sum_{\int} dE \sum_{\int} d\alpha \langle \vec{x} | E, \alpha \rangle \langle E, \alpha | \mathbf{U}(t, t_0) | \psi, t_0 \rangle \\ &= \sum_{\int} dE \exp\left[-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)\right] \sum_{\int} d\alpha \phi_{E, \alpha}(\vec{x}) \langle E, \alpha | \psi(t_0) \rangle. \end{aligned} \quad (1.8.23)$$

Dabei definieren wir die Energieeigenfunktionen

$$\begin{aligned} \phi_{E, \alpha}(\vec{x}) &= \langle \vec{x} | E, \alpha \rangle \quad \text{mit der Normierung} \\ \langle E', \alpha' | E, \alpha \rangle &= \delta(E - E')\delta(\alpha - \alpha') = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \phi_{E', \alpha'}^*(\vec{x})\phi_{E, \alpha}(\vec{x}). \end{aligned} \quad (1.8.24)$$

Die kombinierten Summations-Integralzeichen über E und α bedeuten wieder Integrale über den kontinuierlichen und Summen über den diskreten Teil des Spektrums der betreffenden Operatoren des gerade verwendeten vollständigen Satzes kompatibler Observabler. Ebenso bedeuten die δ -Distributionen in (1.8.24) im diskreten Teil des Spektrums Kronecker-Symbole.

Die Komponenten des Anfangszustandes sind durch

$$\langle E, \alpha | \psi(t_0) \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \langle E, \alpha | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \psi(t_0) \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \phi_{E, \alpha}^*(\vec{x}) \psi_0(\vec{x}) \quad (1.8.25)$$

gegeben. Haben wir also den vollständigen Satz von Energieeigenfunktion gemäß (1.8.24) bestimmt, können wir die Lösung des Anfangswertproblems der zeitabhängigen Schrödingergleichung sofort angeben.

1.9 Bildtransformationen

Wir haben oben schon mehrfach betont, daß die Elemente der Quantentheorie, nämlich die selbstadjungierten Operatoren, die Observablen repräsentieren, und die Hilbertraumvektoren, die die Zustände des Systems repräsentieren, selbst nicht direkt beobachtbar sind. Mögliche Meßwerte von Observablen sind durch die Eigenwerte der sie repräsentierenden Observablen bestimmt. Bei einer Präparation des Systems, das die Werte eines vollständigen Satzes kompatibler Observabler festlegt, befindet sich das System in den zu diesen simultanen Meßwerten gehörigen eindeutig bestimmten Eigenzustand. Allen Observablen, zu dem dieser Zustand nicht Eigenzustand ist, kommt kein eindeutiger Wert zu, es können aber Erwartungswerte solcher Observablen und die Wahrscheinlichkeit des Eintretens bestimmter möglicher Meßwerte gewonnen werden.

Alle an realen Systemen durch Messung prinzipiell überhaupt erfaßbaren Größen (wie die möglichen Meßwerte einer Observablen, Erwartungswerte von Observablen oder Wahrscheinlichkeitsverteilungen für die Werte von Observablen) ändern sich offenbar nicht, wenn wir eine unitäre Transformation \mathbf{B} wie folgt auf Zustandskets und Observablen repräsentierende Operatoren wirken lassen:

$$|\psi'\rangle = \mathbf{B}|\psi\rangle, \quad \mathbf{O}' = \mathbf{B}\mathbf{O}\mathbf{B}^\dagger, \quad (1.9.1)$$

denn dann gilt

$$\begin{aligned} \langle \phi' | \psi' \rangle &= \langle \mathbf{B}\phi | \mathbf{B}\psi \rangle = \langle \phi | \mathbf{B}^\dagger \mathbf{B}\psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle, \\ \langle \mathbf{O}' \rangle_{\psi'} &= \langle \mathbf{B}\psi | \mathbf{B}\mathbf{O}\mathbf{B}^\dagger | \mathbf{B}\psi \rangle = \langle \psi | \mathbf{O} | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (1.9.2)$$

Es ist auch klar, daß selbstadjungierte Operatoren unter dieser unitären Transformation selbstadjungiert bleiben und Kommutatoren sich kovariant transformieren:

$$[\mathbf{O}'_1, \mathbf{O}'_2] = \mathbf{B}[\mathbf{O}_1, \mathbf{O}_2]\mathbf{B}^\dagger. \quad (1.9.3)$$

Da in all diesen Manipulationen an Zuständen und Observablenoperatoren die Zeit keine Rolle spielt, darf dabei \mathbf{B} offenbar auch zeitabhängig sein. Im vorigen Abschnitt haben wir allerdings angenommen, daß die Operatoren zeitunabhängig und die Zustandskets zeitabhängig sind. Ist nun \mathbf{B} **zeitabhängig**, ist dies für die gemäß (1.9.1) transformierten Objekte nicht mehr notwendig der Fall, während aber die physikalischen Aussagen der Theorie ungeändert bleiben. Wir haben also eine recht große Freiheit, die Zeitabhängigkeit auf Zustandsvektoren und Observablenoperatoren zu verteilen, ohne daß dies den

physikalischen Gehalt dieser Objekte ändert. Man nennt eine konkrete Realisierung dieser Verteilung der Zeitabhängigkeit auf Zustandsvektoren und Observablenoperatoren **Wahl des Bildes der Zeitentwicklung**. Eine zeitabhängige unitäre Transformation (1.9.1) heißt daher auch **Bildtransformation**, da sie von einem Bild der Zeitentwicklung zu einem anderen wechselt.

Im folgenden wollen wir die Dynamik des Systems in einem beliebigen Bild formulieren, so daß wir kein spezielles, z.B. das Schrödingerbild, mehr benötigen. Gleichwohl machen wir vom Schrödingerbild zur Herleitung dieser Gleichungen Gebrauch. Seien also $|\psi\rangle$ und \mathbf{O} Zustandskets und Operatoren im Schrödingerbild und $|\psi'\rangle$ und \mathbf{O}' die gemäß (1.9.1) transformierten Objekte. Dann ergibt sich

$$\frac{d}{dt} |\psi'(t)\rangle = \frac{d\mathbf{B}(t)}{dt} |\psi(t)\rangle - \frac{i}{\hbar} \mathbf{B}(t) \mathbf{H} |\psi(t)\rangle, \quad (1.9.4)$$

wobei wir von (1.8.9) Gebrauch gemacht haben. Setzen wir jetzt auf der rechten Seite die gemäß (1.9.1) transformierten Objekte ein, folgt

$$\frac{d}{dt} |\psi'(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \mathbf{Y}(t) |\psi'(t)\rangle \quad \text{mit} \quad \mathbf{Y}(t) = \mathbf{H}'(t) + i\hbar \frac{d\mathbf{B}(t)}{dt} \mathbf{B}^\dagger(t). \quad (1.9.5)$$

Dabei ist $\mathbf{H}'(t) = \mathbf{B}(t) \mathbf{H} \mathbf{B}^\dagger(t)$ der Hamiltonoperator im neuen Bild. Offensichtlich ist $\mathbf{Y}(t)$ selbstadjungiert. Da nämlich \mathbf{H} selbstadjungiert ist, trifft dies auch auf $\mathbf{H}'(t)$ zu. Bleibt der zweite Term in (1.9.5) zu überprüfen. Da $\mathbf{B}(t)$ unitär ist, gilt

$$\mathbf{B}(t) \mathbf{B}^\dagger(t) = \mathbb{1}. \quad (1.9.6)$$

Leiten wir diese Gleichung nach der Zeit ab, folgt

$$\mathbf{B}(t) \dot{\mathbf{B}}^\dagger(t) + \dot{\mathbf{B}}(t) \mathbf{B}^\dagger(t) = \mathbf{B}(t) \dot{\mathbf{B}}^\dagger(t) + [\mathbf{B}(t) \dot{\mathbf{B}}^\dagger(t)]^\dagger = 0. \quad (1.9.7)$$

Dabei verwenden wir wie in der Mechanik den Punkt, um die Zeitableitung zu bezeichnen. Dann folgt aber

$$[i\hbar \dot{\mathbf{B}}(t) \mathbf{B}^\dagger(t)]^\dagger = -i\hbar \mathbf{B}(t) \dot{\mathbf{B}}^\dagger(t) \stackrel{(1.9.7)}{=} +i\hbar \dot{\mathbf{B}}(t) \mathbf{B}^\dagger(t), \quad (1.9.8)$$

d.h. auch der zweite Term in der Definitionsgleichung von $\mathbf{Y}(t)$ (1.9.5) ist selbstadjungiert, d.h. es gilt tatsächlich

$$\mathbf{Y}^\dagger(t) = \mathbf{Y}(t). \quad (1.9.9)$$

Für die Observablen folgt durch eine einfache Rechnung die Bewegungsgleichung

$$\frac{d\mathbf{O}'}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{O}', \mathbf{X}(t)] + \partial_t^{\text{expl}} \mathbf{O}' \quad \text{mit} \quad \mathbf{X}(t) = \mathbf{H}'(t) - \mathbf{Y}(t). \quad (1.9.10)$$

Dabei definieren wir

$$\partial_t^{\text{expl}} \mathbf{O}' = \mathbf{B}(t) (\partial_t \mathbf{O}) \mathbf{B}^\dagger(t), \quad (1.9.11)$$

wobei die Zeitabhängigkeit des Operators \mathbf{O} im Schrödingerbild rein explizit ist. Die fundamentalen Operatoren \mathbf{x} und \mathbf{p} , aus denen sich jeder Operator $\mathbf{O} = \mathbf{O}(\mathbf{x}, \mathbf{p}; t)$ aufbauen läßt, sind im Schrödingerbild definitionsgemäß zeitunabhängig.

Die physikalisch relevanten dynamischen Aussagen der Quantentheorie hängen auch im neuen Bild nur von $\mathbf{H}'(t)$ ab, während das Bild durch die willkürliche Festlegung eines der selbstadjungierten Operatoren $\mathbf{X}(t)$ oder $\mathbf{Y}(t)$ definiert werden kann. Diese beiden Operatoren sind durch $\mathbf{X}(t) + \mathbf{Y}(t) =$

$\mathbf{H}'(t)$ miteinander verknüpft, d.h. hat man einen der beiden Operatoren willkürlich gewählt, ist der andere ebenfalls gewählt.

Man kann in der Tat leicht zeigen, daß die Annahme der Bewegungsgleichungen (1.9.5) und (1.9.10) auf eine bildunabhängige Dynamik der relevanten Größen führt. So gilt

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{O}' \rangle_{\psi'} = \left\langle \frac{d}{dt} \psi' \left| \mathbf{O}' \right| \psi' \right\rangle + \left\langle \psi' \left| \frac{d\mathbf{O}'}{dt} \right| \psi' \right\rangle + \left\langle \psi' \left| \mathbf{O}' \right| \frac{d}{dt} \psi' \right\rangle. \quad (1.9.12)$$

Setzen wir nun (1.9.5) und (1.9.10) in diese Gleichungen ein, finden wir die bildunabhängige Gleichung

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{O}' \rangle_{\psi'} = \left\langle \dot{\mathbf{O}}' \right\rangle_{\psi'} \quad \text{mit} \quad \dot{\mathbf{O}}' := \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{O}', \mathbf{H}'] + \partial_t^{\text{expl.}} \mathbf{O}'. \quad (1.9.13)$$

Dies ist das **Ehrenfestsche Theorem** in bildunabhängiger Schreibweise. Dabei ist zu beachten, daß der Ring über einem Operator i.a. nicht die mathematische Zeitableitung desselben bedeutet, sondern durch die Kommutatorrelation ergänzt durch die Ableitung aufgrund der expliziten Zeitabhängigkeit definiert ist. Dies ist die sog. **physikalische Zeitableitung** der Quantentheorie, die man als **unter Bildtransformationen kovariante Zeitableitung** betrachten kann. Damit haben wir auch Postulat 4 erklärt. Die Postulate sind damit sowohl **unabhängig von einer konkreten Darstellung**, also der Wahl eines bestimmten vollständigen Satzes kompatibler Observabler zur vollständigen Festlegung des Systemzustandes, als auch **unabhängig von der Wahl des Bildes der Zeitentwicklung**, also der Wahl der Verteilung der Zeitabhängigkeit auf Zustandsvektoren und Observablenoperatoren.

1.10 Das Heisenbergbild

Als eine Anwendung der bild- und darstellungsunabhängigen Formulierung der quantentheoretischen Dynamik betrachten wir die Herleitung der dynamischen Gleichungen im Heisenbergbild. Dieses Bild ist in gewissem Sinne das genaue Gegenstück zum Schrödingerbild. Die volle Zeitabhängigkeit wird dabei auf die Observablenoperatoren gewälzt. Das bedeutet, daß wir gemäß (1.9.5) und (1.9.10)

$$\mathbf{X}_H = \mathbf{H} \quad \text{und} \quad \mathbf{Y}_H = 0 \quad (1.10.1)$$

zu setzen haben. Explizit heißt das, daß die kovariante Zeitableitung identisch ist mit der totalen Zeitableitung und die Zustandsvektoren überhaupt nicht zeitabhängig sind.

Zeitentwicklung in der Energieeigenbasis

In diesem Bild läßt sich auch sehr einfach der bildunabhängige Zeitentwicklungsoperator für die Wellenfunktion in der Ortsdarstellung, also der **Propagator der Schrödingergleichung** bei gegebenem Hamiltonoperator, gewinnen. Es gilt wie in jedem Bild

$$\psi(t, \vec{x}) = \langle \vec{x}, t | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' \langle \vec{x}, t | \vec{x}', t_0 \rangle \psi(t_0, \vec{x}'). \quad (1.10.2)$$

Dabei bedeutet $|\vec{x}, t\rangle$ zu jeder Zeit t den verallgemeinerten simultanen Eigenzustand der drei Ortskomponentenoperatoren zum Spektralwert $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$, d.h. es gilt für alle $t > t_0$

$$\vec{\mathbf{x}}(t) |\vec{x}, t\rangle = \vec{x} |\vec{x}, t\rangle. \quad (1.10.3)$$

Falls der Hamiltonoperator nicht explizit zeitabhängig ist, gilt für den Ortsoperator

$$\vec{x}(t) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\mathbf{H}\right]\vec{x}(t_0)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\mathbf{H}\right]. \quad (1.10.4)$$

Durch Ableitung nach der Zeit (*Übung!*) sieht man nämlich sofort, daß dann in der Tat die Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt}\mathbf{x}(t) = \frac{1}{i\hbar}[\mathbf{x}(t), \mathbf{H}], \quad (1.10.5)$$

wie es gemäß (1.9.10) im Heisenbergbild, das durch (1.10.1) definiert ist, sein muß. Aus (1.10.4) folgt sofort, daß die Zeitentwicklung der Ortseigenvektoren durch

$$|\vec{x}, t\rangle = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\mathbf{H}\right]|\vec{x}, t_0\rangle \quad (1.10.6)$$

gegeben ist.

Folglich ist

$$U(t, \vec{x}; t_0, \vec{x}') = \langle \vec{x}, t | \vec{x}', t_0 \rangle = \left\langle \vec{x}, t_0 \left| \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\mathbf{H}\right] \right| \vec{x}', t_0 \right\rangle \quad (1.10.7)$$

und

$$U(t_0, \vec{x}; t_0, \vec{x}') = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}'). \quad (1.10.8)$$

Leiten wir (1.10.7) nach der Zeit ab (*Übung!*), folgt sofort, daß für den Propagator die **zeitabhängige Schrödingergleichung**

$$i\hbar\partial_t U(t, \vec{x}; t_0, \vec{x}') = \hat{H}U(t, \vec{x}; t_0, \vec{x}') \quad (1.10.9)$$

gilt. Dabei ist \hat{H} der Hamilton-Operator in der Ortsdarstellung bzgl. \vec{x} . Gemäß (1.10.2) ist die Zeitentwicklung der Wellenfunktion dann durch

$$\psi(t, \vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' U(t, \vec{x}; t_0, \vec{x}')\psi(t_0, \vec{x}') \quad (1.10.10)$$

gegeben. Wegen (1.10.9) erfüllt diese Wellenfunktion in der Tat die zeitabhängige Schrödingergleichung und wegen (1.10.8) auch die Anfangsbedingung.

Adjunktion von (1.10.7) liefert unter Berücksichtigung der Selbstadjungiertheit des Hamiltonoperators

$$U^*(t, \vec{x}; t_0, \vec{x}') = \left\langle \vec{x}', t_0 \left| \exp\left[\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\mathbf{H}\right] \right| \vec{x}, t_0 \right\rangle = U(t_0, \vec{x}'; t, \vec{x}). \quad (1.10.11)$$

Wir wollen zur Illustration den Propagator des **freien Teilchens** mit dieser Methode berechnen. Definitionsgemäß ist der Hamiltonoperator des freien Teilchens

$$\mathbf{H} = \frac{\vec{\mathbf{p}}^2}{2m}. \quad (1.10.12)$$

Nach (1.9.10) und (1.10.1) folgt zunächst

$$\frac{d\vec{\mathbf{p}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\vec{\mathbf{p}}, \mathbf{H}] = 0, \quad \frac{d\vec{\mathbf{x}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\vec{\mathbf{x}}, \mathbf{H}] = \frac{1}{m}\vec{\mathbf{p}}. \quad (1.10.13)$$

Die Lösung ist in diesem Fall sehr einfach:

$$\vec{\mathbf{p}}(t) = \vec{\mathbf{p}}(t_0) = \vec{\mathbf{p}}_0, \quad \vec{\mathbf{x}}(t) = \vec{\mathbf{x}}_0 + \frac{(t-t_0)}{m} \vec{\mathbf{p}}_0. \quad (1.10.14)$$

Multiplizieren wir die Eigenwertgleichung

$$\vec{\mathbf{x}}(t) |\vec{\mathbf{x}}, t\rangle = \vec{\mathbf{x}} |\vec{\mathbf{x}}, t\rangle \quad (1.10.15)$$

mit $\langle \vec{\mathbf{x}}_0, t_0 |$ und wenden die Lösung (1.10.14) der Heisenbergschen Operatorbewegungsgleichungen sowie die Hermitizität der Operatoren $\vec{\mathbf{x}}_0$ und $\vec{\mathbf{p}}_0$ an, finden wir die Bestimmungsgleichung

$$\left[\frac{\hbar(t-t_0)}{im} \partial_{\vec{\mathbf{x}}} + \vec{\mathbf{x}}_0 \right] \langle \vec{\mathbf{x}}_0, t_0 | \vec{\mathbf{x}}, t \rangle = \vec{\mathbf{x}} \langle \vec{\mathbf{x}}_0, t_0 | \vec{\mathbf{x}}, t \rangle, \quad (1.10.16)$$

wobei wir (1.3.4) benutzt haben. Eine Lösung dieser Gleichung lautet

$$\langle \vec{\mathbf{x}}_0, t_0 | \vec{\mathbf{x}}, t \rangle = U^*(t, \vec{\mathbf{x}}; t_0, \vec{\mathbf{x}}_0) = N^*(t-t_0) \exp \left[-\frac{im}{2(t-t_0)\hbar} (\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_0)^2 \right]. \quad (1.10.17)$$

Nehmen wir an, daß

$$N^*(t-t_0) = N(t_0-t) \quad (1.10.18)$$

ist, gilt dann nämlich offenbar (1.10.11). Zur Bestimmung von $N(t)$ verwenden wir die Schrödinger-Gleichung (1.10.9), was

$$\dot{N}(t) = -\frac{3}{2(t-t_0)} N(t) \Rightarrow N(t) = \frac{N_0}{(t-t_0)^{3/2}} \quad (1.10.19)$$

liefert.

Die noch unbestimmte Normierungskonstante N_0 bestimmt sich aus der Anfangsbedingung

$$\langle \vec{\mathbf{x}}_0, t_0 | \vec{\mathbf{x}}, t_0 \rangle = \delta^{(3)}(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_0). \quad (1.10.20)$$

Es ist klar, daß (1.10.17) zu jedem Zeitpunkt als Distribution aufzufassen ist, denn es handelt sich mit Sicherheit nicht um eine quadratintegrale Funktion. Um N_0 zu bestimmen, können wir daher auch nicht einfach $t = t_0$ setzen, und in der Tat wird (1.10.17) dann singular. Es genügt allerdings, (1.10.17) auf eine beliebige **Testfunktion** anzuwenden. Dazu bietet sich hier eine **Gaußfunktion** an, denn dann können wir die benötigten Integrale geschlossen auswerten. Wählen wir also

$$\psi_0(\vec{\mathbf{x}}) = A \exp \left(-\frac{\vec{\mathbf{x}}^2}{4\sigma^2} \right). \quad (1.10.21)$$

Dann folgt

$$\begin{aligned} \psi(t, \vec{\mathbf{x}}) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x_0 U(t, \vec{\mathbf{x}}; t_0, \vec{\mathbf{x}}_0) \psi_0(x_0) \\ &= AN(t) \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x_0 \exp \left[\frac{im}{2(t-t_0)\hbar} (\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_0)^2 - \frac{\vec{\mathbf{x}}_0^2}{4\sigma^2} \right]. \end{aligned} \quad (1.10.22)$$

Dieses Integral läßt sich geschlossen auswerten (vgl. Anhang A):

$$\psi(t, \vec{x}) = AN_0 \left[\frac{4\pi\sigma^2 \hbar}{\hbar(t-t_0) - 2im\sigma^2} \right]^{3/2} \exp\left(-\frac{m\vec{x}^2}{4m\sigma^2 + 2i\hbar(t-t_0)} \right). \quad (1.10.23)$$

Damit dies für $t \rightarrow t_0$ mit der Anfangsbedingung (1.10.21) kompatibel ist, muß offenbar

$$N_0 = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar} \right)^{3/2} \quad (1.10.24)$$

sein. Demnach erfüllt $N(t)$ gemäß (1.10.19) offenbar tatsächlich unsere obige Annahme (1.10.18) Der Propagator für das freie Teilchen ist damit also durch

$$U(t, \vec{x}; t_0, \vec{x}_0) = \left[\frac{m}{2\pi i \hbar(t-t_0)} \right]^{3/2} \exp\left[\frac{im}{2(t-t_0)\hbar} (\vec{x} - \vec{x}_0)^2 \right] \quad (1.10.25)$$

gegeben.

1.11 Der Propagator als Green-Funktion der Schrödingergleichung

Wir diskutieren noch ein Weilchen über Propagatoren bzw. Greensche Funktionen der Schrödingergleichung. Der Propagator für ein quantenmechanisches System wird besonders einfach, wenn man nicht wie oben die Ortsdarstellung sondern die **Energieeigenzustände** als Basissystem wählt. Wir schreiben die Zeitentwicklung wieder im **Heisenbergbild** und leiten zunächst die Zeitentwicklungsgleichung der Eigenzustände von nicht explizit zeitabhängigen Operatoren her. Sei also $\mathbf{A}(t)$ der selbstadjungierte Operator einer Observablen A im Heisenbergbild. Dann gilt wegen (1.9.10) und (1.10.1)

$$\frac{d}{dt} \mathbf{A}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{A}(t), \mathbf{H}]. \quad (1.11.1)$$

Wir gehen auch von einem nicht explizit zeitabhängigen Hamiltonoperator aus. Setzen wir in (1.11.1) $\mathbf{A} = \mathbf{H}$ ein, sehen wir, daß der Hamiltonoperator dann zeitlich konstant ist, so daß wir das Zeitargument für diesen gleich weggelassen haben. Dann können wir aber die Lösung der Differentialgleichung (1.11.1) sofort angeben:

$$\mathbf{A}(t) = \exp\left[\frac{i\hbar(t-t_0)\mathbf{H}}{\hbar} \right] \mathbf{A}(t_0) \exp\left[-\frac{i\hbar(t-t_0)\mathbf{H}}{\hbar} \right]. \quad (1.11.2)$$

Setzen wir

$$\mathbf{B}(t, t_0) = \exp\left[\frac{i\hbar(t-t_0)\mathbf{H}}{\hbar} \right], \quad (1.11.3)$$

so ist offenbar $\mathbf{B}(t, t_0)$ unitär, und wir können für (1.11.2) auch

$$\mathbf{A}(t) = \mathbf{B}(t, t_0) \mathbf{A}(t_0) \mathbf{B}^\dagger(t, t_0) \quad (1.11.4)$$

schreiben, was mit (1.9.1) übereinstimmt, wenn wir annehmen, daß zur Zeit t_0 im Schrödinger- und Heisenbergbild dieselben Operatoren verwendet werden, was wir stets tun dürfen. Dabei bezeichnet t_0 wieder den Anfangszeitpunkt, zu dem wir uns das System in irgendeinem Zustand $|\psi\rangle$ präpariert

denken. Im Heisenbergbild sind die $|\psi\rangle$ definitionsgemäß zeitlich konstant. Die Eigenzustände von $\mathbf{A}(t)$ sind hingegen wegen (1.11.2) zeitabhängig. Aus

$$\mathbf{A}(t)|a, t\rangle = a|a, t\rangle \quad (1.11.5)$$

folgt durch Einsetzen von (1.11.2)

$$\mathbf{B}(t, t_0)\mathbf{A}(t_0)\mathbf{B}^\dagger(t, t_0)|a, t_0\rangle = a|a, t\rangle. \quad (1.11.6)$$

Multiplizieren wir diese Gleichung von links mit \mathbf{B}^\dagger , folgt

$$\mathbf{A}(t_0)\mathbf{B}^\dagger(t, t_0)|a, t\rangle = a\mathbf{B}^\dagger(t, t_0)|a, t\rangle \quad (1.11.7)$$

Daraus folgt, daß $\mathbf{B}^\dagger(t, t_0)|a, t\rangle$ Eigenvektor von $\mathbf{A}(t_0)$ zum Eigenwert a ist. Damit ist also

$$\mathbf{B}^\dagger(t, t_0)|a, t\rangle = |a, t_0\rangle \Rightarrow |a, t\rangle = \mathbf{B}(t, t_0)|a, t_0\rangle. \quad (1.11.8)$$

Ist dann $|\alpha; t\rangle$ ein VONS von irgendwelchen Energieeigenvektoren (wobei α wieder die Eigenwerte irgendwelcher drei voneinander unabhängiger mit \mathbf{H} kompatibler Observabler bezeichnet), so können wir die Zeitentwicklung der Wellenfunktion in der Energiedarstellung sofort angeben⁶:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(t, \alpha) &= \langle \alpha, t | \psi \rangle = \langle \mathbf{B}(t, t_0)\alpha, t_0 | \psi \rangle = \left\langle \exp\left[\frac{i\mathbf{H}(t-t_0)}{\hbar}\right] \alpha, t_0 | \psi \right\rangle \\ &= \left\langle \exp\left[\frac{iE(\alpha)(t-t_0)}{\hbar}\right] \alpha, t_0 | \psi \right\rangle = \exp\left[-\frac{iE(\alpha)(t-t_0)}{\hbar}\right] \langle \alpha, t_0 | \psi \rangle \\ &= \exp\left[-\frac{iE(\alpha)(t-t_0)}{\hbar}\right] \tilde{\psi}(t_0, \alpha). \end{aligned} \quad (1.11.9)$$

Damit können wir aber auch die Zeitentwicklung in jeder anderen Basis nach den entsprechenden Energieeigenfunktionen bzgl. dieser Basis ausdrücken, z.B. in der Ortsdarstellung

$$\begin{aligned} \psi(t, \vec{x}) &= \langle \vec{x}, t | \psi \rangle = \int d\alpha \langle \vec{x}, t | \alpha, t \rangle \langle \alpha; t | \psi \rangle \\ &= \int d\alpha u_\alpha(\vec{x}) \exp\left[-\frac{iE(\alpha)(t-t_0)}{\hbar}\right] \tilde{\psi}(t_0, \alpha). \end{aligned} \quad (1.11.10)$$

Dabei sind die Energieeigenfunktionen in der Ortsdarstellung **zeitunabhängig**, denn es gilt wegen der Unitarität des Zeitentwicklungsoperators (1.11.3)

$$\begin{aligned} u_\alpha(\vec{x}) &= \langle \vec{x}, t | \alpha; t \rangle = \langle \mathbf{B}(t, t_0)\vec{x}, t_0 | \mathbf{B}(t, t_0)\alpha, t_0 \rangle \\ &= \langle \vec{x}, t_0 | \mathbf{B}^\dagger(t, t_0)\mathbf{B}(t, t_0)\alpha, t_0 \rangle = \langle \vec{x}, t_0 | \alpha, t_0 \rangle. \end{aligned} \quad (1.11.11)$$

Wie wir oben gesehen haben, können wir die $u_\alpha(\vec{x})$ über die **zeitunabhängige Schrödingergleichung** berechnen. Dies folgt im jetzigen Kontext sehr einfach aus

$$\hat{H}u_{E\alpha}(\vec{x}) := \langle \vec{x}, t | \mathbf{H}E, \alpha; t \rangle = E \langle \vec{x}, t | E, \alpha; t \rangle = Eu_{E\alpha}(\vec{x}). \quad (1.11.12)$$

⁶Für das freie Teilchen können wir z.B. für α die drei Komponenten des Impulses wählen, die miteinander und mit \mathbf{H} vertauschen. Für ein Teilchen in einem radialsymmetrischen Potential können wir für α den Energieeigenwert E selbst sowie l und m , also die Bahndrehimpulsbetragsquantenzahl (Eigenwert $\hbar l(l+1)$ von \mathbf{L}^2) und die „Magnetquantenzahl“ entsprechend dem Eigenwert $m\hbar$ von \mathbf{L}_z , verwenden.

Wir wollen noch eine wichtige Darstellung des Propagators mittels dieser Energieeigenzustände herleiten. Dazu müssen wir nur $\psi(t_0, \alpha)$ durch die Wellenfunktion in der Ortsdarstellung ausdrücken:

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}(t_0, \alpha) &= \langle \alpha, t_0 | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' \langle \alpha, t_0 | \vec{x}'; t_0 \rangle \langle \vec{x}'; t_0 | \psi \rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' u_{E, \alpha}^*(\vec{x}') \psi(t_0, \vec{x}').\end{aligned}\quad (1.11.13)$$

Dies in (1.11.10) eingesetzt liefert

$$\psi(t, \vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x' \sum_{\alpha} u_{\alpha}^*(\vec{x}') u_{\alpha}(\vec{x}) \exp\left[-\frac{iE(t-t_0)}{\hbar}\right] \psi(t_0, \vec{x}'). \quad (1.11.14)$$

Der Vergleich mit der Definition des Propagators (1.10.10) liefert die gewünschte Darstellung mittels Energieeigenzuständen:

$$U(t, \vec{x}; t', \vec{x}') = \sum_{\alpha} u_{\alpha}^*(\vec{x}') u_{\alpha}(\vec{x}) \exp\left[-\frac{iE(t-t_0)}{\hbar}\right]. \quad (1.11.15)$$

Dem Leser sei zur *Übung* empfohlen, sich davon zu überzeugen, daß dieselben Resultate auch aus dem **Schrödingerbild** bzw. überhaupt einem **beliebigen Bild der Zeitentwicklung** folgen. Im letzteren Fall werden die Rechnungen allerdings ein wenig komplizierter, da dann sowohl die Zustandsvektoren als auch die Eigenvektoren von Observablen zeitabhängig werden.

Als **Beispiel** betrachten wir wieder das freie Teilchen und legen das **Heisenbergbild** zugrunde. Hier haben wir gleich mehrere Möglichkeiten der Wahl für einen vollständigen Satz kompatibler Observabler für die Energieeigenzustände; z.B. können wir die drei Impulskomponenten \vec{p} oder E, \vec{L}^2, L_z als den vollständigen Satz kompatibler Observabler, die auch mit E kompatibel sind, wählen⁷.

Hier verwenden wir die **drei Impulskomponenten** \vec{p} als vollständigen Satz kompatibler Erhaltungsgrößen. Wegen

$$\mathbf{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (1.11.16)$$

sind diese mit \mathbf{H} verträglich und folglich zugleich **Energieeigenzustände**

$$\mathbf{H} |\vec{p}, t\rangle = \frac{\vec{p}^2}{2m} |\vec{p}, t\rangle = E(\vec{p}) |\vec{p}, t\rangle, \quad (1.11.17)$$

wobei wir die **Dispersionsrelation für das freie Schrödinger-Teilchen**

$$E(\vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (1.11.18)$$

eingeführt haben. Die Energieeigenfunktionen sind dann freilich einfach die ins Dreidimensionale verallgemeinerten Impulseigenfunktionen (1.3.11)

$$\langle \vec{x}, t | \vec{p}, t \rangle = u_{\vec{p}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{i\vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar}\right). \quad (1.11.19)$$

⁷Es ist klar, daß es sich dabei im hier betrachteten Fall eines nicht explizit von der Zeit abhängigen Hamiltonoperators \mathbf{H} um zueinander kompatible **Erhaltungsgrößen** des Systems handeln muß. Diese kommutieren dann aufgrund der Bewegungsgleichung (1.9.10) im Heisenbergbild, wo definitionsgemäß $\mathbf{X} = \mathbf{H}$ (c.f. Gl. (1.10.1)) gilt, mit \mathbf{H} .

Die Zeitentwicklung (1.11.10) nimmt demnach die Form

$$\psi(t, \vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p}{(2\pi \hbar)^{3/2}} \tilde{\psi}(t_0, \vec{p}) \exp \left[-i \frac{E(\vec{p})(t - t_0) - \vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar} \right] \quad (1.11.20)$$

an. Gibt man den Anfangszustand in der Ortsdarstellung an, findet man die in (1.11.20) benötigte Wellenfunktion in der Impulsdarstellung durch die entsprechende Fourier-Transformation:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(t_0, \vec{p}) &= \langle \vec{p}, t_0 | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x \langle \vec{p}, t_0 | \vec{x}, t_0 \rangle \langle \vec{x}, t_0 | \psi \rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 x}{(2\pi \hbar)^{3/2}} \exp \left(-\frac{i \vec{p} \cdot \vec{x}}{\hbar} \right) \psi(t_0, \vec{x}). \end{aligned} \quad (1.11.21)$$

1.12 Die Green-Funktion für ein freies Schrödingerteilchen

Wir können den Propagator des freien Teilchens auch noch in einer anderen für die Vielteilchenphysik im nächsten Kapitel äußerst wichtigen Form schreiben. Dazu gehen wir von der **zeitabhängigen Schrödingergleichung** des freien Teilchens in der Ortsdarstellung aus, die wir in der Form

$$\left(i \hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2 \Delta^2}{2m} \right) \psi(t, \vec{x}) = 0 \quad (1.12.1)$$

schreiben. Diese Gleichung ist unter Vorgabe der Anfangsbedingung

$$\psi(t_0, \vec{x}) = \psi_0(\vec{x}) \quad (1.12.2)$$

zu lösen. Die physikalische Situation, die wir hier beschreiben, ist wieder, daß wir uns das Teilchen durch Festlegung der Werte eines vollständigen Satzes kompatibler Observabler in diesem Anfangszustand $|\psi_0\rangle$ präpariert denken. Physikalisch ist es also irrelevant, wie die Wellenfunktion $\psi(t, \vec{x})$ für Zeiten $t < t_0$ aussieht. Wir machen nun den folgenden Ansatz, der sich gleich noch als nützlich erweisen wird

$$\psi(t, \vec{x}) = \Theta(t - t_0) \psi'(t, \vec{x}), \quad (1.12.3)$$

wobei die **Heavisidesche Einheitssprungfunktion** durch

$$\Theta(t - t_0) = \begin{cases} 0 & \text{für } t < t_0, \\ 1 & \text{für } t > t_0 \end{cases} \quad (1.12.4)$$

definiert ist. Wir benötigen noch die wichtige Formel

$$\frac{\partial}{\partial t} \Theta(t - t_0) = \delta(t - t_0). \quad (1.12.5)$$

Diese ist selbstverständlich im Distributionensinne zu verstehen. Um sie zu beweisen, müssen wir also $\partial_t \Theta(t - t_0)$ auf eine Testfunktion $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ anwenden. Es gilt definitionsgemäß

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} dt f(t) \frac{\partial}{\partial t} \Theta(t - t_0) &= - \int_{\mathbb{R}} dt \Theta(t - t_0) \frac{d}{dt} f(t) \\ &= - \int_{t_0}^{\infty} \frac{d}{dt} f(t) = - f(t) \Big|_{t_0}^{\infty} \\ &= + f(t_0) = \int_{\mathbb{R}^3} dt f(t) \delta(t - t_0). \end{aligned} \quad (1.12.6)$$

Da dies für beliebige Testfunktionen f gilt, muß folglich auch (1.12.5) gelten, denn Distributionen sind eindeutig durch ihre Wirkung auf Testfunktionen definiert.

Setzen wir also (1.12.3) in (1.12.1) ein und verwenden bei der Zeitableitung (1.12.5), erhalten wir

$$\begin{aligned} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2 \Delta^2}{2m} \right) \Theta(t-t') \psi'(t, \vec{x}) &= i\hbar \delta(t-t_0) \psi'(t, \vec{x}) \\ &+ \Theta(t-t_0) \underbrace{\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2 \Delta^2}{2m} \right) \psi'(t, \vec{x})}_{=0} \\ &= i\hbar \delta(t-t_0) \psi_0(\vec{x}). \end{aligned} \quad (1.12.7)$$

Andererseits können wir $\psi(t, \vec{x})$ gemäß (1.10.10) mit Hilfe des Propagators ausdrücken:

$$\begin{aligned} \psi(t, \vec{x}) &= \Theta(t-t_0) \psi'(t, \vec{x}) = \Theta(t-t_0) \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' U(t, \vec{x}; t_0, \vec{x}') \psi_0(\vec{x}') \\ &=: \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' i\hbar G(t, \vec{x}; t_0, \vec{x}') \psi_0(\vec{x}'). \end{aligned} \quad (1.12.8)$$

Setzen wir dies in (1.12.7) ein, erhalten wir unter Beachtung, daß offenbar für ψ' die Anfangsbedingung

$$\psi_0(\vec{x}) = \psi(t_0 + 0^+, \vec{x}) = \Theta(0^+) \psi'(t_0, \vec{x}) = \psi'(t_0, \vec{x}) \quad (1.12.9)$$

gilt,

$$i\hbar \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2 \Delta_{\vec{x}}^2}{2m} \right) G(t, \vec{x}; t_0, \vec{x}') \psi_0(\vec{x}') = i\hbar \delta(t-t') \psi_0(\vec{x}). \quad (1.12.10)$$

Da dies für alle möglichen Anfangsbedingungen $\psi_0(\vec{x}')$ gilt, ist also notwendig (wenn wir zur Vereinheitlichung der Schreibweise $t' = t_0$ setzen)

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2 \Delta_{\vec{x}}^2}{2m} \right) G(t, \vec{x}; t_0, \vec{x}') = \delta(t-t_0) \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \quad (1.12.11)$$

Folglich ist $G(t, \vec{x}; t_0, \vec{x}')$ eine **Greensche Funktion des Schrödingeroperators**

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2 \Delta_{\vec{x}}^2}{2m}. \quad (1.12.12)$$

Die Gleichung (1.12.11) ist wegen (1.12.8) mit der Nebenbedingung

$$G(t, \vec{x}; t', \vec{x}') = 0 \quad \text{für } t < t' \quad (1.12.13)$$

zu lösen.

Dazu stellen wir G durch ihre **Fouriertransformierte bzgl. der Zeit und des Ortes** dar und berücksichtigen, daß offenbar G eine Funktion von $t - t'$ und $\vec{x} - \vec{x}'$ sein muß:

$$G(t, \vec{x}; t', \vec{x}') = \int_{\mathbb{R}^4} \frac{d^4p}{(2\pi\hbar)^4} \exp \left[-i \frac{p_0(t-t') - \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')}{\hbar} \right] \tilde{G}(p_0, \vec{p}). \quad (1.12.14)$$

Setzen wir dies auf der linken Seite von (1.12.11) ein und schreiben die δ -Distribution auf der rechten Seite ebenfalls als Fourierintegral,

$$\delta(t-t')\delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}') = \int_{\mathbb{R}^4} \frac{d^4 p}{(2\pi\hbar)^4} \exp\left[-i\frac{p_0(t-t')-\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}{\hbar}\right], \quad (1.12.15)$$

erhalten wir durch Vergleich der Fourierintegrale

$$\tilde{G}(p_0, \vec{p}) = \frac{1}{p_0 - E(\vec{p})} \quad \text{mit} \quad E(\vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m}. \quad (1.12.16)$$

Hierbei tritt nun bei der Transformation (1.12.14) in den t, \vec{r} -Bereich das charakteristische Problem des Pols bei $p_0 = E(\vec{p})$ auf. Dies läßt sich dadurch beheben, daß man den reellen Integrationsbereich für p_0 ein wenig in die komplexe p_0 -Ebene deformiert. Dabei ist darauf zu achten, daß die **Randbedingung** (1.12.13) erfüllt wird. Aufgrund der Exponentialfunktion in (1.12.14) können wir den **Residuensatz** anwenden, indem wir den Integrationsweg durch einen sehr großen Halbkreis im Unendlichen schließen, und zwar in der oberen (unteren) Halbebene für $t < t'$ ($t > t'$). Wir müssen mit unserem Integrationsweg den Pol also so umlaufen, daß dieser beim Schließen in der oberen Halbebene für $t < t'$ nicht in dem vom Integrationsweg umschlossenen Gebiet liegt (vgl. Abb. 1.1), denn dann verschwindet das Integral wegen des Cauchyschen Integralsatzes, wie von der Randbedingung (1.12.13) gefordert. Alternativ können wir auch einen kleinen positiven Imaginärteil zum Nenner addieren und diesen nach der p_0 -Integration gegen 0 gehen lassen. Das schreiben wir im Sinne von Distributionen in der Form

$$\tilde{G}_{\text{ret}}(p_0, \vec{p}) = \frac{1}{p_0 - E(\vec{p}) + i0^+}. \quad (1.12.17)$$

Dann liegt der Pol $p_0^{(\text{Pol})} = E(\vec{p}) - i0^+$ nämlich in der unteren Halbebene und dies hat denselben Effekt wie die Deformation des Integrationsweges gemäß Abb. 1.1, wenn wir wieder den ursprünglichen reellen Integrationsweg wählen und diesen in der oberen bzw. unteren Halbebene durch einen unendlich großen Halbkreis schließen. Wir haben jetzt diese Greensche Funktion genauer mit \tilde{G}_{ret} bezeichnet, denn es handelt sich wegen der Randbedingung (1.12.13) offensichtlich um die **retardierte Greensche Funktion der Schrödingergleichung für ein freies Teilchen**.

Führen wir nun in (1.12.14) nur die p_0 -Integration mit (1.12.17) für \tilde{G} aus, erhalten wir die Darstellung der retardierten Greenschen Funktion als Funktion der Zeiten t, t' und \vec{p} , die sog. **Mills-Darstellung**:

$$G'_{\text{ret}}(t, t'; \vec{p}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{(2\pi\hbar)} \frac{1}{p_0 - E(\vec{p}) + i0^+} \exp\left[-i\frac{p_0(t-t')}{\hbar}\right]. \quad (1.12.18)$$

Wir können dieses Integral mit Hilfe des Residuensatzes auswerten, indem wir die Integrationswege wie in Abb. 1.1 (rechts) eingezeichnet schließen. Dann folgt

$$G'_{\text{ret}}(t, t'; \vec{p}) = \frac{\Theta(t-t')}{i\hbar} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}E(\vec{p})(t-t')\right]. \quad (1.12.19)$$

1.13 Die Zeitentwicklung in einem beliebigen Bild (Dirac-Bild)

Wir wenden uns nun der Formulierung der Bewegungsgleichungen für die Zustandsvektoren und Observablenoperatoren in einem beliebigen Bild der Zeitentwicklung zu. Stellen wir die Bewegungsgleichungen nochmals übersichtlich zusammen, ohne vom Schrödinger-Bild auszugehen (wie in Abschnitt 1.9). Die physikalische Zeitentwicklung ist durch den **Hamiltonoperator** des Systems gegeben,

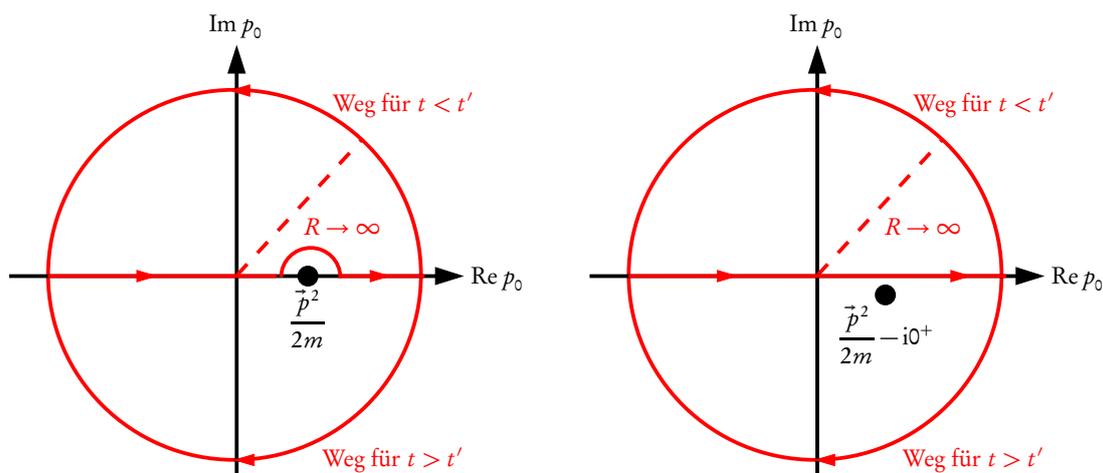


Abbildung 1.1: Links: Integrationskontur für das Integral (1.12.14) für den **retardierten Propagator**. Rechts: Alternative Formulierung durch Verschieben des Pols in die untere Halbebene (cf. (1.12.17) und Beibehaltung des ursprünglichen reellen Integrationsweges.

und dieser repräsentiert die Energie. Wie wir in Abschnitt 1.9 gesehen haben, erlaubt es uns die Freiheit, alle Operatoren und Zustände einer zeitabhängigen unitären Transformation der Form (1.9.1) zu unterziehen, eine in weiten Grenzen willkürliche Verteilung der mathematischen Zeitabhängigkeit auf Zustände und Operatoren. Unabhängig von der Wahl des Bildes ergeben sich stets dieselben Aussagen über (zumindest prinzipiell) beobachtbare Größen wie Wahrscheinlichkeiten für die Werte irgendeiner Observablen oder Erwartungswerte von Observablen etc.

Wir betrachten nun ein allgemeines Bild. Dieses muß nicht, wie in Abschnitt 1.9 durch die Bildtransformation vom Schrödinger- in das andere Bild hergeleitet werden, sondern kann direkt durch die Wahl der Operatoren $\mathbf{X}(t)$ und $\mathbf{Y}(t)$ in den Gln. (1.9.5) und (1.9.10) charakterisiert werden. Wir müssen also Gleichungen finden, die unabhängig von der Bildtransformation $\mathbf{B}(t)$ sind. Dazu bedienen wir uns der **Bewegungsgleichungen für die Zustände und Operatoren** (1.9.5) und (1.9.10). Wir lassen im folgenden den Strich an den Operatoren in dem beliebigen Bild weg. Es ist freilich unbedingt darauf zu achten, daß *alle* Zustandsvektoren und Observablenoperatoren in einem bestimmten Bild der Zeitentwicklung zu verwenden sind!

Die Wahl des Bildes der Zeitentwicklung wird also bestimmt durch die Wahl der **selbstadjungierten Operatoren**

$$\mathbf{X}(t) \quad \text{und} \quad \mathbf{Y}(t) = \mathbf{H} - \mathbf{X}(t). \quad (1.13.1)$$

Die **Bewegungsgleichungen für Zustandsvektoren und Observablenoperatoren** lauten dann gemäß (1.9.5) und (1.9.10)

$$\frac{d}{dt} \mathbf{O}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{O}(t), \mathbf{X}(t)] \quad (1.13.2)$$

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \mathbf{Y}(t) |\psi(t)\rangle. \quad (1.13.3)$$

Hierbei betrachten wir nur Observablenoperatoren, die *nicht explizit zeitabhängig* sind. Wir denken uns die Operatoren und Zustände zu einem beliebigen **Anfangszeitpunkt** $t_0 = 0$ vorgegeben und wollen die Gleichungen (1.13.2) und (1.13.3) lösen. Da quantenmechanische Wahrscheinlichkeiten, die Selbstadjungiertheit und Kommutatorrelationen der Observablenoperatoren usw. bei der Zeitentwicklung

erhalten bleiben müssen, erwarten wir, daß es **unitäre Zeitentwicklungsoperatoren** für die Zustände und Observablenoperatoren gibt, so daß die Bewegungsgleichungen durch

$$\mathbf{O}(t) = \mathbf{A}(t)\mathbf{O}(t=0)\mathbf{A}^\dagger(t), \quad (1.13.4)$$

$$|\psi(t)\rangle = \mathbf{C}(t)|\psi(t=0)\rangle \quad (1.13.5)$$

gelöst werden. Dabei gelten die Unitaritätsbedingungen

$$\mathbf{A}^\dagger(t)\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}^\dagger(t)\mathbf{A}(t) = \mathbb{1}, \quad \mathbf{C}^\dagger(t)\mathbf{C}(t) = \mathbf{C}^\dagger(t)\mathbf{C}(t) = \mathbb{1}. \quad (1.13.6)$$

Aus (1.13.4) folgt auch sofort die Zeitabhängigkeit der Eigenzustände des Operators $\mathbf{O}(t)$. Wir definieren diesen Eigenzustand dadurch, daß er zur Zeit t den fest vorgegebenen Eigenwert o besitzt. Wegen der Unitarität des Zeitentwicklungsoperators $\mathbf{A}(t)$ ist es klar, daß sich das Spektrum des Operators $\mathbf{O}(t)$ nicht ändert, d.h. $\mathbf{O}(t)$ besitzt dieselben (verallgemeinerten) Eigenwerte wie $\mathbf{O}(t=0)$. Per definitionem ist also stets

$$\mathbf{O}(t)|o, t\rangle = o|o, t\rangle. \quad (1.13.7)$$

Diese Eigenschaft erfüllt nun aber offensichtlich der Vektor

$$|o, t\rangle = \mathbf{A}(t)|o, t=0\rangle, \quad (1.13.8)$$

denn es ist

$$\begin{aligned} \mathbf{O}(t)\mathbf{A}(t)|o, t=0\rangle &= \mathbf{A}(t)\mathbf{O}(t=0)\mathbf{A}^\dagger(t)\mathbf{A}(t)|o, t=0\rangle \\ &= \mathbf{A}(t)\mathbf{O}(t=0)|o, t=0\rangle = o\mathbf{A}(t)|o, t=0\rangle. \end{aligned} \quad (1.13.9)$$

Da $\mathbf{A}(t)$ unitär ist, durchläuft weiter $\mathbf{A}(t)|o, t=0\rangle$ ein (verallgemeinertes) vollständiges Orthonormalsystem, wenn $|o, t=0\rangle$ ein solches repräsentiert. Wir können also (1.13.8) als ein verallgemeinertes VONS von Eigenzuständen zu $\mathbf{O}(t)$ verwenden, wenn wir ein solches VONS von Eigenzuständen $|o, t=0\rangle$ zu $\mathbf{O}(t=0)$ gefunden haben. Damit ist (1.13.8) eine konsistente Zeitentwicklung für die Eigenzustände von $\mathbf{O}(t)$.

Wenden wir uns nun als erstes der Bewegungsgleichung (1.13.3) für die Zustände zu. Um die entsprechende Bewegungsgleichung für $\mathbf{C}(t)$ zu erhalten, leiten wir (1.13.5) nach der Zeit ab

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \dot{\mathbf{C}}(t)|\psi(t_0)\rangle = \dot{\mathbf{C}}(t)\mathbf{C}^\dagger(t)|\psi(t)\rangle. \quad (1.13.10)$$

Der Vergleich mit (1.13.3) zeigt, daß $\mathbf{C}(t)$ die Bewegungsgleichung

$$\dot{\mathbf{C}}(t)\mathbf{C}^\dagger(t) = -\frac{i}{\hbar}\mathbf{Y}(t) \quad (1.13.11)$$

erfüllt. Daß dies mit der Selbstadjungiertheit von \mathbf{Y} verträglich ist, zeigt man unter Verwendung der Unitarität (1.13.6) wie bei der entsprechenden Rechnung für die Bildtransformation (1.9.6-1.9.8). Multiplizieren wir dies von rechts mit \mathbf{C} erhalten wir

$$\dot{\mathbf{C}}(t) = -\frac{i}{\hbar}\mathbf{Y}(t)\mathbf{C}(t). \quad (1.13.12)$$

Diese Gleichung ist unter Berücksichtigung der **Anfangsbedingung**

$$\mathbf{C}(0) = \mathbb{1} \quad (1.13.13)$$

zu lösen. Sie kann nun *nicht* wie eine Differentialgleichung mit gewöhnlichen Funktionen behandelt werden, da $\mathbf{Y}(t)$ und $\mathbf{C}(t)$ i.a. nicht notwendig kommutieren müssen. Ebenso wenig müssen die Operatoren $\mathbf{Y}(t)$ und $\mathbf{Y}(t')$ zu verschiedenen Zeiten kommutieren!

Falls allerdings $\mathbf{Y} = \text{const}$ ist, gilt offenbar

$$\mathbf{C}(t) = \exp\left(-\frac{it}{\hbar}\mathbf{Y}\right) \quad \text{falls } \mathbf{Y} = \text{const}, \quad (1.13.14)$$

wie man sofort durch Differenzieren bestätigt.

Um wenigstens eine formale Lösung bei zeitabhängigem \mathbf{Y} zu erhalten, formen wir (1.13.12) zu einer Integralgleichung um, indem wir sie unter Berücksichtigung der Anfangsbedingung von $t' = 0$ bis $t' = t$ integrieren. Dies liefert

$$\mathbf{C}(t) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \mathbf{Y}(t') \mathbf{C}(t'). \quad (1.13.15)$$

Dies ist eine **Rekursionsgleichung**, die wir iterativ lösen können. Setzen wir als Anfangsnäherung für die Lösung $\mathbf{C}_0 = \mathbb{1}$, welche wenigstens die Anfangsbedingung erfüllt, auf der rechten Seite von (1.13.15) ein, und sehen das Resultat als eine verbesserter Näherung von \mathbf{C} an, erhalten wir

$$\mathbf{C}_1(t) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 \mathbf{Y}(t_1). \quad (1.13.16)$$

Diese Näherung setzen wir wieder in (1.13.15) ein, um die nächste Näherung zu erhalten:

$$\mathbf{C}_2(t) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 \mathbf{Y}(t_1) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt_2 \mathbf{Y}(t_2) \int_0^{t_2} dt_1 \mathbf{Y}(t_1). \quad (1.13.17)$$

Diese Iteration können wir nun offenbar beliebig fortführen. Wir erhalten dann

$$\mathbf{C}(t) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \underbrace{\int_0^t dt_n \int_0^{t_n} dt_{n-1} \cdots \int_0^{t_2} dt_1 \mathbf{Y}(t_n) \mathbf{Y}(t_{n-1}) \cdots \mathbf{Y}(t_1)}_{\mathbf{C}^{(k)}(t)}. \quad (1.13.18)$$

Es auch einfach zu zeigen, daß diese iterative Lösung (wenigstens formal) die Gleichung (1.13.12) löst (Übung!). Offensichtlich geht auch (1.13.18) für zeitunabhängiges $\mathbf{Y} = \text{const}$ in (1.13.14) über.

Wir können (1.13.18) noch etwas vereinfachen, indem wir die komplizierte „Schachtelstruktur“ der oberen Grenzen in den Zeitintegralen auflösen. Dabei ist Vorsicht geboten, weil i.a. $\mathbf{Y}(t)$ und $\mathbf{Y}(t')$ für $t \neq t'$ nicht kommutieren. Es ist allerdings charakteristisch, daß die Operatoren in dem Produkt unter dem Integral stets **zeitgeordnet** sind, d.h. die Zeitargumente sind von rechts nach links gelesen monoton wachsend. Dies werden wir uns sogleich zunutze machen.

Betrachten wir zunächst das Doppelintegral in (1.13.17).

$$\mathbf{C}^{(2)}(t) = \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \mathbf{Y}(t_2) \mathbf{Y}(t_1). \quad (1.13.19)$$

Dies können wir als Flächenintegral in der t_1 - t_2 -Ebene lesen, das über das schraffierte Dreieck in Abb. 1.2 zu nehmen ist. Wir wollen nun die Integration in den Variablen t_1 und t_2 symmetrisieren. Dazu ver-

1.13 · Die Zeitentwicklung in einem beliebigen Bild (Dirac-Bild)

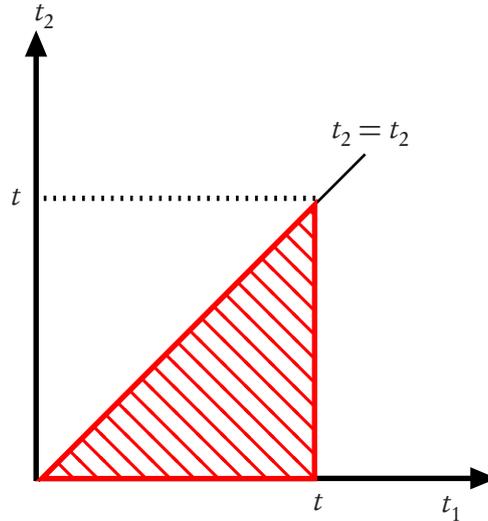


Abbildung 1.2: Zur Berechnung des Doppelintegrals in (1.13.17)

tauschen wir die Reihenfolge der Integrationsvariablen

$$\mathbf{C}^{(2)}(t) = \int_0^t dt_1 \int_{t_1}^t dt_2 \mathbf{Y}(t_1) \mathbf{Y}(t_2). \quad (1.13.20)$$

Dabei ist aber genau auf die Operatoranordnung zu achten. Die entscheidende Beobachtung ist, daß sowohl in der ursprünglichen Form (1.13.19) als auch in der Form (1.13.20) die Operatoren von rechts nach links nach wachsenden Zeiten geordnet sind. Dafür definiert man den **kausalen Zeitordnungsoperator** \mathcal{T}_c , der stets auf ein Produkt von Operatoren wirkt und für die Zeitordnung sorgt, in der die Zeiten von rechts nach links in wachsender Folge stehen. Sind die Operatoren in dem Produkt zeitunabhängig, vereinbaren wir, daß der Zeitordnungsoperator die Reihenfolge der Operatoren ungeändert läßt. Für Summen von Operatorprodukten ist \mathcal{T}_c als **linearer Operator** definiert.

Durch Einführung des Zeitordnungsoperators können wir dann in (1.13.20) durch Umbenennen der Integrationsvariablen t_1 und t_2 vertauschen, und wir können die beiden Gleichungen addieren, so daß auf der linken Seite $2\mathbf{C}^{(2)}$ entsteht und auf der rechten das Integral über das gesamte Quadrat $(0, t) \times (0, t)$ integriert wird:

$$2\mathbf{C}^{(2)}(t) = \mathcal{T}_c \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \mathbf{Y}(t_1) \mathbf{Y}(t_2). \quad (1.13.21)$$

Wir behaupten nun, daß im allgemeinen Fall

$$\mathbf{C}^{(k)}(t) = \frac{1}{k!} \mathcal{T}_c \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^t dt_n \mathbf{Y}(t_1) \cdots \mathbf{Y}(t_n) \quad (1.13.22)$$

ist. Zum Beweis nehmen wir an, die Behauptung sei für $k = n - 1$ wahr. In der Definition (1.13.18) für $\mathbf{C}^{(k)}(t)$ setzen wir $k = n$. Darin ergeben die $n - 1$ innersten Integrale definitionsgemäß $\mathbf{C}^{(n-1)}(t_1)$. Nach Induktionsannahme ist für dieses Integral die Behauptung wahr, d.h. es gilt

$$\mathbf{C}^{(n)}(t) = \frac{1}{(n-1)!} \int_0^t dt_1 \mathbf{Y}(t_1) \mathcal{T}_c \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_1} dt_n \mathbf{Y}(t_2) \cdots \mathbf{Y}(t_n). \quad (1.13.23)$$

Jetzt denken wir uns die Rechnung, die wir schon für $C^{(2)}$ ausgeführt haben, nacheinander jeweils für das äußerste und eines der innersten Integrale ausgeführt und die Ergebnisse der entstehenden Gleichungen addiert. Dann erhält man nach Division durch n

$$C^{(n)}(t) = \frac{1}{n!} \mathcal{T}_c \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^t dt_n Y(t_1) \cdots Y(t_n), \quad (1.13.24)$$

und dies ist die Behauptung für $k = n$, so daß diese nach dem Prinzip der vollständigen Induktion bewiesen ist.

Wir können also nunmehr die Reihe (1.13.18) symbolisch in der Form

$$C(t) = \mathcal{T}_c \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau Y(\tau) \right] \quad (1.13.25)$$

schreiben. Damit haben wir unser Anfangswertproblem (1.13.12-1.13.13) gelöst. Wir bemerken noch, daß für einen zeitunabhängigen Operator $Y = \text{const}$ (1.13.25) tatsächlich in (1.13.14) übergeht.

Schließlich müssen wir uns noch mit der **Zeitentwicklung der Observablenoperatoren** beschäftigen. Leiten wir also (1.13.4) nach der Zeit ab:

$$\begin{aligned} \dot{O}(t) &= \dot{A}(t)O(t_0)A^\dagger(t) + A(t)O(t_0)\dot{A}^\dagger(t) \\ &= \dot{A}(t)A^\dagger(t)O(t) \underbrace{A(t)A^\dagger(t)}_{=1} + \underbrace{A(t)A^\dagger(t)}_{=1} O(t)A(t)\dot{A}^\dagger(t). \end{aligned} \quad (1.13.26)$$

Wie in der Rechnung (1.9.7) folgt aus der Unitarität von $A(t)$

$$\dot{A}(t)A^\dagger(t) = -A(t)\dot{A}^\dagger(t). \quad (1.13.27)$$

Setzen wir dies in (1.13.26) ein, erhalten wir

$$\dot{O}(t) = \left[O(t), A(t)\dot{A}^\dagger(t) \right], \quad (1.13.28)$$

und der Vergleich mit (1.13.2) zeigt, daß für $A(t)$ die Bewegungsgleichung

$$A(t)\dot{A}^\dagger(t) = \frac{1}{i\hbar} X(t) \quad (1.13.29)$$

erfüllt sein muß. Multiplikation von links mit $A^\dagger(t) = A^{-1}(t)$ und anschließendes Adjungieren der entstehenden Gleichung liefert

$$\dot{A}(t) = +\frac{i}{\hbar} X(t)A(t). \quad (1.13.30)$$

Diese Gleichung ist bis auf das Vorzeichen auf der rechten Seite von der gleichen Bauart wie (1.13.12). Da weiter auch wieder die Anfangsbedingung

$$A(0) = \mathbb{1} \quad (1.13.31)$$

erfüllt sein muß, können wir also die Lösung unter Berücksichtigung der besagten Vorzeichenänderung sofort von (1.13.25) übernehmen:

$$A(t) = \mathcal{T}_c \exp \left[+\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' X(t') \right]. \quad (1.13.32)$$

Wir bemerken noch, daß für explizit zeitabhängige Operatoren $\mathbf{O}(t) := \mathbf{O}[\vec{x}(t), \vec{p}(t); t]$ die Bewegungsgleichung (1.9.10) durch

$$\mathbf{O}(t) = \mathbf{A}(t)\mathbf{O}[\vec{x}(0), \vec{p}(0); t]\mathbf{A}^\dagger(t) \quad (1.13.33)$$

gelöst wird, wie man sofort durch Bilden der Zeitableitung und Berücksichtigung von (1.13.29) beweist (Übung!).

1.14 Gemischte Zustände

Im Rahmen der Quantentheorie läßt sich ein System nicht genauer determinieren als es durch seine Präparation in einem durch einen Zustandsvektor $|\psi\rangle$ repräsentierten Zustand möglich ist. Dies kann z.B. dadurch geschehen, daß man ihn zur Zeit $t = 0$ in einem simultanen Eigenzustand eines vollständigen Satzes kompatibler Observabler präpariert. Die physikalische Bedeutung dieser vollständigsten möglichen Festlegung des Systemzustandes ist allerdings allein durch den **statistischen Gehalt des Zustandsvektors** gemäß der Bornschen Formel (1.1.2) gegeben. Selbst bei vollständiger Präparation des Systems sind somit nicht die Werte aller Observabler festgelegt, sondern nur derjenigen Observablen, die ihrerseits mit den Observablen des vollständigen Satzes kompatibler Observabler kompatibel sind. Die Quantentheorie ist eine **statistische Beschreibung** der Realität, und die Notwendigkeit einer statistischen Beschreibung rührt nicht von unserer mangelnden Kenntnis über den Systemzustand her, sondern ist prinzipieller Natur: Der Quantentheorie zufolge können eben keine zwei nichtkompatiblen Observablen simultan wohlbestimmte Werte besitzen. Die Unbestimmtheit der einen Observable bei Festlegung der anderen ist also unvermeidlich.

In vielen Fällen werden wir aber noch nicht einmal volle Kenntnis vom Systemzustand besitzen, d.h. wir haben i.a. das System gar nicht in einem durch einen Zustandsvektor ψ repräsentierten Zustand⁸ präpariert. In solchen Fällen kann man aber immer noch „**Quantenstatistik**“ betreiben, d.h. eine Statistische Beschreibung im gleichen Sinne wie in der **klassischen Statistischen Mechanik** vornehmen. Diese statistische Beschreibung ist nun von der quantenmechanischen Statistik eines reinen Zustandes qualitativ verschieden, denn es handelt sich um eine statistische Beschreibung aufgrund einer unvollständigen Kenntnis des Systemzustandes, während die statistischen Eigenschaften des reinen Zustandes prinzipiell nicht durch genauere Präparation des Systems beseitigt werden können.

Wenden wir uns also der Frage zu, wie man das System im Falle nicht vollständig vorgenommener Präparation quantenstatistisch beschreiben kann. Eine typische Präparation dieser Art können wir uns folgendermaßen vorstellen: Nehmen wir an, wir könnten Teilchen in reinen Zuständen $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_n\rangle$ präparieren, z.B. durch Festlegung der Werte eines vollständigen Satzes kompatibler Observabler. Diese Sätze von kompatiblen Observablen können dabei aber für jeden dieser reinen Zustände durchaus unterschiedlich sein. Insbesondere können sie auch untereinander inkompatibel sein!

Jedem dieser reinen Zustände entspricht nach der Bornschen Wahrscheinlichkeitsinterpretation ein Ensemble von voneinander unabhängig immer gleichartig präparierten Teilchen, wobei der reine Zustand durch den jeweiligen Zustandsvektor $|\psi_j\rangle$ ($j \in \{1, 2, \dots, n\}$) repräsentiert wird.

Wir können nun ein **gemischtes Ensemble** (kurz ein **Gemisch**) erzeugen, indem wir einem Experimentator zufällig (und unkorreliert) immer jeweils Teilchen von irgendeinem dieser reinen Zustände schicken, und zwar mit der Wahrscheinlichkeit $P_j \geq 0$, $\sum_{j=1}^n P_j = 1$, ein im reinen Zustand $|\psi_j\rangle$ präpariertes Teilchen. Welche statistischen Eigenschaften dieses Ensembles von Teilchen wird der Experimentator dann messen?

⁸Solche Zustände des Systems werden in diesem Zusammenhang auch genauer als **reine Zustände** bezeichnet.

Diese Frage beantwortet die elementare Wahrscheinlichkeitstheorie. Angenommen der Experimentator mißt irgendeine Observable A . Vorausgesetzt das Teilchen stammt aus dem zum reinen Zustand $|\psi_j\rangle$ gehörigen Ensemble. Dann wäre die Wahrscheinlichkeit, einen möglichen Meßwert a zu erhalten, durch (1.1.2) gegeben. Die Wahrscheinlichkeit, daß das Teilchen tatsächlich aus diesem Ensemble stammt, ist nun voraussetzungsgemäß P_j . Da wir weiter voraussetzen, daß die Teilchen unkorreliert, d.h. **stochastisch unabhängig** voneinander aus jeweils einem der n Ensembles stammen, ist für den Experimentator die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung von A den Meßwert a zu finden, durch

$$P(a, t) = \sum_{j=1}^n P_j w_{\psi_j}(a) = \sum_{j=1}^n P_j \langle a | \psi_j \rangle \langle \psi_j | a \rangle \quad (1.14.1)$$

gegeben.

Dies führt uns dazu, dem Gemisch den **Statistischen Operator**

$$\mathbf{R} = \sum_{j=1}^n P_j |\Psi_j(t)\rangle \langle \Psi_j(t)| = \sum_{j=1}^n P_j \mathbf{P}_{\psi_j}(t) \quad (1.14.2)$$

zuzuordnen. Ein reiner Zustand ist bei dieser Betrachtung dann gegeben, wenn der Präparator dem Experimentator jedesmal ein Teilchen, das in genau einem Zustand $|\psi_1\rangle$ präpariert ist, zukommen läßt. Dann ist $P_1 = 1$, und der **Statistische Operator des reinen Zustandes** folglich durch den **Projektoroperator**

$$\mathbf{P}_{\psi_1} = |\psi_1\rangle \langle \psi_1| \quad (1.14.3)$$

gegeben.

Setzen wir (1.14.2) in (1.14.1) ein, ergibt sich für die Wahrscheinlichkeit, beim Messen der Observablen A den Wert a zu erhalten,

$$P(a, t) = \langle a | \mathbf{R} a \rangle. \quad (1.14.4)$$

Diese Gleichung ist offenbar auch für einen reinen Zustand korrekt, d.h. mit der Bornschen Formel (1.1.2) kompatibel, wenn wir (1.14.3) als Statistischen Operator verwenden:

$$\langle a | \mathbf{P}_{\psi_1} a \rangle = \langle a | \psi_1 \rangle \langle \psi_1 | a \rangle = |\langle a | \psi_1 \rangle|^2 = w_{\psi_1}(a). \quad (1.14.5)$$

Der Statistische Operator ist offensichtlich **selbstadjungiert**, und die Wahrscheinlichkeiten sind positiv semidefinit. Summieren bzw. integrieren wir die Wahrscheinlichkeiten über ein VONS von Eigenvektoren von \mathbf{A} , erhalten wir

$$\int da P(a) = \sum_{j=1}^n P_j = 1, \quad (1.14.6)$$

wie es sein muß, denn wir wissen, daß jedes Teilchen des Gemisches, das durch $\mathbf{R}(t)$ beschrieben wird, aus einem der Ensembles, die durch die reinen Zustände $|\psi_j\rangle$ beschrieben werden, stammt und daß man bei der Messung von A mit Sicherheit einen Eigenwert a des dazugehörigen Operators \mathbf{A} erhält. Für den Erwartungswert einer beliebigen Funktion $f(\mathbf{A})$ ergibt sich

$$\langle f(\mathbf{A}) \rangle = \int da f(a) P(a) = \int da \langle a | \mathbf{R} f(\mathbf{A}) | a \rangle =: \text{Tr}[\mathbf{R}(t) f(\mathbf{A})]. \quad (1.14.7)$$

Dabei ist die **Spur** (engl. trace) eines beliebigen Operators **B** durch

$$\text{Tr } \mathbf{B} = \sum_{\int} da \langle a | \mathbf{B} | a \rangle \quad (1.14.8)$$

definiert. Man kann leicht nachweisen (Übung!), daß die Spur unabhängig von dem in dieser Definition benutzten VONS $|a\rangle$ ist. Außerdem gilt unabhängig davon, ob die Operatoren **A** und **B** kommutieren oder nicht

$$\text{Tr}(\mathbf{AB}) = \text{Tr}(\mathbf{BA}). \quad (1.14.9)$$

1.15 Die Bewegungsgleichung für den Statistischen Operator

Wir arbeiten in einem beliebigen Bild. Die Zeitabhängigkeit der Observablenoperatoren und Zustände ist also durch die Bewegungsgleichungen (1.13.1-1.13.3) bzw. die Lösungen mittels unitärer Transformationen gemäß (1.13.4) bestimmt. Die zeitliche Entwicklung des Statistischen Operators ergibt sich durch Ableiten von (1.14.2) nach der Zeit und Verwendung von (1.13.3)⁹:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{R}(t) = \sum_{j=1}^n P_j \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{Y}(t), \mathbf{P}_{\psi_j}(t)] = -\frac{1}{i\hbar} [\mathbf{R}(t), \mathbf{Y}(t)]. \quad (1.15.1)$$

Andererseits muß aber $\mathbf{R}(t)$ der Bewegungsgleichung (1.9.10)

$$\frac{d}{dt} \mathbf{R}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{R}(t), \mathbf{X}(t)] + \frac{\partial^{\text{expl}}}{\partial t} \mathbf{R}(t) \quad (1.15.2)$$

genügen, wenn er als Funktion irgendwelcher Observabler und evtl. explizit der Zeit geschrieben wird. Ziehen wir davon (1.15.1) ab, erhalten wir wegen $\mathbf{H} = \mathbf{X} + \mathbf{Y}$ die bildunabhängige **von Neumann-Gleichung**

$$\dot{\mathbf{R}}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{R}(t), \mathbf{H}] + \frac{\partial^{\text{expl}}}{\partial t} \mathbf{R}(t) = 0. \quad (1.15.3)$$

Es ist klar, daß jeder **selbstadjungierte positiv semidefinite Operator** **R** als Statistischer Operator dienen kann. Dabei heißt ein hermitescher Operator positiv semidefinit, wenn für jeden Vektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$

$$\langle \psi | \mathbf{R} \psi \rangle \geq 0 \quad (1.15.4)$$

gilt. Für die Zeitabhängigkeit von Erwartungswerten (evtl. explizit zeitabhängiger) Observabler $O(t)$ folgt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle O(t) \rangle &= \text{Tr} \left[\frac{dO(t)}{dt} \mathbf{R}(t) + O(t) \frac{d}{dt} \mathbf{R}(t) \right] \\ &= \text{Tr} \left(\frac{\partial^{\text{expl}} O(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [O(t), \mathbf{X}(t)] \mathbf{R}(t) + O(t) \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{Y}(t), \mathbf{R}(t)] \right). \end{aligned} \quad (1.15.5)$$

Den letzten Term können wir unter Verwendung von (1.14.9) noch weiter umformen:

$$\begin{aligned} \text{Tr} \{ O(t) [\mathbf{Y}(t), \mathbf{R}(t)] \} &= \text{Tr} \{ O(t) \mathbf{Y}(t) \mathbf{R}(t) - [O(t) \mathbf{R}(t)] \mathbf{Y}(t) \} \\ &= \text{Tr} [O(t) \mathbf{Y}(t) \mathbf{R}(t) - \mathbf{Y}(t) O(t) \mathbf{R}(t)] \\ &= \text{Tr} \{ [O(t), \mathbf{Y}(t)] \mathbf{R}(t) \}. \end{aligned} \quad (1.15.6)$$

⁹Man beachte, daß die P_j als zeitunabhängig angenommen werden, d.h. die Präparation des Gemisches erfolgt zu allen Zeiten in gleicher Weise.

Dies in (1.15.5) eingesetzt, ergibt wegen der Definition der **kovarianten Zeitableitung** (1.9.13)

$$\frac{d}{dt} \langle O(t) \rangle = \text{Tr}[\dot{\mathbf{O}}(t)\mathbf{R}(t)] = \langle \dot{\mathbf{O}}(t) \rangle, \quad (1.15.7)$$

d.h. das **Ehrenfestsche Theorem** gilt auch für gemischte Zustände.

1.16 Zusammengesetzte Systeme

Wir benötigen weiter die quantenmechanische Beschreibung zusammengesetzter Systeme, z.B. zweier (unterscheidbarer) Teilchen¹⁰. Angenommen, diese beiden Teilchen sind sehr weit voneinander entfernt, so daß wir von Wechselwirkungen absehen können, und voneinander unabhängig präpariert. Dann ist es offenbar möglich, Werte von Observablen A_1 und A_2 , die sich nur auf jeweils eines der Teilchen beziehen, simultan zu determinieren, d.h. die dazugehörigen Operatoren \mathbf{A}_1 und \mathbf{A}_2 müssen stets kommutieren. Außerdem muß sich die Wahrscheinlichkeit, daß A_1 den Wert a_1 und A_2 den Wert a_2 annehmen als Produkt aus den Einzelwahrscheinlichkeiten ergeben. Bezeichnen wir also den Zustand des Gesamtsystems mit $|\Psi(t)\rangle$, die simultanen Eigenvektoren mit $|(a_1, a_2)\rangle$ und die Zustände der einzelnen Teilchen mit $|\psi_1(t)\rangle$ und $|\psi_2(t)\rangle$, dann muß gelten

$$P_{\Psi}(a_1, a_2; t) = |\langle (a_1, a_2) | \Psi(t) \rangle|^2 = P_{\psi_1}(a_1, t) P_{\psi_2}(a_2, t) = |\langle a_1 | \psi_1(t) \rangle|^2 |\langle a_2 | \psi_2(t) \rangle|^2. \quad (1.16.1)$$

Im Hilbertraumformalismus läßt sich dieses Verhalten durch das **Tensorprodukt** der Zustandsvektoren $|\psi_j(t)\rangle$ der einzelnen Teilchen beschreiben.

Sind \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 die Hilberträume der Zustandsvektoren der beiden Teilchen, ist deren Tensorprodukt $\mathcal{H}^{(2)} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ als ein neuer Hilbertraum definiert. Wir müssen dazu nur erklären, wie sich die Vektoren des neuen Vektorraums aus den Vektoren der Hilberträume \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 ergeben. Zunächst betrachten wir sog. **direkte Produkte zweier Vektoren**, die wir mit

$$|(\psi_1, \psi_2)\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle; \quad |\psi_1\rangle \in \mathcal{H}_1, \quad |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}_2 \quad (1.16.2)$$

bezeichnen. Dabei soll das Produkt \otimes linear in beiden Argumenten sein, d.h. für $\lambda_j, \mu_j \in \mathbb{C}$ und $|\psi_j\rangle, |\phi_j\rangle \in \mathcal{H}_j$ für $j \in \{1, 2\}$ soll gelten

$$\begin{aligned} (\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\phi_1\rangle) \otimes (\mu_1 |\psi_2\rangle + \mu_2 |\phi_2\rangle) = & \lambda_1 \mu_1 |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle + \lambda_1 \mu_2 |\psi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle \\ & + \lambda_2 \mu_1 |\phi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle + \lambda_2 \mu_2 |\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle. \end{aligned} \quad (1.16.3)$$

Seien nun $|u_n^{(1)}\rangle$ und $|u_n^{(2)}\rangle$ irgendwelche vollständigen Orthonormalbasen von \mathcal{H}_1 bzw. \mathcal{H}_2 ¹¹. Dann definieren wir als $\mathcal{H}_{12} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ den Vektorraum, der aus Vektoren besteht, die durch die Vektoren

$$|u_{n_1 n_2}^{(12)}\rangle = |u_{n_1}^{(1)}, u_{n_2}^{(2)}\rangle = |u_{n_1}^{(1)}\rangle \otimes |u_{n_2}^{(2)}\rangle = |u_{n_1}^{(1)}\rangle \otimes |u_{n_2}^{(2)}\rangle \quad (1.16.4)$$

durch (zunächst formale) Reihen der Form

$$|\psi\rangle = \sum_{n_1, n_2} \psi_{n_1 n_2} |u_{n_1 n_2}^{(12)}\rangle \quad (1.16.5)$$

¹⁰Wie wir zu Beginn des nächsten Kapitels noch genauer ausführen werden, sind Teilchen im Rahmen der Quantentheorie nur voneinander unterscheidbar, wenn sie sich in wenigstens einer intrinsischen Eigenschaft voneinander unterscheiden lassen, z.B. wenn sie unterschiedliche elektrische Ladungen oder unterschiedlichen Spin besitzen.

¹¹Wir betrachten hier der Einfachheit halber echte VONSe. Die Verallgemeinerung auf Entwicklungen nach verallgemeinerten Eigenzuständen von Operatoren mit kontinuierlichem Spektrum ist kein weiteres Problem.

erzeugt werden.

Das Skalarprodukt zwischen zwei Vektoren $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}_{12}$ wird dann auf natürliche Weise definiert, indem man zunächst erklärt, wie die Produktzustände (1.16.4) multipliziert werden,

$$\langle \psi_1, \psi_2 | \phi_1, \phi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \phi_1 \rangle \langle \psi_2 | \phi_2 \rangle, \quad (1.16.6)$$

und dann der Braket-Ausdruck für beliebige Vektoren über die Semilinearität im ersten und Linearität im zweiten Element definiert wird. Dann bilden die $\left| u_{n_1 n_2}^{(12)} \right\rangle$ ein VONS von \mathcal{H}_{12} , und zusammen mit der Entwicklung (1.16.5) folgt dann

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_{n_1, n_2} \phi_{n_1 n_2}^* \psi_{n_1 n_2}. \quad (1.16.7)$$

Es ist klar, daß nun Observablen des Gesamtsystems wieder durch selbstadjungierte Operatoren, die auf dem Hilbertraum \mathcal{H}_{12} definiert sind, repräsentiert werden.

Die einzige Neuerung gegenüber der bisher betrachteten Darstellung von Einteilchenobservablen ist die Möglichkeit, **Tensorprodukte von Einteilchenoperatoren** zu bilden. Seien dazu \mathbf{A}_1 und \mathbf{A}_2 irgendwelche Operatoren in \mathcal{H}_1 bzw. \mathcal{H}_2 , dann definiert man ihr Tensorprodukt $\mathbf{A}_1 \otimes \mathbf{A}_2$ zunächst durch die Wirkung auf beliebige Produktvektoren vermöge

$$\mathbf{A}_1 \otimes \mathbf{A}_2 |(\psi_1, \psi_2)\rangle = (\mathbf{A}_1 |\psi_1\rangle) \otimes (\mathbf{A}_2 |\psi_2\rangle) \quad (1.16.8)$$

und setzt diese Definition mittels Entwicklung allgemeiner Vektoren in \mathcal{H}_{12} nach Produktvektoren (1.16.5) linear auf ganz \mathcal{H}_{12} fort. Es ist dann unmittelbar klar, daß für zwei selbstadjungierte Einteilchenoperatoren \mathbf{A}_1 und \mathbf{A}_2 auch $\mathbf{A}_1 \otimes \mathbf{A}_2$ wieder selbstadjungiert ist.

Weiter folgt, daß man Einteilchenobservablen im Gesamtsystem aus zwei Teilchen durch Operatoren der Form $\mathbf{A}_1^{(12)} = \mathbf{A}_1 \otimes \mathbb{1}$ bzw. $\mathbf{A}_2^{(12)} = \mathbb{1} \otimes \mathbf{A}_2$ zu repräsentieren hat. Solche Einteilchenobservablen, die sich auf verschiedene Teilchen beziehen, kommutieren, so daß solche Observablen stets kompatibel sind.

Kommen wir nun auf unsere Ausgangssituation zurück, daß zwei Teilchen voneinander unabhängig präpariert werden, so daß die Wahrscheinlichkeit für das Resultat einer simultanen Messung irgendwelcher Einteilchenobservablen, die sich jeweils auf das eine bzw. das andere Teilchen beziehen, das Produkt der Einzelwahrscheinlichkeiten ergeben sollte. Wir müssen nun noch nachprüfen, daß in dem eben formulierte Ansatz des Produktraums die Bornsche Wahrscheinlichkeitsinterpretation mit dieser Annahme kompatibel ist. Die beiden Teilchen im Zweiteilchenzustand $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_{12}$ sind definitionsgemäß dann voneinander unabhängig präpariert, wenn $|\psi\rangle$ ein Produktzustand ist, d.h.

$$|\psi\rangle = |(\psi_1, \psi_2)\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle. \quad (1.16.9)$$

Sei dann $|(a_1, a_2)\rangle$ ein simultaner Eigenzustand der Einteilchenoperatoren $\mathbf{A}_1^{(12)}$ und $\mathbf{A}_2^{(12)}$. Offenbar ist

$$|(a_1, a_2)\rangle = |a_1\rangle \otimes |a_2\rangle \quad (1.16.10)$$

und folglich nach der Bornschen Wahrscheinlichkeitsinterpretation die Wahrscheinlichkeit einer simultanen Messung der jeweiligen Einteilchenobservablen

$$P_{\psi}(a_1, a_2) = |\langle (a_1, a_2) | \psi \rangle|^2 = |\langle a_1 | \psi_1 \rangle|^2 |\langle a_2 | \psi_2 \rangle|^2 = P_{\psi_1}(a_1) P_{\psi_2}(a_2), \quad (1.16.11)$$

wie wir es eingangs gefordert haben.

Es ist klar, daß allgemeinere Zustände, insbesondere solche, die sich aus Produktzuständen durch Zeitentwicklung **wechselwirkender Teilchen** ergeben, i.a. keine Produktzustände sondern allgemeine Superpositionen von Produktzuständen sind.

1.17 Reduzierte Statistische Operatoren

Interessante Fragestellungen treten auch auf, wenn man zusammengesetzte Systeme betrachtet, sich aber nur für das Verhalten von Teilsystemen interessiert. Wie wir in Abschnitt 1.14 gesehen haben, wird man den quantenmechanischen Zustand eines System i.a. durch einen **Statistischen Operator** $\mathbf{R}(t)$ beschreiben. Dabei wird auch gleich der Fall eines reinen Zustandes miteinfaßt. Wie wir oben gesehen haben, liegt ein solcher dann vor, wenn $\mathbf{R}(t) = |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)|$ ist. Es ist klar, daß auch für zusammengesetzte Systeme wieder jeder selbstadjungierte positiv semidefinite Operator $\mathbf{R}(t)$ mit $\text{Tr} \mathbf{R}(t) = 1$ als Statistischer Operator auftreten kann (wobei die Zeitabhängigkeit durch die **von Neumann-Gleichung** (1.15.3) gegeben ist).

Betrachten wir nun wieder ein Zweiteilchensystem, so können wir nach statistischen Eigenschaften für eines der beiden Teilchen fragen, wobei das Gesamtsystem in irgendeinem i.a. gemischten Zustand, der durch einen Statistischen Operator $\mathbf{R}_{12}(t)$ beschrieben wird, präpariert sein darf. Wie groß ist also die Wahrscheinlichkeit, daß bei Messung einer Einteilchenobservablen A_1 , im Gesamtraum durch $\mathbf{A}_1^{(12)} = \mathbf{A}_1 \otimes \mathbb{1}$ beschrieben, gerade ein Eigenwert a_1 auftritt? Um diese Frage zu beantworten, verwenden wir ein VONS von Eigenvektoren von $\mathbf{A}_1^{(12)}$. Für irgendeine auf Teilchen 2 bezogene Einteilchenobservable können wir die Produktzustände $|a_1, a_2\rangle$ als ein solches VONS verwenden. Gem. (1.14.4) ist die Wahrscheinlichkeit, diese simultanen Eigenwerte zu finden,

$$P_{\mathbf{R}}^{(12)}(a_1, a_2; t) = \langle (a_1, a_2) | \mathbf{R}(t) | (a_1, a_2) \rangle, \quad (1.17.1)$$

d.h. die gesuchte Wahrscheinlichkeit, am Teilchen 1 bei der Messung von A_1 den Wert a_1 zu erhalten, muß durch

$$P_{\mathbf{R}}^{(1)}(a_1; t) = \sum_{a_2} P_{\mathbf{R}}^{(12)}(a_1, a_2; t) =: \langle a_1 | \mathbf{R}_1^{(\text{red})}(t) | a_1 \rangle \quad (1.17.2)$$

gegeben sein. Diese Wahrscheinlichkeiten kann man durch Messung der Observablen A_1 an Teilchen 1 in Ensembles von im Zustand \mathbf{R}_{12} präparierten Zweiteilchensystemen ermitteln. Dabei ist es unerheblich, welchen Wert man für die auf Teilchen 2 bezogene Einteilchenobservable A_2 messen würde. Es ist auch einfach zu zeigen, daß es beim Summieren über a_2 in (1.17.2) auf die konkrete Wahl der Observablen A_2 nicht ankommt, d.h. man erhält dasselbe Resultat, wenn man stattdessen irgendeine andere Einteilchen-Observable B_2 benutzt.

Daher ist es sinnvoll, den in (1.17.2) definierten auf Teilchen 1 bezogenen **reduzierten Statistischen Operator**

$$\mathbf{R}_1^{(\text{red})}(t) = \sum_{a_1} |a_1\rangle \langle a_1| P_{\mathbf{R}}^{(1)}(a_1; t) = \sum_{a_1, a_2} |a_1\rangle \langle a_1| \langle (a_1, a_2) | \mathbf{R}_{12}(t) | (a_1, a_2) \rangle \quad (1.17.3)$$

einzuführen, der unabhängig von dem verwendeten VONS $|a_1, a_2\rangle$ ist (Beweis als Übung!). Zur Abkürzung definiert man

$$\text{Tr}_2 \mathbf{R}_{12} := \sum_{a_1, a_2} |a_1\rangle \langle a_1| \langle (a_1, a_2) | \mathbf{R}_{12}(t) | (a_1, a_2) \rangle. \quad (1.17.4)$$

Man beachte, daß dies einen Operator im Produktraum $\mathcal{H}_{12} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ auf einen Operator in \mathcal{H}_1 abbildet. Es ist auch klar, wie die entsprechenden Formeln lauten, wenn A_1 und/oder A_2 ganz oder teilweise kontinuierliche Spektren besitzen.

Man überlegt sich auch leicht, daß $\mathbf{R}_1^{(\text{red})}$ genau dann ein reiner Zustand ist, wenn \mathbf{R}_{12} der Projektionsoperator auf einen Produktzustand, d.h. von der Form $|(\psi_1, \psi_2)\rangle \langle (\psi_1, \psi_2)|$ ist. I.a. führt aber ein

reiner Zweiteilchenzustand $\mathbf{R}_{12} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ zu einem gemischten Zustand für den reduzierten Einteilchenzustand $\mathbf{R}_1^{(\text{red})}$. In diesem Fall besitzt dann zwar das Zweiteilchensystem scharf definierte Werte für diejenigen Observablen, für die $|\Psi\rangle$ Eigenzustand ist, aber es gibt keine Einteilchenobservablen, denen scharf bestimmte Werte zukommen. Diese Eigenschaften quantenmechanischer Systeme führen auf das sogenannte **Einstein-Podolsky-Rosen-Paradoxon** [EPR35, Boh35], auf das wir hier nicht näher eingehen wollen.

Kapitel 1 · Erinnerung an die Quantenmechanik I

Kapitel 2

Galilei-Symmetrie

Die Analyse der grundlegenden physikalischen Theorien im Hinblick auf ihre Symmetrien kann in ihrer Bedeutung für die moderne Physik nicht überschätzt werden. Nicht zuletzt gestatten erst die fundamentalen Symmetrieprinzipien eine mathematisch konsistente physikalische Begründung der **Observablenalgebra**, insbesondere der **Kommutatorrelationen zwischen den Observablenoperatoren**, der Quantentheorie. In diesem Kapitel beschäftigen wir uns mit den Symmetrien des **Galilei-Newtonschen Raum-Zeit-Kontinuums** und wie diese im Rahmen der Quantentheorie formuliert werden können. Dabei ergeben sich interessante Folgerungen, die zum Teil über die **heuristische Quantisierung klassischer Observablen** hinausgehen, wie wir sie in QM I verwendet haben, um zu einer quantentheoretischen Beschreibung von Teilchen zu gelangen. Insbesondere wird sich die Existenz einer in der klassischen Physik der Punktteilchen unbekannt Form des Drehimpulses, nämlich des **Spins von Teilchen** ergeben.

2.1 Die Galileigruppe in der Newtonschen Mechanik

Die grundlegenden Annahmen der Newtonschen Mechanik lassen sich sehr anschaulich in Form von **Symmetrieprinzipien** formulieren. So sagt das 1. Newtonsche Gesetz (der **Trägheitssatz**) aus, daß es spezifische Bezugssysteme gibt, in denen Teilchen, auf die keine Kräfte wirken, sich stets geradlinig gleichförmig bewegen und daß ein Beobachter durch kein physikalisches Experiment irgendeine Form von absoluter Geschwindigkeit feststellen kann. Die grundlegenden Naturgesetze müssen also in allen zueinander **geradlinig gleichförmig bewegten Bezugssystemen** gleich aussehen, d.h. die Gleichungen sind **invariant unter Galilei-Boosts**. Seien (t, \vec{x}) die Zeit und die drei Raumkomponenten eines Punktteilchens bzgl. einer kartesischen Basis, welches zusammen mit der Festlegung irgendeines in diesem Bezugssystem ruhenden Koordinatenursprungs ein Inertialsystem definiert. Bewegt sich nun der Ursprung eines anderen Inertialsystems, in dem die Zeit und Ortskoordinaten durch (t', \vec{x}') gegeben seien, relativ zum ersten Bezugssystem mit der Geschwindigkeit \vec{w}_1 , so gilt

$$t' = t, \quad \vec{x}' = \vec{x} - \vec{w}_1 t, \quad (2.1.1)$$

wobei wir stillschweigend Newtons Grundannahme, daß die Zeit unabhängig von jeglichen physikalischen Vorgängen in allen Inertialsystemen gleich verläuft, verwendet haben. Diese Transformationen nennt man **Galilei-Boosts**.

Sie bilden mathematisch gesehen eine **Gruppe** mit der Hintereinanderausführung als Gruppenmultiplikation. Führen wir nämlich einen weiteren Boost zu einem dritten Inertialsystem (t'', \vec{x}'') , welches

sich gegen das Inertialsystem (t', \vec{x}') mit der Geschwindigkeit \vec{w}_2 bewegt, aus, erhalten wir zusammen mit (2.1.1)

$$t'' = t' = t, \quad \vec{x}'' = \vec{x}' - \vec{w}_2 t' = \vec{x} - (\vec{w}_2 + \vec{w}_1)t. \quad (2.1.2)$$

Die Gesamttransformation, die direkt von den Größen im Inertialsystem (t, \vec{x}) zum System (t'', \vec{x}'') führt, ist also ihrerseits durch einen Galileiboost gegeben, und zwar dem mit der Geschwindigkeit $\vec{w}_3 = \vec{w}_1 + \vec{w}_2$. Schreiben wir den Galilei-Boost mit Geschwindigkeit \vec{w} formal als Matrix-Vektormultiplikation in der Form

$$B(\vec{w}) \begin{pmatrix} t \\ \vec{x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t \\ \vec{x} - \vec{w}t \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad B(\vec{w}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -w_x & 1 & 0 & 0 \\ -w_y & 0 & 1 & 0 \\ -w_z & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.1.3)$$

ergibt sich diese Hintereinanderausführung durch die Matrizenmultiplikationsregel

$$B(\vec{w}_2)B(\vec{w}_1) = B(\vec{w}_1 + \vec{w}_2) = B(\vec{w}_1)B(\vec{w}_2). \quad (2.1.4)$$

Es ist weiter klar, daß $B(\vec{w} = 0) = \mathbb{1}_4$ das **neutrale Element der Gruppe** und $B(-\vec{w})$ das zu $B(\vec{w})$ **inverse Element** ist. Da weiter wegen (2.1.4) diese Boost-Matrizen kommutieren, nennt man diese **Galilei-Boost-Gruppe** eine **Abelsche Gruppe**.

Dies sind freilich noch nicht alle Symmetrien der Galilei-Newtonschen Raumzeit. Es wird weiter vorausgesetzt, daß die Naturgesetze sich nicht mit der Zeit ändern. Es kann also auch kein absoluter Zeitpunkt gegenüber irgendeinem anderen Zeitpunkt ausgezeichnet sein. Außerdem gehen wir davon aus, daß die Naturgesetze auch an jedem Ort die gleichen sind. Die Naturgesetze müssen also auch unter **Raum-Zeit-Translationen** invariant sein, d.h. ändern wir den Ursprung der Zeitrechnung und den Koordinatenursprung um irgendwelche konstanten Werte, also

$$t' = t - \alpha, \quad \vec{x}' = \vec{x} - \vec{a} \stackrel{\text{def}}{\Leftrightarrow} T(\alpha, \vec{a}) \left[\begin{pmatrix} t \\ \vec{x} \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} t - \alpha \\ \vec{x} - \vec{a} \end{pmatrix} \quad (2.1.5)$$

dürfen sich die Bewegungsgleichungen eines Systems von Punktteilchen nicht ändern. Es ist klar, daß auch diese Transformationen, die wir mit $T(\alpha, \vec{a})$ bezeichnen wollen, untereinander eine Abelsche Gruppe bilden, denn es gilt offenbar

$$T(\alpha_2, \vec{a}_2)T(\alpha_1, \vec{a}_1) = T(\alpha_1 + \alpha_2, \vec{a}_1 + \vec{a}_2). \quad (2.1.6)$$

Ebenso bilden die Transformationen, die sich aus beliebigen Hintereinanderausführungen von Galileiboosts und Raum-Zeit-Translationen erzeugen läßt, eine Gruppe, allerdings *keine* Abelsche (*Übung*).

Schließlich wird für jeden (inertialen) Beobachter der Raum als euklidisch angenommen, so daß auch keine Wahl irgendeines kartesischen Basissystems gegenüber einem anderen ausgezeichnet ist, d.h. auch die Orientierung des Bezugssystems ist durch kein physikalisches Phänomen absolut bestimmt. Demnach müssen die Naturgesetze auch unter **räumlichen Drehungen** invariant sein:

$$t' = t, \quad \vec{x}' = \hat{R}(\vec{\phi})\vec{x}. \quad (2.1.7)$$

Dabei ist $\vec{\phi}$ ein Vektor, dessen Richtung $\vec{n} = \vec{\phi}/\phi$ mit $\phi = 0 \leq |\vec{\phi}| \leq \pi$ die Richtung der Drehachse und dessen Betrag ϕ den Drehwinkel im Sinne der Rechten-Handregel angibt. Um diese Drehung soll die Basis des Bezugssystems (t', \vec{x}') gegen die des Bezugssystems (t, \vec{x}) verdreht sein. Konkret erhält man die

Wirkung der Drehung auf die Komponenten des Ortsvektors wie folgt: Die Projektion auf die Richtung der Drehachse $\vec{x}_{\parallel} = \vec{n}(\vec{n} \cdot \vec{x})$ bleibt ungeändert, während der dazu senkrechte Anteil $\vec{x}_{\perp 1} = \vec{n} \times \vec{x}$ und $\vec{x}_{\perp} = (\vec{n} \times \vec{x}) \times \vec{n} = \vec{x} - \vec{x}_{\parallel}$ um den Winkel ϕ gedreht wird. Die Einheitsvektoren $\vec{b}_1 = \vec{x}_{\perp}/|\vec{x}_{\perp}|$, $\vec{b}_2 = \vec{n} \times \vec{x}/|\vec{n} \times \vec{x}|$ und \vec{n} bilden offenbar ein rechtshändiges kartesisches Basissystem, und folglich lautet die Drehung

$$\vec{x}' = \hat{R}(\phi)\vec{x} = \vec{n}(\vec{n} \cdot \vec{x}) + \cos \phi(\vec{n} \times \vec{x}) \times \vec{n} - \sin \phi \vec{n} \times \vec{x}. \quad (2.1.8)$$

Es ist klar, daß auch die Drehungen eine Gruppe bilden. Es ist die Gruppe der **reellen speziellen orthogonalen 3x3-Matrizen** $SO(3)$. Dies sind die reellen 3×3 -Matrizen, für die

$$\hat{R}\hat{R}^T = \mathbb{1}_3 \quad \text{und} \quad \det \hat{R} = 1 \quad (2.1.9)$$

gilt. Das inverse Element zu $\hat{R}(\vec{\phi})$ ist offenbar $\hat{R}(-\vec{\phi})$, und das neutrale Element der Gruppe ist $\hat{R}(0) = \mathbb{1}_3$. Da Drehungen um verschieden gerichtete Drehachsen *nicht* kommutieren, ist hier auf die Reihenfolge der Drehungen zu achten.

Es ist bequem, die Drehungen und die Boosts in eine 4×4 -Matrix

$$\Gamma(\vec{w}, \hat{R}) := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\vec{w} & \hat{R} \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \hat{R} \in SO(3) \quad (2.1.10)$$

zusammenzufassen. Für $\hat{R} \neq \mathbb{1}_3$ entspricht dies der Hintereinanderausführung einer Drehung gefolgt von einem Galileiboost mit Geschwindigkeit \vec{w} . Hierbei ist auf die Reihenfolge der Operationen zu achten, denn die Drehungen und die Boosts bilden zwar eine Gruppe, aber Drehungen und Boosts vertauschen i.a. nicht miteinander! Die Matrizen (2.1.10) bilden die **Boost-Dreh-Gruppe**, denn die Hintereinanderausführung zweier solcher Transformationen ergibt

$$\Gamma(\vec{w}_2, \hat{R}_2)\Gamma(\vec{w}_1, \hat{R}_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -(\vec{w}_2 + \hat{R}_2\vec{w}_1) & \hat{R}_2\hat{R}_1 \end{pmatrix} = \Gamma(\vec{w}_2 + \hat{R}_2\vec{w}_1, \hat{R}_2\hat{R}_1). \quad (2.1.11)$$

Man bezeichnet diese Symmetriegruppe der Galilei-Newtonschen Raum-Zeit auch als **homogene Galilei-Gruppe**, denn sie ist eine lineare Abbildung des Raum-Zeit-Vektors (t, \vec{x}) . Nehmen wir auch noch die Raum-Zeit-Translationen hinzu, indem wir die Wirkung einer solchen aus Boosts, Translationen und Drehungen kombinierten Transformation auf die Raum-Zeit-Vektoren durch

$$\Gamma(\vec{w}, \alpha, \vec{a}, \hat{R}) \left[\begin{pmatrix} t \\ \vec{x} \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} t - \alpha \\ D\vec{x} - \vec{w}t - \vec{a} \end{pmatrix} \quad (2.1.12)$$

definieren, haben wir schließlich die volle **Galilei-Gruppe** konstruiert. Für die Hintereinanderausführung zweier solcher Transformationen ergibt sich

$$\Gamma(\vec{w}_2, \alpha_2, \vec{a}_2, \hat{R}_2)\Gamma(\vec{w}_1, \alpha_1, \vec{a}_1, \hat{R}_1) = \Gamma(\hat{R}_2\vec{w}_1 + \vec{w}_2, \alpha_1 + \alpha_2, \hat{R}_2\vec{a}_1 + \vec{a}_2 - \vec{w}_2\alpha_1, \hat{R}_2\hat{R}_1). \quad (2.1.13)$$

Die inverse Transformation zu $\Gamma(\vec{w}, \alpha, \vec{a}, \hat{R})$ folgt aus der Forderung

$$\Gamma(\vec{w}', \alpha', \vec{a}', \hat{R}')\Gamma(\vec{w}, \alpha, \vec{a}, \hat{R}) = \Gamma(0, 0, 0, \mathbb{1}_3). \quad (2.1.14)$$

Mit der Gruppenmultiplikationsregel (2.1.13) folgt daraus das Gleichungssystem

$$\hat{R}'\vec{w} + \vec{w}' = 0, \quad \alpha + \alpha' = 0, \quad \hat{R}'\vec{a} + \vec{a}' - \vec{w}'\alpha = 0, \quad \hat{R}'\hat{R} = \mathbb{1}_3. \quad (2.1.15)$$

Dies läßt sich leicht nach den gesuchten Parametern auflösen (*Übung!*), so daß sich schließlich

$$\Gamma^{-1}(\vec{w}, \alpha, \vec{a}, \hat{R}) = \Gamma(-\hat{R}^{-1}\vec{w}, -\alpha, -\hat{R}^{-1}(\vec{a} + \vec{w}\alpha), D^{-1}) \quad (2.1.16)$$

ergibt.

Wir können im folgenden die einzelnen Untergruppen der volle Galileigruppe getrennt behandeln, wie bereits oben geschehen, denn sie ergab sich ja durch Zusammensetzung aus Galileiboosts, raum-zeitlichen Translationen und räumlichen Drehungen. In der obigen Konvention gilt

$$\Gamma(\vec{w}, \alpha, \vec{a}, \hat{R}) = T(\alpha, \vec{a})B(\vec{w})\hat{R} \quad (2.1.17)$$

Es ergibt sich eine erhebliche Vereinfachung der Analyse von solchen **kontinuierlichen Symmetrien**, wenn man zunächst **infinitesimale Transformationen** betrachtet, also solche Transformationen für sehr kleine Abweichungen vom Gruppeneinheitselement. Im vorliegenden Fall der Galileigruppe wird dies dadurch erleichtert, daß die Transformationen offensichtlich differenzierbar nach den Parametern \vec{w} , α , \vec{a} und $\vec{\phi}$ in der Parametrisierung der Drehmatrix D gemäß (2.1.8). Solche Gruppen nennt man **Lie-Gruppen**¹.

Während sich für die Translationen und Boosts zunächst keine erhebliche Vereinfachung zu ergeben scheint, führt eine Entwicklung von \cos und \sin in (2.1.8) nach einem infinitesimalen Drehwinkel $\delta\phi$ zu

$$\vec{x}' = \vec{x} + \delta\vec{x} = \vec{n}(\vec{n} \cdot \vec{x}) + (\vec{n} \times \vec{x}) \times \vec{n} - \delta\phi \vec{n} \times \vec{x} = \vec{x} - \delta\vec{\phi} \times \vec{x} + \mathcal{O}(\delta\phi^2). \quad (2.1.18)$$

Für die infinitesimale Änderung des Ortsvektors aufgrund der infinitesimalen Drehung ergibt sich also

$$\delta\vec{x} = -\delta\vec{\phi} \times \vec{x} + \mathcal{O}(\delta\phi^2). \quad (2.1.19)$$

Man rechnet auch leicht nach (*Übung!*), daß die Hintereinanderausführung zweier solcher infinitesimaler Drehungen sich zu

$$\hat{R}(\delta\vec{\phi}_2)\hat{R}(\delta\vec{\phi}_1)\vec{x} = \vec{x} - (\delta\vec{\phi}_1 + \delta\vec{\phi}_2) \times \vec{x} + \mathcal{O}(\delta\phi_1^2, \delta\phi_2^2). \quad (2.1.20)$$

ergibt.

Man kann nun die infinitesimalen Transformationen offenbar wieder als Matrizen schreiben. Für die Komponenten des Vektors ergibt sich aufgrund der Definition des Vektorprodukts ja

$$\delta\vec{x} = -\delta\vec{\phi} \times \vec{x} = \vec{e}_i(-\epsilon_{ijk} \delta\phi_j)x_k. \quad (2.1.21)$$

Definieren wir nun drei Matrizen \mathfrak{J}_j durch²

$$i(\mathfrak{J}_j)_{ik} := -\epsilon_{ijk}, \quad (2.1.22)$$

können wir für (2.1.21) auch

$$\delta\vec{x} = i\delta\phi_j(\mathfrak{J}_j)_{ik}x_k =: i(\delta\vec{\phi} \cdot \vec{\mathfrak{J}})\vec{x} \quad (2.1.23)$$

schreiben. Die infinitesimalen Matrizen $\delta\vec{\phi} \cdot \vec{\mathfrak{J}}$ bilden nun offenbar einen **Vektorraum**, wobei die Hintereinanderausführung zweier infinitesimaler Drehungen sich gemäß (2.1.20) als die Summe der entsprechenden Matrizen ergibt. In diesem Sinne bilden die drei durch (2.1.22) definierten Matrizen \mathfrak{J}_j eine Basis für die infinitesimalen Drehungen.

¹Sophus Lie (1842-1899), norwegischer Mathematiker

²Die Vorzeichenwahl der \mathfrak{J}_j ist willkürlich. Wir wählen die Bezeichnungen dieser infinitesimalen Generatoren sowie die Vorzeichen bereits hier so, wie es später auch in der Quantentheorie der üblichen Konvention entspricht.

Mit Matrizen können wir aber noch weitere Operationen ausführen, nämlich die Matrizenmultiplikation. Die Multiplikation zweier \mathfrak{J} -Matrizen führt aber i.a. aus dem Vektorraum der infinitesimalen Drehungen heraus (*Übung*). Es stellt sich allerdings heraus, daß in solchen Fällen stets der **Kommutator** zweier infinitesimaler Drehungen wieder eine infinitesimale Drehung ergibt. Freilich müssen wir dazu die infinitesimalen Drehungen in höherer als linearer Ordnung in den Drehvektoren $\delta\vec{\phi}$ entwickeln. Es gilt nämlich offenbar

$$\begin{aligned} [\hat{R}(\delta\vec{\phi}_2), \hat{R}(\delta\vec{\phi}_1)] &= (\mathbb{1}_3 + i\delta\phi_{1j}\mathfrak{J}_j)(\mathbb{1}_3 + i\delta\phi_{2k}\mathfrak{J}_k) - (\mathbb{1}_3 + i\delta\phi_{2k}\mathfrak{J}_k)(\mathbb{1}_3 + i\delta\phi_{1j}\mathfrak{J}_j) \\ &= -\delta\phi_{1j}\delta\phi_{2j}[\mathfrak{J}_j, \mathfrak{J}_k] \stackrel{!}{=} i\delta\phi_{3l}\mathfrak{J}_l. \end{aligned} \quad (2.1.24)$$

Wir müssen also zeigen, daß es Zahlen f_{cab} gibt, so daß

$$[\mathfrak{J}_a, \mathfrak{J}_b] = if_{cab}\mathfrak{J}_c \quad (2.1.25)$$

gilt. Dazu berechnen wir den Kommutator aufgrund der Definition (2.1.23), indem wir die Matrizen in Komponenten ausschreiben

$$\begin{aligned} [\mathfrak{J}_a, \mathfrak{J}_b]_{jl} &= -(\epsilon_{ajk}\epsilon_{bkl} - \epsilon_{bjk}\epsilon_{akl}) = -(\delta_{aj}\delta_{bl} - \delta_{bj}\delta_{al}) \\ &\stackrel{!}{=} if_{cab}(\mathfrak{J}_c)_{jl} = f_{cab}\epsilon_{jcl} = -f_{cab}\epsilon_{cjl}. \end{aligned} \quad (2.1.26)$$

Daraus ergibt sich

$$[\mathfrak{J}_a, \mathfrak{J}_b] = i\mathfrak{J}_c f_{cab} \quad \text{mit} \quad f_{cab} = \epsilon_{cab}. \quad (2.1.27)$$

Die Kommutatoren zweier beliebiger infinitesimaler Rotationen lassen sich also wieder durch solche infinitesimalen Rotationen schreiben, d.h. der Vektorraum ist abgeschlossen unter der Kommutatoroperation. Bezeichnen wir nun mit Frakturbuchstaben $\mathfrak{a} = \vec{a} \cdot \vec{t}$ eine beliebige solche infinitesimale Transformation, so gilt für irgendwelche drei solcher Elemente die **Jacobi-Identität**

$$[[\mathfrak{a}, \mathfrak{b}], \mathfrak{c}] + [[\mathfrak{b}, \mathfrak{c}], \mathfrak{a}] + [[\mathfrak{c}, \mathfrak{a}], \mathfrak{b}] = 0. \quad (2.1.28)$$

Man bezeichnet einen Vektorraum \mathfrak{L} , auf dem ein antisymmetrisches Produkt $[\cdot, \cdot]: \mathfrak{L} \rightarrow \mathfrak{L}$, welches für irgendwelche drei Elemente $\mathfrak{a}, \mathfrak{b}, \mathfrak{c} \in \mathfrak{L}$ die Jacobi-Identität (2.1.28) erfüllt, als **Lie-Algebra**. Eine Lie-Algebra ist im wesentlichen durch ihre Strukturkonstanten bzgl. irgendeiner Basis definiert.

Wir können nun umgekehrt aus den infinitesimalen Drehungen wieder endliche Drehungen gewinnen, indem wir nur hinreichend oft eine infinitesimale Drehung ausführen. Betrachten wir dazu zunächst Drehungen um eine feste Achse, die durch den Einheitsvektor \vec{n} vorgegeben ist. Für zwei Drehungen um eine vorgegebene feste Achse gilt nämlich

$$\hat{R}(\phi_2\vec{n})\hat{R}(\phi_1\vec{n}) = \hat{R}[(\phi_1 + \phi_2)\vec{n}]. \quad (2.1.29)$$

Dies zeigt man unmittelbar durch Hintereinanderausführung der beiden Drehungen gemäß (2.1.8) und Anwendung der Additionstheoreme für Cosinus und Sinus. Offenbar bilden also Drehungen um eine feste Achse eine Abelsche einparametrische Untergruppe, wobei sich die Parameter (in unserem Falle die Drehwinkel ϕ_1 und ϕ_2) bei einer Hintereinanderausführung addieren. Man nennt eine solche Untergruppe einer Lie-Gruppe auch kurz eine **Einparametergruppe**.

Nun können wir aber wegen (2.1.30) offenbar

$$\hat{R}(\phi\vec{n}) = \left[\hat{R}\left(\frac{\phi}{N}\vec{n}\right) \right]^N \quad \text{mit} \quad N \in \mathbb{N} \quad (2.1.30)$$

schreiben. Für $N \gg 1$ können wir die Drehung in den eckigen Klammern durch eine infinitesimale Drehung approximieren, wobei wir nur Glieder bis zur Ordnung ϕ/N mitnehmen müssen, d.h. es gilt

$$\hat{R}(\phi\vec{n}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\mathbb{1}_3 + i\vec{n} \cdot \vec{\mathcal{J}} \frac{\phi}{N} \right]^N = \exp(i\phi\vec{n} \cdot \vec{\mathcal{J}}). \quad (2.1.31)$$

Man kann durch direkte Rechnung über die Reihenentwicklung der rechts stehenden Matrix-Exponential-Abbildung zeigen, daß diese Überlegung tatsächlich richtig ist.

Eine andere Herleitung desselben Ergebnisses erhält man, indem man zunächst die Drehungen in eine feste Richtung \vec{n} nach dem Drehwinkel ableitet. Wegen (2.1.29) gilt nämlich

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\phi} \hat{R}(\phi\vec{n}) &= \lim_{\Delta\phi \rightarrow 0} \frac{D[(\phi + \Delta\phi)\vec{n}] - \hat{R}(\phi\vec{n})}{\Delta\phi} = \hat{R}(\phi\vec{n}) \lim_{\Delta\phi \rightarrow 0} \frac{\hat{R}(\Delta\phi\vec{n}) - \mathbb{1}_3}{\Delta\phi} \\ &= \lim_{\Delta\phi \rightarrow 0} \frac{\Delta\phi i\vec{n} \cdot \vec{\mathcal{J}} + \mathcal{O}(\Delta\phi^2)}{\Delta\phi} \hat{R}(\phi\vec{n}) = i\vec{n} \cdot \vec{\mathcal{J}} \hat{R}(\phi\vec{n}). \end{aligned} \quad (2.1.32)$$

Liest man dies als Differentialgleichung für $\hat{R}(\phi\vec{n})$ und berücksichtigt die Anfangsbedingung $\hat{R}(0) = \mathbb{1}_3$, erhält man wieder (2.1.31). Man erhält also die Einparameteruntergruppen einer durch Matrizenabbildung realisierten Liegruppe aus deren Liealgebra durch die Matrix-Exponential-Abbildung. Man nennt daher die Lie-Algebra Elemente $\mathfrak{a} \in \mathfrak{L}$ auch die „infinitesimalen Erzeugenden“ der entsprechenden Gruppenoperationen.

Bemerkung: Für die Drehgruppe haben wir eben gesehen, daß man überhaupt die ganze Gruppe durch die Matrix-Exponential-Abbildung aus Lie-Algebra-Elementen zurückgewinnen kann. Dies ist bei allgemeineren Liegruppen nicht mehr unbedingt der Fall.

2.2 Hamiltonsche kanonische Mechanik

In diesem Kapitel erinnern wir in aller Kürze an die Formulierung der klassischen Mechanik von Punktteilchen mit Hilfe des **Hamiltonschen Prinzips der kleinsten Wirkung** in seiner Hamiltonschen (erweiterten) Form.

Die Wirkung für einen Massenpunkt wird zunächst über die **Lagrange-Funktion** $L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t)$ als Funktional der Trajektorien im Konfigurationsraum definiert:

$$A[\vec{x}] = \int_{t_1}^{t_2} dt L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t). \quad (2.2.1)$$

Die von dem Teilchen tatsächlich durchlaufene Trajektorie ergibt sich aus dem **Prinzip der kleinsten Wirkung**, demzufolge das Wirkungsfunktional entlang dieser Trajektorie extremal (bzw. zumindest stationär) sein muß, wobei die Endpunkte der Bahn zu den Zeitpunkten t_1 und t_2 festzuhalten sind:

$$\delta A[\vec{x}] = 0 \quad \text{unter der Nebenbedingung} \quad \delta \vec{x}(t_1) = \delta \vec{x}(t_2) = 0. \quad (2.2.2)$$

Führt man die Variation aus, erhält man

$$\delta A = \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\delta \vec{x} \frac{\partial L}{\partial \vec{x}} + \delta \dot{\vec{x}} \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{x}}} \right] \stackrel{!}{=} 0. \quad (2.2.3)$$

Da beim Hamiltonschen Prinzip die Zeit nicht variiert wird, gilt $\delta \dot{\vec{x}} = d/dt(\delta \vec{x})$, und durch partielle Integration folgt unter den Randbedingungen in (2.2.2)

$$\delta A = \int_{t_1}^{t_2} dt \delta \vec{x} \left[\frac{\partial L}{\partial \vec{x}} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{x}}} \right] \stackrel{!}{=} 0. \quad (2.2.4)$$

Da wir nun für $\delta \vec{x}$ beliebige hinreichend glatte Funktionen einsetzen dürfen, folgt aus dem Verschwinden der Variation des Wirkungsfunktionals wegen (2.2.4) das Verschwinden der eckigen Klammer unter dem Integral und also die **Euler-Lagrange-Gleichungen**

$$\frac{\partial L}{\partial \vec{x}} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{x}}} \stackrel{!}{=} 0. \quad (2.2.5)$$

Setzen wir für ein Newtonsches Partikelchen unter dem Einfluß eines äußeren Potentials die Lagrange-Funktion

$$L(x, \dot{x}, t) = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(t, \vec{x}). \quad (2.2.6)$$

an, ergeben die Euler-Lagrange-Gleichungen in der Tat die **Newtonsche Bewegungsgleichung**

$$m \ddot{\vec{x}} = - \frac{\partial V}{\partial \vec{x}} := \vec{F}. \quad (2.2.7)$$

Für das folgende ist allerdings die **Hamiltonsche Formulierung** im **Phasenraum** zweckmäßiger. Dazu definieren wir die zu den Konfigurationsvariablen \vec{x} gehörigen **kanonisch konjugierten Impulse**

$$\vec{p} := \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{x}}} \quad (2.2.8)$$

und die **Hamilton-Funktion** als **Legendre-Transformierte** der Lagrangefunktion bzgl. \vec{p} :

$$H(\vec{x}, \vec{p}, t) = \vec{p} \cdot \dot{\vec{x}} - L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t). \quad (2.2.9)$$

Dabei sind in der Lagrangefunktion die Geschwindigkeiten $\dot{\vec{x}}$ durch die kanonischen Impulse \vec{p} auszudrücken. Die Wirkung wird dann zu einem Funktional für **Phasenraumtrajektorien** $[\vec{x}(t), \vec{p}(t)]$,

$$A[\vec{x}, \vec{p}] = \int_{t_1}^{t_2} dt [\vec{p} \cdot \dot{\vec{x}} - H(\vec{x}, \vec{p}, t)]. \quad (2.2.10)$$

Das **erweiterte Hamiltonsche Prinzip** besagt dann, daß sich die tatsächlich durchlaufene Phasenraumtrajektorie des Teilchens aus der Stationarität unter unabhängigen Variationen $\delta \vec{x}$, $\delta \vec{p}$ mit den Randbedingungen $\delta \vec{x}(t_1) = \delta \vec{x}(t_2) = 0$ ergibt³.

Führen wir die Variation aus, ergeben sich die **Hamiltonschen kanonischen Gleichungen** (*Übung!*)

$$\dot{\vec{x}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}, \quad \dot{\vec{p}} = - \frac{\partial H}{\partial \vec{x}}. \quad (2.2.11)$$

Daß diese in der Tat zu den Euler-Lagrange-Gleichungen äquivalent sind, ergibt sich direkt durch Bildung des totalen Differentials von (2.2.9):

$$dH = d\vec{p} \cdot \dot{\vec{x}} - d\vec{x} \cdot \frac{\partial L}{\partial \vec{x}} - dt \frac{\partial L}{\partial t} = d\vec{p} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} + d\vec{x} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{x}} + dt \frac{\partial H}{\partial t}. \quad (2.2.12)$$

³Bemerkung: Die $\delta \vec{p}$ werden frei variiert, ohne spezielle Randbedingungen zu verlangen!

Dabei haben wir von der Definition der kanonisch konjugierten Impulse (2.2.8) Gebrauch gemacht. Ein Vergleich der Differentiale ergibt

$$\dot{\vec{x}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}, \quad \frac{\partial L}{\partial \vec{x}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{x}}. \quad (2.2.13)$$

Die erste Gleichung ist identisch mit der ersten Hamiltonschen Gleichung in (2.2.11). Gelten dann für die Trajektorie die Lagrangegleichungen folgt zusammen mit (2.2.8) auch die zweite Hamiltonsche Gleichung.

Der Vorteil der Hamiltonschen Formulierung liegt im Zusammenhang mit den Symmetriebetrachtungen und schließlich der Analogie zur Quantentheorie in folgender Beobachtung. Betrachten wir eine beliebige Funktion $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, wobei Ω den durch (\vec{x}, \vec{p}) parametrisierten sechsdimensionalen **Phasenraum** bezeichnet, so folgt für Trajektorien, die den Hamiltonschen kanonischen Gleichungen genügen,

$$\frac{d}{dt}f(\vec{x}, \vec{p}) = \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} \cdot \dot{\vec{x}} + \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} \cdot \dot{\vec{p}} \stackrel{(2.2.11)}{=} \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} - \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{x}} =: \{f, H\}_{\text{pb}}. \quad (2.2.14)$$

Dabei definieren wir die **Poisson-Klammer** für zwei beliebige Phasenraumfunktionen $f, g : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ durch

$$\{f, g\}_{\text{pb}} = \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} \cdot \frac{\partial g}{\partial \vec{p}} - \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{\partial g}{\partial \vec{x}}. \quad (2.2.15)$$

Es ist nun entscheidend, daß die Phasenraumfunktionen mit der Poisson-Klammer eine **Lie-Algebra** bilden. Es ist offensichtlich, daß die Poisson-Klammer linear in beiden Argumenten ist und daß sie antisymmetrisch ist, d.h. daß

$$\{f, g\}_{\text{pb}} = -\{g, f\}_{\text{pb}} \quad (2.2.16)$$

gilt. Auch der Nachweis der Jacobiidentität

$$\{\{f, g\}_{\text{pb}}, h\}_{\text{pb}} + \{\{g, h\}_{\text{pb}}, f\}_{\text{pb}} + \{\{h, f\}_{\text{pb}}, g\}_{\text{pb}} = 0 \quad (2.2.17)$$

ist durch Nachrechnen unter Verwendung der Definition (2.2.15) zu führen, wenngleich dies mit etwas Schreibarbeit verbunden ist (*Übung!*).

2.3 Kanonische Transformationen

Die kanonischen Transformationen sind umkehrbar eindeutige Funktionen $\mathbb{R} \times \Omega \rightarrow \Omega$

$$\vec{x} = \vec{x}(t, \vec{X}, \vec{P}), \quad \vec{p} = \vec{p}(t, \vec{X}, \vec{P}), \quad (2.3.1)$$

die die Eigenschaft haben, daß sie die Struktur der Hamiltonschen kanonischen Gleichungen (2.2.13) invariant lassen. Um diese Eigenschaft genauer zu charakterisieren und die Form des Hamilton-Operators in den neuen Koordinaten $H'(t, \vec{X}, \vec{P})$ zu erhalten, ist es am bequemsten, die Invarianz der Variation der Wirkung zu verlangen. Dazu muß in

$$I[\vec{X}, \vec{P}] - I[\vec{x}, \vec{p}] = \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\dot{\vec{X}} \cdot \vec{P} - H'(t, \vec{X}, \vec{P}) - \dot{\vec{x}} \cdot \vec{p} + H(t, \vec{x}, \vec{p}) \right] \quad (2.3.2)$$

der Integrand in der eckigen Klammer offenbar die **totale Zeitableitung** einer Funktion von $\vec{x}(t)$ und $\vec{X}(t)$ (sowie evtl. explizit von t) allein sein, weil nur dann die Variation aufgrund der Nebenbedingungen $\delta q(t_1) = \delta Q(t_1) = \delta q(t_2) = \delta Q(t_2) = 0$ identisch verschwindet, d.h. es muß gelten

$$\begin{aligned} \dot{\vec{X}} \cdot \vec{P} - H'(t, \vec{X}, \vec{P}) - \dot{\vec{x}} \cdot \vec{p} + H(t, \vec{x}, \vec{p}) &= -\frac{d}{dt} f(t, \vec{x}, \vec{X}) \\ &= -\left[\dot{\vec{x}} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} + \dot{\vec{X}} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{X}} + \frac{\partial}{\partial t} \right] f(t, \vec{x}, \vec{X}). \end{aligned} \quad (2.3.3)$$

Dabei bezieht sich die partielle Zeitableitung allein auf die explizite Zeitabhängigkeit von f . Durch Vergleich der Koeffizienten vor $\dot{\vec{X}}$ und $\dot{\vec{x}}$ finden wir schließlich

$$\begin{aligned} \vec{P} &= -\frac{\partial}{\partial \vec{X}} f(t, \vec{x}, \vec{X}), \\ \vec{p} &= +\frac{\partial}{\partial \vec{x}} f(t, \vec{x}, \vec{X}), \\ H'(t, \vec{X}, \vec{P}) &= H(t, \vec{X}, \vec{P}) + \frac{\partial}{\partial t} f(t, \vec{x}, \vec{X}). \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

Gibt man also umgekehrt irgendeine beliebige Funktion $f(\vec{x}, \vec{X}, t)$ vor, so kann man sich vermöge (2.3.4) die fehlenden Variablen \vec{P} und \vec{p} sowie die auf die neuen Phasenraumkoordinaten \vec{X}, \vec{P} transformierte Hamiltonfunktion verschaffen, so daß die Bewegungsgleichungen in den neuen Koordinaten und mit der neuen Hamiltonfunktion wieder durch die kanonischen Hamiltonschen Gleichungen gegeben sind. Solche Transformationen nennen wir **kanonische Transformationen**, weil sie den kanonischen Hamiltonformalismus forminvariant lassen. Man nennt die Funktion f in (2.3.4) in diesem Zusammenhang auch die **Erzeugende der kanonischen Transformation**.

Man kann sich freilich durch direktes Nachrechnen der Ableitungen vermöge der Kettenregel auch direkt davon überzeugen, daß durch die Wahl der alten und neuen Koordinaten vermöge (2.3.4) tatsächlich die kanonischen Gleichungen in den neuen und alten Variablen äquivalent sind (*Übung!*).

Es ist klar, daß wir die Symmetrietransformationen der Galileigruppe innerhalb der Hamiltonschen Formulierung der kanonischen Mechanik durch solche kanonischen Transformationen darstellen müssen. Wie wir gleich sehen werden, ist es für diesen Zweck günstiger, die erzeugende Funktion durch eine willkürlich vorgegebene Funktion der Form $g(\vec{x}, \vec{P}, t)$ festzulegen. Damit das totale Differential von f wieder nur von $d\vec{x}$ und $d\vec{X}$ abhängt, müssen wir eine **Legendre-Transformation** der Gestalt

$$f(\vec{x}, \vec{X}, t) = g(\vec{x}, \vec{P}, t) - \vec{X} \cdot \vec{P} \quad (2.3.5)$$

durchführen. In der Tat ergibt sich dann

$$\left[d\vec{x} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} + d\vec{X} \frac{\partial}{\partial \vec{X}} + dt \frac{\partial}{\partial t} \right] f = \left[d\vec{x} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} + d\vec{P} \frac{\partial}{\partial \vec{P}} + dt \frac{\partial}{\partial t} \right] g - d\vec{X} \cdot \vec{P} - \vec{X} \cdot d\vec{P} \quad (2.3.6)$$

Verwendet man auf der linken Seite die Beziehungen (2.3.4) und vergleicht die Koeffizienten der Differentiale mit denen auf der rechten Seite, erhalten wir

$$\begin{aligned} \vec{X} &= \frac{\partial}{\partial \vec{P}} g(\vec{x}, \vec{P}, t), \\ \vec{p} &= \frac{\partial}{\partial \vec{x}} g(\vec{x}, \vec{P}, t), \\ H'(t, \vec{X}, \vec{P}) &= H(t, \vec{x}, \vec{p}) + \frac{\partial}{\partial t} g(\vec{x}, \vec{P}, t). \end{aligned} \quad (2.3.7)$$

2.4 Das Noether-Theorem (klassisch)

Wir wollen nun die im vorigen Abschnitt entwickelte Theorie der kanonischen Transformationen auf Symmetrien anwenden. Für das folgende genügt es, **infinitesimale Symmetrietransformationen** zu betrachten. Wir untersuchen infinitesimale Änderungen der Phasenraumvariablen und berücksichtigen zugleich eine Umparametrisierung der Zeit:

$$\vec{X} = \vec{x} + \delta \vec{x}, \quad \vec{P} = \vec{p} + \delta \vec{p}, \quad t' = t + \delta t. \quad (2.4.1)$$

Damit die Transformation bzgl. der Phasenraumvariablen eine kanonische Transformation ist, stellen wir sie mit einer kanonischen Transformation dar. Wir setzen weiter voraus, die Transformation sei durch eine Einparametergruppe gegeben wie Abschnitt 2.1 beschrieben. Den entsprechenden Parameter nennen wir α . Eine infinitesimale Transformation kann dann offenbar durch eine erzeugende Funktion der Gestalt

$$g(\vec{x}, \vec{P}, t) = \vec{x} \cdot \vec{P} + \delta \alpha G(\vec{x}, \vec{P}, t) \quad (2.4.2)$$

beschrieben werden. In der Tat folgt zunächst aus (2.3.7)

$$\vec{X} = \vec{x} + \delta \alpha \frac{\partial}{\partial \vec{P}} G(\vec{x}, \vec{P}, t). \quad (2.4.3)$$

Wir berücksichtigen nun nur Terme in erster Ordnung in $\delta \alpha$, so daß wir im zweiten Term für \vec{P} auch \vec{p} einsetzen können, d.h. es ist

$$\vec{X} = \frac{\partial}{\partial \vec{P}} g = \vec{x} + \delta \alpha \frac{\partial}{\partial \vec{p}} G(\vec{x}, \vec{p}, t) + \mathcal{O}(\delta \alpha^2). \quad (2.4.4)$$

Für die kanonischen Impulse finden wir gemäß (2.3.7)

$$\vec{p} = \frac{\partial}{\partial \vec{x}} g = \vec{P} + \delta \alpha \frac{\partial}{\partial \vec{x}} G(\vec{x}, \vec{p}, t) + \mathcal{O}(\delta \alpha^2). \quad (2.4.5)$$

Bis auf Größen der Ordnung $\mathcal{O}(\delta \alpha^2)$ ist also

$$\vec{P} = \vec{p} - \delta \alpha \frac{\partial}{\partial \vec{x}} G(\vec{x}, \vec{p}, t). \quad (2.4.6)$$

Eine infinitesimale Symmetrietransformation liegt nun definitionsgemäß genau dann vor, wenn

$$\delta H = \left[\delta \vec{x} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} + \delta \vec{p} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}} + \delta t \frac{\partial}{\partial t} \right] H = 0 \quad (2.4.7)$$

ist. Setzen wir darin (2.4.4) und (2.4.6) ein, finden wir

$$\delta H = \delta \alpha \left[\frac{\partial H}{\partial \vec{x}} \cdot \frac{\partial G}{\partial \vec{p}} - \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{\partial G}{\partial \vec{x}} \right] + \delta t \frac{\partial H}{\partial t} = 0. \quad (2.4.8)$$

Dies können wir definitionsgemäß durch die Poissonklammer gemäß (2.2.15) ausdrücken

$$\delta H = \delta \alpha \{H, G\}_{\text{pb}} + \delta t \frac{\partial H}{\partial t} = 0. \quad (2.4.9)$$

Andererseits läßt sich aber die Änderung von H aufgrund der kanonischen Transformation wegen (2.3.7) auch durch

$$\delta H = \delta \alpha \frac{\partial G}{\partial t} + \delta t \frac{\partial H}{\partial t} = 0 \quad (2.4.10)$$

schreiben. Substituieren wir also $\delta t \frac{\partial H}{\partial t}$ in (2.4.9), finden wir

$$\delta \alpha \left[\{H, G\}_{\text{pb}} - \frac{\partial G}{\partial t} \right] = -\delta \alpha \left[\{G, H\}_{\text{pb}} + \frac{\partial G}{\partial t} \right] = 0. \quad (2.4.11)$$

Wegen der (2.2.4) folgt dann **für die tatsächliche Phasenraumtrajektorie der Teilchen**

$$\frac{d}{dt} G(\vec{x}, \vec{p}, t) = 0. \quad (2.4.12)$$

Dies ist das **Noether-Theorem**⁴: Die kanonische Erzeugende jeder Einteilchensymmetriegruppe der Hamilton-Funktion ist eine **Erhaltungsgröße** der Bewegungsgleichungen. Aus der obigen Herleitung ist klar, daß auch die Umkehrung gilt: Jede Erhaltungsgröße der Bewegungsgleichungen stellt die kanonische Erzeugende einer Einparametersymmetriegruppe dar.

Formal haben also die kanonischen Transformationen eine sehr große Ähnlichkeit mit dem Lie-Gruppenformalismus aus Abschnitt 2.1: Die Lie-Algebra ist dabei durch den Vektorraum der Phasenraumfunktionen mit der Poisson-Klammer als Lie-Produkt gegeben. Die entsprechende endliche Gruppe können wir für Transformationen, bei denen die Zeit nicht transformiert wird, formal mit Hilfe der durch den Generator erzeugten **Lie-Ableitung** finden. Für die infinitesimale Transformation einer beliebigen Phasenraumfunktion $f(\vec{x}, \vec{p}, t)$ folgt wie oben für die Hamiltonfunktion hergeleitet

$$\delta f = \delta \alpha \{f, G\}_{\text{pb}}. \quad (2.4.13)$$

Betrachten wir die endliche Transformation der Phasenraumkoordinaten als Funktion des Einparametergruppenparameters α folgt daraus

$$\frac{d}{d\alpha} f[\vec{x}(\alpha), \vec{p}(\alpha), t] = \{f, G\}_{\text{pb}} =: i\mathcal{L}_G f[\vec{x}(\alpha), \vec{p}(\alpha), t]. \quad (2.4.14)$$

Da G voraussetzungsgemäß selbst nicht von α abhängt, folgt als formale Lösung

$$f[\vec{x}(\alpha), \vec{p}(\alpha), t] = \exp(i\alpha \mathcal{L}_G) f[\vec{x}, \vec{p}, t]. \quad (2.4.15)$$

Wir wenden nun das Noether-Theorem auf die Einparameteruntergruppen der Galileitransformationen an.

Zeittranslationen: Für zeitliche Translationen ist

$$\delta \vec{x} = \delta \alpha \dot{\vec{x}}, \quad \delta \vec{p} = \delta \alpha \dot{\vec{p}}, \quad \delta t = \delta \alpha. \quad (2.4.16)$$

Damit dies eine Symmetrietransformation der Hamilton-Funktion ist, darf diese gemäß (2.4.9) nicht explizit von der Zeit abhängen. Da die zeitliche Änderung der Phasenraumvariablen \vec{x} und \vec{p} durch die Hamiltonfunktion gegeben ist, ist die zu zeitlichen Translationen gehörige kanonische Erzeugende die Hamilton-Funktion und diese ist zeitlich erhalten, wenn sie nicht explizit von der Zeit abhängt. Dies

⁴Amalie (Emmy) Noether, 1882-1935, deutsche Mathematikerin

ist wegen (2.2.14) und der Antisymmetrie der Poisson-Klammer trivial, denn falls H nicht explizit von der Zeit abhängt, ist

$$\frac{d}{dt}H(\vec{x}, \vec{p}) = \{H, H\}_{\text{pb}} \equiv 0. \quad (2.4.17)$$

Die zur zeitlichen Translationsinvarianz gehörige Erhaltungsgröße nennen wir **Energie**, so daß diese folglich durch die Hamiltonfunktion gegeben ist.

Räumliche Translationen: Angenommen, die Hamilton-Funktion sei unter räumlichen Translationen in der Richtung \vec{n} invariant. Die Symmetrietransformation lautet

$$\delta \vec{x} = -\vec{n} \delta \alpha, \quad \delta \vec{p} = 0, \quad \delta t = 0. \quad (2.4.18)$$

Aus (2.4.3) und (2.4.6) folgt für die Erzeugendenfunktion

$$\frac{\partial G}{\partial \vec{x}} = 0, \quad \frac{\partial G}{\partial \vec{p}} = \vec{n}. \quad (2.4.19)$$

Die erzeugende Funktion ist also (bis auf eine irrelevante Konstante)

$$G(\vec{x}, \vec{p}) = \vec{n} \cdot \vec{p}, \quad (2.4.20)$$

d.h. die dazugehörige Erhaltungsgröße ist die **Komponente des kanonischen Impulses** in Richtung von \vec{n} . Die Symmetrie liegt gemäß (2.4.9) tatsächlich vor, wenn die entsprechende Richtungsableitung

$$\{H, G\}_{\text{pb}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{x}} \cdot \frac{\partial G}{\partial \vec{p}} - \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{\partial G}{\partial \vec{x}} = \vec{n} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{x}} \quad (2.4.21)$$

der Hamilton-Funktion nach den Ortskoordinaten verschwindet. Dies ist auch anschaulich klar: Translationsinvarianz unter Verschiebungen in Richtung von \vec{n} bedeutet, daß die Hamilton-Funktion nicht von der entsprechenden Ortskomponente abhängt.

Drehungen: Die infinitesimalen Drehungen um eine Drehachse in Richtung von \vec{n} sind gemäß (2.1.21) durch

$$\delta \vec{x} = -\delta \alpha \vec{n} \times \vec{x} \stackrel{!}{=} -\delta \alpha \frac{\partial G}{\partial \vec{p}}, \quad \delta \vec{p} = -\delta \alpha \vec{n} \times \vec{p} \stackrel{!}{=} \delta \alpha \frac{\partial G}{\partial \vec{x}}. \quad (2.4.22)$$

gegeben. Es ist also

$$\frac{\partial G}{\partial p_j} = \epsilon_{jkl} n_k q_l \Rightarrow G(\vec{x}, \vec{p}) = \epsilon_{jkl} n_k q_l p_j = \vec{n} \cdot (\vec{x} \times \vec{p}) + \tilde{G}(\vec{x}). \quad (2.4.23)$$

Leiten wir dies nach x_l ab, erhalten wir

$$\epsilon_{jkl} n_k p_j + \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_l} \stackrel{!}{=} -\epsilon_{lkj} n_k p_j = +\epsilon_{jkl} n_k p_j \Rightarrow \tilde{G}(\vec{x}) = \text{const.} \quad (2.4.24)$$

Die Konstante ist wieder physikalisch irrelevant, so daß also

$$G(\vec{x}, \vec{p}) = \vec{n} \cdot (\vec{x} \times \vec{p}) =: \vec{n} \cdot \vec{L} \quad (2.4.25)$$

ggf. die Erhaltungsgröße die durch \vec{n} gegebene Komponente des **Drehimpulses** $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$ ist. Eine einfache Rechnung (*Übung*) ergibt gemäß (2.4.9), daß die Symmetrie vorliegt, wenn

$$\vec{n} \cdot \left(\vec{x} \times \frac{\partial H}{\partial \vec{x}} + \vec{p} \times \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \right) = 0. \quad (2.4.26)$$

Falls wir eine Hamilton-Funktion der einfachsten Form

$$H(\vec{x}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \quad (2.4.27)$$

vorliegen haben, reduziert sich dies auf die Forderung, daß

$$\vec{n} \cdot [\vec{x} \times \vec{\nabla} V(\vec{x})] = -\vec{n} \cdot (\vec{x} \times \vec{F}) = 0 \quad (2.4.28)$$

ist, d.h. daß die Komponente des **Drehmoments** in Richtung der Drehachse verschwindet. Damit die Hamilton-Funktion dieser Form überhaupt unter allen Drehungen invariant ist, muß diese Forderung für alle \vec{n} gelten, und es muß $\vec{M} = \vec{x} \times \vec{F} = 0$ gelten. Dies ist offenbar genau dann erfüllt, wenn $\vec{F} \propto \vec{x}$ ist. Das bedeutet, daß das Potential eine Funktion von $|\vec{x}|$ sein muß, denn nur dann ist

$$\vec{\nabla} V(|\vec{x}|) = V'(|\vec{x}|) \vec{\nabla} |\vec{x}| = V'(|\vec{x}|) \vec{x} / |\vec{x}| \propto \vec{x}. \quad (2.4.29)$$

Dies ist ein typisches Beispiel dafür, wie Symmetrieforderungen die mögliche Form der Hamiltonfunktion einschränken können.

Galilei-Boosts: Betrachten wir schließlich noch einen Galileiboost in Richtung von \vec{n} . Gemäß (2.1.1) lautet die infinitesimale Transformation für ein Teilchen in einem äußeren Potential

$$\delta \vec{x} = -\delta w \vec{n} t, \quad \delta \vec{p} = -\delta w m \vec{n}, \quad \delta t = 0. \quad (2.4.30)$$

Es ergibt sich daraus für die Erzeugende der kanonischen Transformation

$$G(\vec{x}, \vec{p}, t) = \vec{n} \cdot (m \vec{x} - \vec{p} t). \quad (2.4.31)$$

Damit dies eine Symmetrie ist, muß gemäß (2.4.11) für eine Hamilton-Funktion in der Gestalt (2.4.27)

$$\vec{n} \cdot \left(m \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} - t \frac{\partial H}{\partial \vec{x}} - \vec{p} \right) = -\vec{n} \cdot \left(\frac{\partial V}{\partial \vec{x}} \right) = 0 \quad (2.4.32)$$

gelten. Das Potential muß also von der Ortskomponente in Richtung von \vec{n} unabhängig sein, d.h. es genügt für die Galilei-Boost-Invarianz bereits die Translationsinvarianz in diese Richtung. In diesem Fall ist wegen (2.4.20) also automatisch auch $\vec{p} = \text{const}$, und der entsprechende Erhaltungssatz besagt wegen (2.4.31), daß

$$\vec{n} \cdot \vec{x} = \vec{n} \cdot \left(\vec{x}_0 + \frac{\vec{p}}{m} t \right) \quad (2.4.33)$$

mit einer Integrationskonstanten \vec{x}_0 gilt.

Verlangt man nun überhaupt Invarianz unter der vollen Galilei-Gruppe, so ergibt sich für ein einzelnes Teilchen, daß $V = \text{const}$ sein muß, da in alle Richtungen räumliche Translationsinvarianz herrschen muß. Aus der zeitlichen Translationsinvarianz folgt weiter, daß H nicht explizit von der Zeit abhängen darf. Es ist also $H = H(\vec{p})$. Aus der Rotationsinvarianz folgt unter der Voraussetzung, daß \vec{p} sich unter Drehungen wie ein Vektor verhält, daß H nur vom Betrag von \vec{p} abhängen darf. Schließlich verlangt die Boostinvarianz zusätzlich die Erhaltung der Geschwindigkeit, welche gemäß (2.4.31) $\dot{\vec{x}} = \vec{p}/m$ ist. Andererseits verlangt die eine verbleibende nichttriviale Hamiltonsche kanonische Gleichung, daß

$$\dot{\vec{x}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \stackrel{!}{=} \frac{\vec{p}}{m} \quad (2.4.34)$$

ist, und das lässt sich wiederum aufintegrieren integrieren zu

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \text{const}, \quad (2.4.35)$$

wobei die Integrationskonstante willkürlich ist, da sie in die Bewegungsgleichungen nicht eingeht. Wir haben also aus der Forderung nach **Invarianz unter der vollen Galilei-Gruppe** für ein einzelnes Teilchen die Hamiltonfunktion für ein freies Punktteilchen erhalten.

Für Zweiteilchensysteme folgt aus genau analogen Betrachtungen (*Übung*) die Form

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + V(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|). \quad (2.4.36)$$

Wieder schränkt die Symmetrie unter allgemeinen Galilei-Transformationen die mögliche Form der Hamilton-Funktion stark ein. Das Potential der Zentralkraft für die Wechselwirkungskraft selbst folgt allerdings nicht aus der Galilei-Invarianz. Die konkrete Form der Zentralkräfte ist also im Rahmen der Newtonschen Mechanik eine zusätzliche (empirische!) Information erfordernde Fragestellung, die nicht durch die Galilei-Symmetrie allein entschieden werden kann.

Wir können nun bereits die oben erwähnte Verbindung der Galileigruppe der klassischen Mechanik zur Quantentheorie erahnen: Gelingt es, die infinitesimalen Boosts, raum-zeitlichen Translationen und die Drehungen als Symmetrietransformationen im quantentheoretischen Formalismus darzustellen, erhält man die Kommutatorrelationen der Observablenoperatoren zu Energie, Impuls (raum-zeitliche Translationen), Drehimpuls (Drehungen) und Ortsvektor (Galilei-Boosts). Dabei ergeben sich aus den infinitesimalen Gruppenoperationen die Liealgebra und damit die Kommutatorregeln zwischen den entsprechenden Observablenoperatoren.

Ein Beispiel haben wir in Abschnitt 1.7 anhand der räumlichen Translationen angegeben. Wir wollen diese Betrachtung nun durch eine systematische Untersuchung der Galilei-Gruppe vervollständigen. Wie wir sehen werden, gewinnen wir daraus zum einen die aus QM I bekannte Quantentheorie eines klassischen Punktteilchens als Spezialfall aber auch die wichtige Verallgemeinerung auf **Teilchen mit Spin**.

2.5 Quantentheoretische Formulierung von Symmetrieprinzipien

Um Symmetrieprinzipien für die in den vorigen Abschnitten im Kontext der klassischen Mechanik besprochenen kontinuierlichen Raum-Zeit-Symmetrien in der Quantentheorie zu behandeln, benötigen wir die **Darstellungstheorie von Lie-Gruppen** bzw. **Lie-Algebren** auf dem Raum der **quantenmechanischen Zustände**. Dabei ist es wichtig, daß die Zustandsvektoren immer nur **bis auf einen Phasenfaktor** relevant sind. Es ist daher zur Beschreibung der quantenmechanischen Zustände hinreichend, statt der Zustandsvektoren selbst die entsprechenden **Statistischen Operatoren des reinen Zustands**

$$\mathbf{P}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (2.5.1)$$

zu verwenden. Wie wir in Abschnitt 1.7 gesehen haben, können Symmetrien durch unitäre Operatoren **U** beschrieben werden. Die Statistischen Operatoren und Observablenoperatoren transformieren sich dann gemäß

$$\mathbf{P}'_\psi = \mathbf{U}\mathbf{P}_\psi\mathbf{U}^\dagger, \quad \mathbf{O}' = \mathbf{U}\mathbf{O}\mathbf{U}^\dagger. \quad (2.5.2)$$

Daraus wird aber unmittelbar klar, daß jede unitäre Transformation, die sich von \mathbf{U} nur um einen Phasenfaktor unterscheidet,

$$\mathbf{U}' = \exp(i\varphi)\mathbf{U}, \quad (2.5.3)$$

vollständig äquivalent zu der Realisierung der Symmetrie durch \mathbf{U} ist, denn die Ausdrücke (2.5.2) ändern sich nicht, wenn man statt \mathbf{U} die Transformation \mathbf{U}' verwendet. Es sind also die unitären Transformationen, die Symmetrien beschreiben, nur bis auf einen willkürlichen Phasenfaktor festgelegt.

Betrachtet man genauer, welche Größen gemäß den Postulaten der Quantentheorie (vgl. Abschnitt 1.1) beobachtbaren Aussagen entsprechen, stellt man sogar fest, daß Symmetrietransformationen auch durch **antiunitäre Transformationen** beschrieben werden können. Dabei heißt eine Transformation \mathbf{A} antiunitär, wenn sie **antilinear** ist, d.h. wenn

$$\mathbf{A}(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1^*\mathbf{A}|\psi_1\rangle + \lambda_2^*\mathbf{A}|\psi_2\rangle \quad (2.5.4)$$

gilt. Weiter heißt eine antilineare Abbildung \mathbf{U} **antiunitär**, wenn für Skalarprodukte beliebiger Vektoren

$$\langle \mathbf{U}\psi_1 | \mathbf{U}\psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle^* = \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle \quad (2.5.5)$$

ist.

Nach einem berühmten **Theorem von Wigner** muß jede Symmetrietransformation in der Quantentheorie entweder durch eine unitäre oder eine antiunitäre Transformation dargestellt werden. Den einfachen aber umfangreichen Beweis wollen wir hier nicht führen. Der interessierte Leser sei auf [Bar64] oder [Hee98] verwiesen. Außerdem zeigt sich, daß Symmetrietransformationen, die stetig aus der Identität $\mathbb{1}_{\mathcal{H}}$ hervorgehen, stets durch **unitäre Operatoren** dargestellt werden müssen.

Sei also G eine Lie-Gruppe mit Parametern $\theta = (\theta_a) \in D \subseteq \mathbb{R}^n$, wobei $a \in \{1, 2, \dots, n\}$. Dann definieren wir die Funktion $f : D^2 \rightarrow D$ durch die Forderung

$$\Gamma(\theta_2)\Gamma(\theta_1) = \Gamma[f(\theta_2, \theta_1)]. \quad (2.5.6)$$

Es sei nun $\mathbf{U} : G \rightarrow \mathcal{U}(\mathcal{H})^5$, so daß

$$\mathbf{U}(\Gamma_2\Gamma_1) = \exp[i\Phi(\Gamma_2, \Gamma_1)]\mathbf{U}(\Gamma_2)\mathbf{U}(\Gamma_1) \quad (2.5.7)$$

mit $\Phi(\Gamma_1, \Gamma_2) \in \mathbb{R}$ für alle $\Gamma_1 = \Gamma(\theta_1), \Gamma_2 = \Gamma(\theta_2) \in G$ gilt. Man bezeichnet solch eine Abbildung eine **unitäre Strahldarstellung der Gruppe**. Offensichtlich stellt sie bis auf die quantentheoretisch irrelevanten Phasenfaktoren eine Realisierung der Gruppe durch unitäre Abbildungen auf dem Hilbertraum dar. Falls $\Phi(\Gamma_2, \Gamma_1) \equiv 0$ ist, spricht man von einer **unitären Darstellung der Gruppe**. Oft kann man durch einfache Umdefinition der Phasen der unitären Abbildungen alle $\Phi(\Gamma_2, \Gamma_1)$ zum Verschwinden bringen. Dann ist es bequemer und ohne Beschränkung der Allgemeinheit möglich, direkt mit der dadurch entstehenden Darstellung zu arbeiten. Wie wir sehen werden, ist es für die Galileigruppe nicht möglich, eine für die Quantentheorie adäquate Darstellung zu finden, d.h. man muß eine echte Strahldarstellung betrachten.

Die Analyse der möglichen Strahldarstellungen für Lie-Gruppen wird nun erheblich erleichtert, weil man zunächst die entsprechenden Darstellungen der dazugehörigen Lie-Algebra betrachten kann und dann, zumindest in einer Umgebung der Gruppenidentität, aus diesen durch Exponentiation die dazugehörigen Strahldarstellungen der Gruppe selbst gewinnen können. Im folgenden schreiben wir auch

⁵ $\mathcal{U}(\mathcal{H})$ bezeichnet alle unitären Transformationen des Hilbertraums \mathcal{H}

kurz $\mathbf{U}(\theta)$ für $\mathbf{U}[\Gamma(\theta)]$ und $\Phi(\theta_2, \theta_1)$ für $\Phi[\Gamma(\theta_2), \Gamma(\theta_1)]$. Definitionsgemäß sollen die Parameter so gewählt werden, daß $\Gamma(0) = \mathbb{1}_G$ ist. Dann folgt aus der Beziehung (2.5.6)

$$f(\theta, 0) = f(0, \theta) = \theta. \quad (2.5.8)$$

Daraus folgt für die Entwicklung der Funktion f bis zur zweiten Ordnung in den Gruppenparametern

$$f_a(\theta_2, \theta_1) = \theta_{2a} + \theta_{1a} + C_{abc} \theta_{2b} \theta_{1c} + \dots \quad \text{mit} \quad C_{abc} = \left. \frac{\partial^2 f_a(\theta_2, \theta_2)}{\partial \theta_{2a} \partial \theta_{1b}} \right|_{\theta_1 = \theta_2 = 0}. \quad (2.5.9)$$

Weiter können wir die Phasen einer jeden Transformation $\mathbf{U}(\Gamma)$ so gewählt denken, daß

$$\Phi(\theta_2, 0) = \Phi(0, \theta_1) \equiv 0 \quad (2.5.10)$$

ist. Aus dieser Bedingung folgt dann für die Entwicklung der Phasen

$$\Phi(\theta_2, \theta_1) = \Phi_{ab} \theta_{2a} \theta_{1b} + \dots \quad (2.5.11)$$

(Übung!).

Setzen wir weiter

$$i\tau_a = \left. \frac{\partial \mathbf{U}(\theta)}{\partial \theta_a} \right|_{\theta=0} \quad (2.5.12)$$

und nehmen wir an, daß die Gruppe (zumindest in einer bestimmten Umgebung der Gruppenidentität) **einfach zusammenhängend** ist, so daß für ein gegebenes (endliches) $\theta \in D$ die ganze gerade Verbindungslinie $\lambda\theta$, $\lambda \in [0, 1]$, ebenfalls in D liegt, so können wir dieselben Argumente wie bei der Herleitung von (2.1.31) für die Drehgruppe anwenden und erhalten

$$\mathbf{U}(\theta) = \exp(i\tau_a \theta_a). \quad (2.5.13)$$

Aus der Unitarität der \mathbf{U} folgt dann unmittelbar die Selbstadjungiertheit der τ_a , denn zunächst gilt

$$\mathbf{U}(\theta)\mathbf{U}^\dagger(\theta) = \mathbb{1}_{\mathcal{H}} \Rightarrow \frac{\partial \mathbf{U}(\theta)}{\partial \theta_a} \mathbf{U}^\dagger(\theta) + \mathbf{U}(\theta) \frac{\partial \mathbf{U}^\dagger(\theta)}{\partial \theta_a} = 0. \quad (2.5.14)$$

Setzen wir hierin $\theta = 0$ und verwenden die Definition (2.5.12) der τ_a , folgt in der Tat

$$\tau_a^\dagger = \tau_a. \quad (2.5.15)$$

Nun können wir mit Hilfe von (2.5.9) und (2.5.11) die Strahldarstellungseigenschaft (2.5.7) bis zur zweiten Ordnung in den Gruppenparametern entwickeln. Nach kurzer Rechnung (Übung!) folgt

$$\begin{aligned} & \mathbb{1}_{\mathcal{H}} + i\tau_a (\theta_{2a} + \theta_{1a} + C_{abc} \theta_{2b} \theta_{1c}) \\ & \quad - \frac{1}{2} \tau_b \tau_c (\theta_{2b} \theta_{2c} + \theta_{2b} \theta_{1c} + \theta_{2c} \theta_{1b} + \theta_{1a} \theta_{1b}) + \Phi_{bc} \theta_{2b} \theta_{1c} \mathbb{1}_{\mathcal{H}} \\ \stackrel{!}{=} & \mathbb{1}_{\mathcal{H}} + i\tau_a (\theta_{1a} + \theta_{2a}) - \frac{1}{2} \tau_b \tau_c (\theta_{1b} \theta_{1c} + 2\theta_{2b} \theta_{1c} + \theta_{2b} \theta_{2c}) \end{aligned} \quad (2.5.16)$$

Der Koeffizientenvergleich liefert nach Kürzen der auf beiden Seiten gleichen Terme

$$i\tau_a C_{abc} - \frac{1}{2} \{\tau_b, \tau_c\} + \Phi_{bc} \mathbb{1} = -\tau_b \tau_c. \quad (2.5.17)$$

Vertauschen wir in (2.5.16) θ_1 mit θ_2 , erhalten wir wieder (2.5.17), allerdings mit vertauschten Indizes b und c . Ziehen wir diese Gleichung von (2.5.17) ab, finden wir für die **Kommutatorrelation**

$$[\tau_b, \tau_c] = if_{abc}\tau_a + iC_{bc}\mathbb{1}_{\mathcal{H}}. \quad (2.5.18)$$

Dabei heißen die

$$f_{abc} = C_{acb} - C_{abc} \quad \text{und} \quad C_{bc} = \Phi_{bc} - \Phi_{cb} \quad (2.5.19)$$

die **Strukturkonstanten** bzw. **Zentralladungen** der **Strahldarstellung der Lie-Algebra**. Während die Strukturkonstanten unabhängig von der konkreten Darstellung sind, denn C_{abc} folgt ja gemäß (2.5.6) als eine Eigenschaft der gewählten Parametrisierung der Gruppe, hängen die Zentralladungen von der Darstellung ab.

Die Strukturkonstanten und Zentralladungen gehorchen nun aber noch bestimmten Bedingungen, die sich aus der **Jacobi-Identität**

$$[\tau_a, [\tau_b, \tau_c]] + [\tau_b, [\tau_c, \tau_a]] + [\tau_c, [\tau_a, \tau_b]] = 0 \quad (2.5.20)$$

ergeben, die für beliebige Operatoren τ_a, τ_b und τ_c identisch erfüllt ist (*Übung!*). Verwenden wir nämlich (2.5.18) in (2.5.20) und vergleichen die Koeffizienten, folgt (*Übung!*)

$$f_{ead}f_{dbc} + f_{ebd}f_{dca} + f_{ecd}f_{dab} = 0, \quad (2.5.21)$$

$$C_{ad}f_{dbc} + C_{bd}f_{dca} + C_{cd}f_{dab} = 0. \quad (2.5.22)$$

Da (2.5.21) von den Zentralladungen unabhängig ist, gilt offensichtlich (2.5.22) identisch, wenn

$$C_{ab} = f_{eab}\phi_e \quad \text{mit} \quad \phi_e \in \mathbb{R} \quad (2.5.23)$$

ist. Falls es solche Zahlen ϕ_e für eine gegebene Darstellung tatsächlich gibt, können wir zunächst die Generatoren vermöge

$$\tau'_a = \tau_a + \phi_a \mathbb{1}_{\mathcal{H}} \quad (2.5.24)$$

umdefinieren. Damit haben wir neue Operatoren τ'_a , die eine echte Darstellung der Lie-Algebra bilden, d.h. es gilt (*Übung*)

$$[\tau'_b, \tau'_c] = if_{abc}\tau'_a, \quad (2.5.25)$$

und durch

$$\mathbf{U}'(\theta) = \exp(i\theta_a \tau'_a) = \exp(i\phi_a \theta_a) \exp(i\theta_a \tau_a) = \exp(i\phi_a \theta_a) \mathbf{U}(\theta) \quad (2.5.26)$$

wird (zumindest in einer einfach zusammenhängenden Umgebung der Gruppenidentität) eine zur Strahldarstellung $\mathbf{U}(\theta)$ quantentheoretisch äquivalente **echte unitäre Darstellung** der Gruppe definiert.

Da es einfacher ist, mit echten Darstellungen statt mit Strahldarstellungen zu operieren, werden wir im folgenden möglichst viele Zentralladungen durch einen Ansatz (2.5.24) zu eliminieren versuchen. Wie wir im nächsten Abschnitt sehen werden, gelingt dies für die physikalisch relevanten Strahldarstellungen der Galilei-Gruppe nur teilweise.

2.6 Die Realisierungen der Galilei-Gruppe in der Quantentheorie

Mit den Vorbereitungen des vorigen Abschnitts können wir nun die Analyse der für die Quantentheorie relevanten unitären Strahldarstellungen der Galilei-Gruppe angehen.

Das generelle Vorgehen beim Aufsuchen der unitären Strahldarstellungen einer vorgegebenen Symmetriegruppe besteht darin, zunächst die dazugehörigen Darstellungen der (Strahl-)Lie-Algebren zu finden. Die selbstadjungierten Operatoren der Lie-Algebra bilden dann die **Observablenoperatoren** der entstehenden Quantentheorie. In unserem Fall der **Galilei-Gruppe** gelangen wir dadurch zu den Realisierungen der Observablen Energie, Impuls, Drehimpuls und Schwerpunkt (für ein einzelnes Teilchen also dem Ortsvektor).

Um die möglichen Strahldarstellungen aus den Kommutatorrelationen der Lie-Algebra, die aus der Gruppenstruktur folgen, konkret zu berechnen, werden (verallgemeinerte) Orthonormalbasissysteme aus Eigenvektoren eines möglichen maximalen Satzes kompatibler Operatoren konstruiert und die Wirkung der unitären Gruppentransformationen auf diese Basisvektoren bestimmt. Dieses Programm führen wir nun für die Galilei-Gruppe aus.

Zunächst bestimmen wir die Lie-Klammerrelationen der Galilei-Lie-Algebra. Die Lie-Algebra hat, wie in Abschnitt 2.1 gesehen, zehn Parameter \vec{w} (Boosts), α (zeitliche Translationen), \vec{a} (räumliche Translationen) und $\vec{\varphi}$ (Drehungen). Die Konvention für die Vorzeichen der Operatoren für die infinitesimalen Erzeugenden ist dabei wie folgt festgelegt:

$$\mathbf{U}(\vec{w}, \alpha, \vec{a}, \vec{\varphi}) = \exp(-i\vec{w} \cdot \vec{\mathbf{K}} - i\alpha \mathbf{H} + i\vec{a} \cdot \vec{\mathbf{p}} + i\vec{\varphi} \cdot \vec{\mathbf{J}}). \quad (2.6.1)$$

Verwenden wir (2.1.13) und (2.1.21) für die Darstellung infinitesimaler Transformationen, finden wir für die Entwicklung der Parameter für die Hintereinanderausführung zweier infinitesimaler Galilei-Transformationen $\Gamma_3 = \Gamma_2 \Gamma_1$

$$w_{3j} = w_{1j} + w_{2j} - \epsilon_{jkl} \phi_{2k} w_{1l} + \dots, \quad (2.6.2)$$

$$\alpha_3 = \alpha_1 + \alpha_2, \quad (2.6.3)$$

$$a_{3j} = a_{1j} + a_{2j} - \epsilon_{jkl} \phi_{2k} a_{1l} + w_{2j} \alpha_1, \quad (2.6.4)$$

$$\phi_{3j} = \phi_{1j} + \phi_{2j} - \epsilon_{jkl} \phi_{2k} \phi_{1l} + \dots \quad (2.6.5)$$

Daraus lesen wir durch Vergleich mit der entsprechenden Entwicklung von (2.6.1) mit Hilfe der Definition (2.5.18) die Strukturkonstanten ab. Weiter setzen wir für alle Kommutatoren willkürliche Zentralladungen an, deren Anzahl wir im folgenden durch Elimination mit Hilfe der Jacobidentitäten (2.5.22) möglichst reduzieren wollen. Es folgen also zunächst die Kommutatorrelationen (*Übung!*) mit der allgemeinsten Möglichkeit für das Auftreten von Zentralladungen:

$$[\mathbf{J}_k, \mathbf{J}_l] = i\epsilon_{jkl} \mathbf{J}_j + iC_{kl}^{JJ} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}, \quad (2.6.6)$$

$$[\mathbf{J}_k, \mathbf{P}_l] = i\epsilon_{jkl} \mathbf{P}_j + iC_{kl}^{JP} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}, \quad (2.6.7)$$

$$[\mathbf{J}_k, \mathbf{K}_l] = i\epsilon_{jkl} \mathbf{K}_j + iC_{kl}^{JK} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}, \quad (2.6.8)$$

$$[\mathbf{P}_k, \mathbf{P}_l] = iC_{kl}^{PP} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}, \quad (2.6.9)$$

$$[\mathbf{H}, \mathbf{P}_k] = iC_k^{HP} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}, \quad (2.6.10)$$

$$[\mathbf{H}, \mathbf{J}_k] = iC_k^{HJ} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}, \quad (2.6.11)$$

$$[\mathbf{K}_k, \mathbf{P}_l] = iC_{kl}^{KP} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}, \quad (2.6.12)$$

$$[\mathbf{H}, \mathbf{K}_k] = -i\mathbf{P}_k + iC_k^{HK} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}, \quad (2.6.13)$$

$$[\mathbf{K}_k, \mathbf{K}_l] = iC_{kl}^{KK} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}. \quad (2.6.14)$$

Wir benutzen nun die **Jacobi-Identitäten** für die Zentralladungen (2.5.22), die aus den Jacobi-Identitäten für jeweils drei der Erzeuger (2.6.6-2.6.14) folgen. Dabei sind die Jacobi-Identitäten für die Strukturkonstanten (2.5.21) automatisch erfüllt, weil die obigen Kommutatorregeln aus der Strahldarstellung

der Lie-Algebra zur Galilei-Gruppe hervorgehen. Sie liefern also keine weiteren Einschränkungen. Außerdem brauchen wir nur Jacobi-Identitäten für die nichtabelschen Teile der Gruppe zu betrachten, weil für abelsche Untergruppen die Jacobi-Identitäten (2.5.22) automatisch erfüllt sind, weil in diesem Falle die entsprechenden Strukturkonstanten identisch verschwinden.

Da offensichtlich $C_{kl}^{JJ} = -C_{lk}^{JJ}$ sein muß, können wir alle möglichen Zentralladungen einer Strahldarstellung der Drehgruppe in der Form

$$C_{kl}^{jj} = -\epsilon_{nkl}\varphi_n \quad \text{mit} \quad \varphi_n \in \mathbb{R} \quad (2.6.15)$$

schreiben. Da die ϵ_{jkl} gerade die Strukturkonstanten der Drehgruppe sind, erfüllen also die Zentralladungen der Drehgruppe automatisch die Bedingung (2.5.23), so daß wir durch geeignete Phasenwahl der \mathbf{J}_k dafür sorgen können, daß

$$C_{kl}^{JJ} \equiv 0 \quad (2.6.16)$$

ist.

Die Jacobi-Identität für die drei Generatoren \mathbf{J}_k , \mathbf{P}_l und \mathbf{P}_m liefert mit (2.6.7) und (2.6.9)

$$\epsilon_{nmk}C_{ln}^{PP} + \epsilon_{nkl}C_{ml}^{PP} = 0. \quad (2.6.17)$$

Überschiebt man dies mit δ_{mk} folgt

$$\epsilon_{nkl}C_{kl}^{PP} = 0 \quad (2.6.18)$$

und folglich, da $C_{kl}^{PP} = -C_{lk}^{PP}$ ist,

$$C_{kl}^{PP} \equiv 0. \quad (2.6.19)$$

Auf exakt analoge Weise folgt aus der Jacobi-Identität für \mathbf{J}_k , \mathbf{K}_l und \mathbf{K}_m , daß auch

$$C_{kl}^{KK} \equiv 0 \quad (2.6.20)$$

sein muß.

Mit der Jacobi-Identität für \mathbf{P}_k , \mathbf{K}_l und \mathbf{J}_m finden wir

$$\epsilon_{nlm}C_{kn}^{PK} - \epsilon_{nmk}C_{nl}^{PK} = 0. \quad (2.6.21)$$

Überschiebt man dies mit δ_{mk} , folgt

$$\epsilon_{nlk}C_{kn}^{PK} = 0 \Rightarrow C_{kn}^{PK} = C_{nk}^{PK}. \quad (2.6.22)$$

Überschiebt man nun (2.6.21) mit ϵ_{jkm} , erhalten wir

$$3C_{jl}^{PK} = C_{kk}^{PK}\delta_{jl} \Rightarrow C_{jl}^{PK} = -m\delta_{jl} \quad (2.6.23)$$

mit $m \in \mathbb{R}$, wobei m selbst keine weiteren Einschränkungen durch die Gruppenstruktur erfährt. Hier haben wir also eine **nichttriviale Zentralladung** gefunden.

Verwenden wir nun die Jacobi-Identität für \mathbf{K}_k , \mathbf{J}_l und \mathbf{J}_m , erhalten wir

$$\epsilon_{nlm}C_{kn}^{KJ} - \epsilon_{nmk}C_{nl}^{KJ} - \epsilon_{nkl}C_{nm}^{KJ} = 0. \quad (2.6.24)$$

Überschiebt man diese Gleichung mit δ_{lm} , folgt

$$\epsilon_{nlk}C_{nl}^{KJ} = 0 \Rightarrow C_{nl}^{KJ} = C_{ln}^{KJ}. \quad (2.6.25)$$

Überschieben von (2.6.24) mit ϵ_{lmo} liefert zusammen mit (2.6.25)

$$2C_{ko}^{KJ} = C_{ll}^{KJ} \delta_{ok}. \quad (2.6.26)$$

Nochmaliges Überschieben mit δ_{ok} ergibt

$$2C_{ll}^{KJ} = 3C_{ll}^{KJ} \Rightarrow C_{ll}^{KJ} = 0, \quad (2.6.27)$$

und wegen (2.6.26) ist damit

$$C_{ko}^{KJ} \equiv 0. \quad (2.6.28)$$

Eine exakt gleichartige Rechnung ergibt vermöge der Jacobi-Identität für \mathbf{P}_k , \mathbf{J}_l und \mathbf{J}_m auch

$$C_{ko}^{PJ} \equiv 0. \quad (2.6.29)$$

Die Jacobi-Identität für \mathbf{H} , \mathbf{P}_k und \mathbf{J}_l liefert

$$\epsilon_{nkl} C_n^{HP} = 0 \Rightarrow C_n^{HP} \equiv 0. \quad (2.6.30)$$

Die Jacobi-Identität für \mathbf{H} , \mathbf{K}_k und \mathbf{J}_l ergibt

$$\epsilon_{nkl} C_n^{HK} = C_{lk}^{JP} \stackrel{(2.6.29)}{=} 0 \quad (2.6.31)$$

und damit

$$C_n^{HK} \equiv 0. \quad (2.6.32)$$

Die einzige nichttriviale Zentralladung ist also durch (2.6.23) gegeben. Zur Untersuchung der Darstellungen der Galilei-Gruppe genügt es also, von den Kommutatorregeln

$$[\mathbf{J}_k, \mathbf{J}_l] = i\epsilon_{jkl} \mathbf{J}_j, \quad (2.6.33)$$

$$[\mathbf{J}_k, \mathbf{P}_l] = i\epsilon_{jkl} \mathbf{P}_j, \quad (2.6.34)$$

$$[\mathbf{J}_k, \mathbf{K}_l] = i\epsilon_{jkl} \mathbf{K}_j \quad (2.6.35)$$

$$[\mathbf{P}_k, \mathbf{P}_l] = 0, \quad (2.6.36)$$

$$[\mathbf{H}, \mathbf{P}_k] = 0, \quad (2.6.37)$$

$$[\mathbf{H}, \mathbf{J}_k] = 0, \quad (2.6.38)$$

$$[\mathbf{K}_k, \mathbf{P}_l] = im \delta_{kl} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}, \quad (2.6.39)$$

$$[\mathbf{H}, \mathbf{K}_k] = -i\mathbf{P}_k, \quad (2.6.40)$$

$$[\mathbf{K}_k, \mathbf{K}_l] = 0 \quad (2.6.41)$$

auszugehen.

2.7 Nichtrelativistische Elementarteilchen

Wir definieren nichtrelativistische Elementarteilchen als solche Teilchen, deren Hilbert-Raum der Zustände eine **irreduzible Strahldarstellung der vollen Galilei-Gruppe** bilden. Dabei heißt eine Strahldarstellung **irreduzibel**, wenn sich der Hilbert-Raum, auf dem diese Darstellung realisiert ist, nicht in (nichttriviale) Unter-Hilbert-Räume zerlegen läßt, d.h. aus jedem von 0 verschiedenen Vektor läßt sich

durch Anwendung der unitären Darstellungsmatrizen $\mathbf{U}(\vec{\omega}, \alpha, \vec{a}, \vec{\phi})$ eine vollständige Basis des Hilbertraumes konstruieren.

Wir können nun alle irreduziblen Strahldarstellungen der Galilei-Lie-Algebra gewinnen, wobei wir, wie im vorigen Abschnitt gesehen, von den Kommutatorrelationen (2.6.33-2.6.41) ausgehen können, d.h. nur die Boost-Translations-Untergruppe enthält gemäß (2.6.39) eine nichttriviale Zentralladung, welche bereits eine die Darstellung charakterisierende Größe m liefert. Wir werden sehen, daß dies die **Masse des Elementarteilchens** ist.

Um nun eine irreduzible Darstellung zu finden, genügt es, eine Basis des Hilbertraums zu konstruieren und die Wirkung der Gruppenoperationen auf diesen Basisvektoren anzugeben. Dabei werden wir so vorgehen, daß wir zunächst die Basisvektoren als simultanen Eigenvektor eines vollständigen Satzes kompatibler Observabler konstruieren. Dazu wählen wir die simultanen Eigenvektoren $|E, \vec{p}, \sigma\rangle$ des Hamilton-Operators \mathbf{H} und der drei Impulskomponenten $\vec{\mathbf{P}}$. Dabei haben wir mit einem Satz zusätzlicher Parameter σ die Möglichkeit offen gelassen, daß diese **Energie-Impulseigenvektoren** entartet sein können. Nun betrachten wir zuerst die Wirkung eines Boostes auf diese Eigenvektoren. Von der klassischen Mechanik her erwarten wir, daß der Boost eines Energie-Impuls-Eigenvektors wieder einen solchen Eigenvektor zu entsprechend anderen Eigenwerten erzeugt. Betrachten wir also

$$\vec{\mathbf{P}}'(\vec{\omega}) = \exp(-i\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{K}}) \vec{\mathbf{P}} \exp(i\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{K}}). \quad (2.7.1)$$

Leiten wir diese Beziehung nach ω_j ab, erhalten wir aufgrund der Kommutatorrelationen (2.6.41) und (2.6.39)

$$\frac{\partial}{\partial \omega_j} \mathbf{P}'_k(\vec{\omega}) = m \delta_{kj} \quad (2.7.2)$$

und zusammen mit der Anfangsbedingung $\vec{\mathbf{P}}'(0) = \vec{\mathbf{P}}$

$$\vec{\mathbf{P}}'(\vec{\omega}) = \vec{\mathbf{P}} + m \vec{\omega} \mathbb{1}_{\mathcal{H}}. \quad (2.7.3)$$

Daraus folgt

$$\vec{\mathbf{P}} \exp(i\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{K}}) |E, \vec{p}, \sigma\rangle = \exp(i\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{K}}) \vec{\mathbf{P}}'(\vec{\omega}) |E, \vec{p}, \sigma\rangle \stackrel{(2.7.3)}{=} (\vec{p} + m \vec{\omega}) \exp(i\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{K}}) |E, \vec{p}, \sigma\rangle. \quad (2.7.4)$$

Damit ist also $\exp(i\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{K}}) |E, \vec{p}, \sigma\rangle$ Impulseigenvektor zum Eigenwert

$$\vec{p}' = \vec{p} + m \vec{\omega}. \quad (2.7.5)$$

Eine entsprechende Betrachtung des Operators

$$\mathbf{H}'(\vec{\omega}) = \exp(-i\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{K}}) \mathbf{H} \exp(i\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{K}}) \quad (2.7.6)$$

liefert mit (2.6.41) und (2.7.3)

$$\mathbf{H}'(\vec{\omega}) = \mathbf{H} + \vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{P}} + \frac{1}{2} m \vec{\omega}^2. \quad (2.7.7)$$

Entsprechend ist

$$\mathbf{H} \exp(i\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{K}}) |E, \vec{p}, \sigma\rangle = \left(E + \vec{\omega} \cdot \vec{p} + \frac{m}{2} \vec{\omega}^2 \right) \exp(i\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{K}}) |E, \vec{p}, \sigma\rangle \quad (2.7.8)$$

Falls $m \neq 0$ ist, besitzt $\vec{\mathbf{P}}$ den ganzen \mathbb{R}^3 als Spektrum, und die **Boost-Untergruppe** wirkt aufgrund der angenommenen Irreduzibilität der Strahldarstellung transitiv auf den verallgemeinerten Impulseigenvektoren. Wir können daher die folgende **Wignerbasis** für die Impulseigenvektoren wählen:

$$|E, \vec{p}, \sigma\rangle := \exp\left(i\frac{\vec{p}}{m} \cdot \vec{\mathbf{K}}\right) |E_0, \vec{p} = 0, \sigma\rangle. \quad (2.7.9)$$

Für den Energieeigenwert folgt dann wegen (2.7.8)

$$\mathbf{H} |E, \vec{p}, \sigma\rangle = \left(E_0 + \frac{\vec{p}^2}{2m}\right) |E, \vec{p}, \sigma\rangle. \quad (2.7.10)$$

Wir können nun aber \mathbf{H} um beliebige zum Einheitsoperator proportionale Operatoren verschieben, ohne daß sich etwas an den Kommutatorrelationen (2.6.33-2.6.41) ändert. Wir dürfen also $E_0 = 0$ annehmen. Dann ist

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m}, \quad (2.7.11)$$

und folglich können wir statt $|E, \vec{p}, \sigma\rangle =: |\vec{p}, \sigma\rangle$ schreiben. Da voraussetzungsgemäß die $|\vec{p}, \sigma\rangle$ vollständig sind, folgt daraus

$$\mathbf{H} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{p} \sum_{\sigma} \mathbf{H} |\vec{p}, \sigma\rangle \langle \vec{p}, \sigma| = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{p} \sum_{\sigma} \frac{\vec{p}^2}{2m} |\vec{p}, \sigma\rangle \langle \vec{p}, \sigma| = \frac{\vec{\mathbf{P}}^2}{2m}. \quad (2.7.12)$$

Mit der Wahl der Eigenvektoren (2.7.9) können wir aufgrund der Kommutativität der Galilei-Boosts sofort die Wirkung der Galilei-Boostuntergruppe auf die Impulseigenvektoren angeben:

$$\exp(i\vec{w} \cdot \vec{\mathbf{K}}) |\vec{p}, \sigma\rangle = \exp\left(i\frac{m\vec{w} + \vec{p}}{m} \cdot \vec{\mathbf{K}}\right) |\vec{p} = 0, \sigma\rangle \stackrel{(2.7.9)}{=} |\vec{p} + m\vec{w}, \sigma\rangle. \quad (2.7.13)$$

Jetzt müssen wir noch die Wirkung von **Drehungen** auf die Eigenvektoren untersuchen. Setzen wir $\vec{\phi} = \phi\vec{n}$, so folgt aus den Kommutatorrelationen (2.6.34) ähnlich wie oben bei der Herleitung von (2.7.3) durch Ableiten nach ϕ und anschließendem Zurückintegrieren (*Übung*)

$$\vec{\mathbf{P}}'(\vec{\phi}) = \exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{J}}) \vec{\mathbf{P}} \exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{J}}) = \hat{R}(\vec{\phi}) \vec{\mathbf{P}}. \quad (2.7.14)$$

Dabei ist $\hat{R} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ die gewöhnliche orthogonale Drehmatrix für eine Drehung um den Winkel ϕ um die durch \vec{n} gegebene Drehrichtung. Damit folgt

$$\vec{\mathbf{P}} \exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{J}}) |\vec{p}, \sigma\rangle = \hat{R}(\vec{\phi}) \vec{p} \exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{J}}) |\vec{p}, \sigma\rangle. \quad (2.7.15)$$

Es ist also $\exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{J}}) |\vec{p}, \sigma\rangle$ Impulseigenvektor zum Eigenwert $\hat{R}(\vec{\phi}) \vec{p}$, und es muß folglich Zahlen $D_{\sigma', \sigma}(\vec{p}, \vec{\phi}) \in \mathbb{C}$ geben, so daß

$$\exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{J}}) |\vec{p}, \sigma\rangle = \sum_{\sigma'} D_{\sigma', \sigma}(\vec{p}, \vec{\phi}) \left| \hat{R}(\vec{\phi}) \vec{p}, \sigma' \right\rangle \quad (2.7.16)$$

ist. Wir zeigen nun, daß die Matrizen $D_{\sigma', \sigma}(\vec{\phi}) := D_{\sigma', \sigma}(\vec{p} = 0, \vec{\phi})$ eine **unitäre Darstellung der Drehgruppe** bilden müssen und daß dann auch die Wirkung von Drehungen auf beliebige Eigenvektoren

$|\vec{p}, \sigma\rangle$ durch diese Darstellung bestimmt ist. Dazu wenden wir (2.7.16) wie folgt auf die Hintereinanderausführung zweier Drehungen

$$\exp(i\vec{\phi}_3 \cdot \vec{J}) = \exp(i\vec{\phi}_2 \cdot \vec{J}) \exp(i\vec{\phi}_1 \cdot \vec{J}) \quad (2.7.17)$$

an:

$$\begin{aligned} \exp(i\vec{\phi}_3 \cdot \vec{J}) |\vec{p} = 0, \sigma\rangle &= \sum_{\sigma''} D_{\sigma''\sigma}(\vec{\phi}_3) |\vec{p} = 0, \sigma''\rangle \stackrel{!}{=} \exp(i\vec{\phi}_2 \cdot \vec{J}) \exp(i\vec{\phi}_1 \cdot \vec{J}) |0, \sigma\rangle \\ &= \sum_{\sigma'} D_{\sigma'\sigma}(\vec{\phi}_1) \exp(i\vec{\phi}_2 \cdot \vec{J}) |0, \sigma'\rangle = \sum_{\sigma', \sigma''} D_{\sigma''\sigma'}(\vec{\phi}_2) D_{\sigma'\sigma}(\vec{\phi}_1) |0, \sigma''\rangle \\ &= \sum_{\sigma''} [\hat{D}(\vec{\phi}_2) \hat{D}(\vec{\phi}_1)]_{\sigma''\sigma} |0, \sigma''\rangle. \end{aligned} \quad (2.7.18)$$

Dies verlangt aber in der Tat die Darstellungseigenschaft

$$\hat{D}(\vec{\phi}_3) = \hat{D}(\vec{\phi}_2) \hat{D}(\vec{\phi}_1). \quad (2.7.19)$$

Falls wir also nichttriviale Darstellungen der Drehgruppe finden können, was wir im nächsten Abschnitt zeigen werden, transformieren sich Impulseigenzustände zum Impulseigenwert $\vec{p} = 0$ unter Drehungen unter eben dieser nichttrivialen Darstellung. Wir interpretieren diese der klassischen Physik fremde Eigenschaft, daß sich die Zustände eines ruhenden freien elementaren Teilchens unter Drehungen ändern können, dadurch, daß wir den durch diese Strahldarstellung der Galilei-Gruppe beschriebenen Teilchen eine zum Drehimpuls gehörige innere Quantenzahl zuschreiben, die als **Spin** bezeichnet wird. Dieser Name geht auf die etwas heikle Vorstellung zurück, daß Elementarteilchen neben den drei Translationsfreiheitsgraden eine Art inneren Drehimpuls in Analogie zum Drall eines ausgedehnten starren Körpers besitzen. Dies ist insofern problematisch als wir Elementarteilchen als punktförmig ansehen, da es physikalisch keinen Sinn ergibt, ihnen aufgrund der quantentheoretischen Beschreibung überhaupt eine Art von Ausdehnung zuzuordnen.

Nun können wir die Wirkung einer Drehung auf beliebige Basisvektoren $|\vec{p}, \sigma\rangle$ bestimmen. Dazu schreiben wir

$$\begin{aligned} \exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{J}) |\vec{p}, \sigma\rangle &= \exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{J}) \exp\left(i\frac{\vec{p}}{m} \cdot \vec{K}\right) |\vec{p} = 0, \sigma\rangle \\ &= \exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{J}) \exp\left(i\frac{\vec{p}}{m} \cdot \vec{K}\right) \exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{J}) \exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{J}) |\vec{p} = 0, \sigma\rangle \end{aligned} \quad (2.7.20)$$

Nun gilt

$$\exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{J}) \exp\left(i\frac{\vec{p}}{m} \cdot \vec{K}\right) \exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{J}) = \exp\left(i\frac{\vec{p}}{m} \cdot \vec{K}'(\vec{\phi})\right) \quad (2.7.21)$$

mit

$$\vec{K}'(\vec{\phi}) = \exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{J}) \vec{K} \exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{J}) = \hat{R}^{-1}(\vec{\phi}) \vec{K}, \quad (2.7.22)$$

wobei die letzte Gleichung genauso herzuleiten ist wie die entsprechende Gleichung (2.7.14) für den Impulsoperator. Verwenden wir zuerst (2.7.16) in (2.7.20) und wenden dann nacheinander (2.7.21) und (2.7.9) an, erhalten wir

$$\exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{J}) |\vec{p}, \sigma\rangle = \sum_{\sigma'} D_{\sigma'\sigma}(\vec{\phi}) |\hat{R}(\vec{\phi}) \vec{p}, \sigma'\rangle, \quad (2.7.23)$$

wobei wir von der Orthogonalität der Drehmatrix $\hat{R}(\vec{\phi})$ Gebrauch gemacht haben:

$$\vec{p} \cdot [\hat{R}^{-1}(\vec{\phi})\vec{\mathbf{K}}] = [\hat{R}^{-1T}(\vec{\phi})\vec{p}] \cdot \vec{\mathbf{K}} = [\hat{R}(\vec{\phi})\vec{p}] \cdot \vec{\mathbf{K}}. \quad (2.7.24)$$

Damit haben wir die Wirkung aller Bestandteile der Strahldarstellung der Galilei-Gruppe für ein Elementarteilchen festgelegt. Es verbleibt uns nur noch, die Darstellungen der Drehgruppe zu charakterisieren, um alle möglichen Realisierungen von Matrizen $\hat{D}(\vec{\phi})$ zu ermitteln.

Wir müssen uns nun aber noch von der Unitarität der Strahldarstellung überzeugen. Für die zeitlichen und räumlichen Translationen ist dies klar, da diese die Basisvektoren $|\vec{p}, \sigma\rangle$ lediglich mit Phasenfaktoren multiplizieren, weil diese Vektoren konstruktionsgemäß Eigenvektoren der entsprechenden Erzeugenden \mathbf{H} und $\vec{\mathbf{P}}$ sind. Für die Boosts folgt

$$\begin{aligned} \langle \exp(i\vec{w} \cdot \vec{\mathbf{K}})\vec{p}_1, \sigma_1 | \exp(i\vec{w} \cdot \vec{\mathbf{K}})\vec{p}_2, \sigma_2 \rangle &= \langle \vec{p}_1 + m\vec{w}, \sigma_1 | \vec{p}_2 + m\vec{w}, \sigma_2 \rangle \\ &= \delta^{(3)}[(\vec{p}_1 + m\vec{w}) - (\vec{p}_2 + m\vec{w})] \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \\ &= \delta^{(3)}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \delta_{\sigma_1 \sigma_2} = \langle \vec{p}_1, \sigma_1 | \vec{p}_2, \sigma_2 \rangle. \end{aligned} \quad (2.7.25)$$

Dabei sind wir davon ausgegangen, daß die $|\vec{p}, \sigma\rangle$ auf die übliche Weise normiert und daß sich die Darstellungsmatrizen $\hat{D}(\vec{\phi})$ der Drehgruppe auf eine diskrete Basis beziehen. Wir werden im nächsten Abschnitt sehen, daß dies notwendig der Fall ist. Betrachten wir schließlich noch die Drehungen:

$$\begin{aligned} \langle \exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{J}})\vec{p}_1, \sigma_1 | \exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{J}})\vec{p}_2, \sigma_2 \rangle &= \sum_{\sigma', \sigma''} D_{\sigma' \sigma_1}^* D_{\sigma'' \sigma_2} \langle \hat{R}(\vec{\phi})\vec{p}_1, \sigma' | \hat{R}(\vec{\phi})\vec{p}_2, \sigma'' \rangle \\ &= \sum_{\sigma', \sigma''} D_{\sigma' \sigma_1}^*(\vec{\phi}) D_{\sigma'' \sigma_2}(\vec{\phi}) \delta^{(3)}[\hat{R}(\vec{\phi})(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)] \delta_{\sigma' \sigma''} \\ &= \delta^{(3)}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) [\hat{D}^\dagger(\vec{\phi}) \hat{D}(\vec{\phi})]_{\sigma_1 \sigma_2}. \end{aligned} \quad (2.7.26)$$

Dabei haben wir bei der Umrechnung der δ -Distribution verwendet, daß $\det \hat{R}(\vec{\phi}) = 1$ ist. Damit also die Strahldarstellung unitär ist, muß

$$\hat{D}^\dagger(\vec{\phi}) \hat{D}(\vec{\phi}) = \mathbb{1}, \quad (2.7.27)$$

also die Darstellung der Drehgruppe $\hat{D}(\vec{\phi})$ **unitär** sein. Damit die Strahldarstellung irreduzibel ist, muß offenbar auch die unitäre Darstellung der Drehgruppe irreduzibel sein, denn nur dann können alle Eigenzustände zum Impulseigenwert $\vec{p} = 0$ durch Anwendung von Drehungen aus einem beliebigen solchen Zustand gewonnen werden.

Wir müssen also noch die unitären irreduziblen Darstellungen der Drehgruppe finden, um unsere Darstellungstheorie der Galilei-Symmetrie und damit die Beschreibung nichtrelativistischer Elementarteilchen abzuschließen.

Zunächst bemerken wir, daß die Galilei-Boosts für sich genommen eine (Abelsche) Untergruppe der vollen Galilei-Gruppe bilden, die insbesondere keine Drehungen generieren kann. Daher können die eben konstruierten Basiszustände als dyadisches Produkt

$$|\vec{p}, \sigma\rangle = |\vec{p}\rangle \otimes |\sigma\rangle \quad (2.7.28)$$

geschrieben werden, und der Drehimpuls läßt sich in einen **Bahndrehimpuls-** und einen **Spinanteil** zerlegen:

$$\vec{\mathbf{J}} = \vec{\mathbf{L}} \times \mathbb{1} + \mathbb{1} \times \vec{\mathbf{S}} =: \vec{\mathbf{L}} + \vec{\mathbf{S}}. \quad (2.7.29)$$

Offensichtlich gelten dann die Drehimpulskommutatorregeln (2.6.33) für $\vec{\mathbf{L}}$ und $\vec{\mathbf{S}}$, und diese Operatoren kommutieren untereinander. Die Darstellung der Drehungen ist damit durch

$$\exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{J}})|\vec{p}, \sigma\rangle = \exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{L}})|\vec{p}\rangle \otimes \exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{S}})|\sigma\rangle \quad (2.7.30)$$

gegeben. Es läßt sich dann aus den Kommutatorrelationen (2.6.33-2.6.41) herleiten (*Übung!*), daß wir

$$\vec{\mathbf{L}} = \frac{1}{m} \vec{\mathbf{K}} \times \vec{\mathbf{P}} \quad (2.7.31)$$

setzen können. Der Spinoperator kommutiert mit allen Operatoren außer den Spinoperatorkomponenten selbst, die die Drehimpulsalgebra

$$[\mathbf{S}_k, \mathbf{S}_l] = i\epsilon_{jkl} \mathbf{S}_j \quad (2.7.32)$$

erfüllen.

2.8 Die unitären irreduziblen Darstellungen der Drehgruppe

Zur vollständigen Charakterisierung der unitären irreduziblen Strahldarstellungen der Galileigruppe fehlt jetzt nur noch die Konstruktion der irreduziblen Darstellungen der Drehgruppe.

Im vorigen Abschnitt haben wir gesehen, daß die $|\vec{p} = 0, \sigma\rangle = |\vec{p} = 0\rangle \otimes |\sigma\rangle$, also die Energie-Impuls-Eigenzustände zum Impulseigenwert $\vec{p} = 0$ einen Darstellungsraum der Drehgruppe zu einer irreduziblen unitären Darstellung aufspannen. Dabei wirken auf die $|\sigma\rangle$ die Spinoperatoren, die die Kommutatorregeln (2.7.32) erfüllen. Die entsprechenden unitären Darstellungen der Drehgruppe wollen wir im folgenden konstruieren.

Laut (2.6.33) wird die Lie-Algebra der Drehgruppe durch die drei selbstadjungierten Drehimpulsoperatoren $\vec{\mathbf{S}}$ aufgespannt, und es gelten die Kommutatorrelationen

$$[\mathbf{S}_j, \mathbf{S}_k] = i\epsilon_{jkl} \mathbf{S}_l. \quad (2.8.1)$$

Zunächst erwarten wir, daß $\vec{\mathbf{S}}^2$ mit allen $\vec{\mathbf{S}}$ vertauscht. Mit (2.8.1) ist dies sofort zu bestätigen:

$$[\mathbf{S}_k, \mathbf{S}_l \mathbf{S}_l] = i\epsilon_{klm} (\mathbf{S}_l \mathbf{S}_m + \mathbf{S}_m \mathbf{S}_l) = 0. \quad (2.8.2)$$

Man nennt einen Operator, der mit allen Elementen einer Lie-Algebra vertauscht, einen **Casimir-Operator**. Folglich ist $\vec{\mathbf{S}}^2$ also ein Casimir-Operator der Drehgruppe. Wir können die irreduziblen Darstellungen einer Lie-Algebra durch den Eigenwert der untereinander kommutierenden Casimir-Operatoren charakterisieren, denn für eine irreduzible Darstellung können wir alle Vektoren durch Anwendung einer Drehung $\exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{S}})$ auf einen Eigenvektor erzeugen. Dabei entstehen wieder Eigenvektoren der Casimir-Operatoren zu denselben Eigenwerten, d.h. eine irreduzible Darstellung ist vollständig durch die Eigenwerte eines vollständigen Satz kompatibler Casimir-Operatoren bestimmt. Die Lie-Algebra der Drehgruppe besitzt nun offenbar nur diesen einen Casimir-Operator, denn dies ist die einzige unter Drehungen invariante Größe, die sich aus $\vec{\mathbf{S}}$ gewinnen läßt.

Da die drei Drehimpulsoperatoren untereinander nicht vertauschen, muß sich der zu einer irreduziblen unitären Darstellung gehörige Vektorraum zum $\vec{\mathbf{S}}^2$ -Eigenwert λ durch die Eigenbasis einer beliebigen Komponente des Drehimpulsoperators, üblicherweise nimmt man \mathbf{S}_z , aufspannen lassen:

$$\vec{\mathbf{S}}^2 |\lambda, \sigma\rangle = \lambda |\lambda, \sigma\rangle, \quad \mathbf{S}_z |\lambda, \sigma\rangle = \sigma |\lambda, \sigma\rangle. \quad (2.8.3)$$

Wir haben durch die willkürliche Wahl von S_z zur Charakterisierung der Basisvektoren die z -Richtung ausgezeichnet. Es empfiehlt sich daher die Einführung eines Polarkoordinatensystems in der xy -Ebene. Dies ist aber nicht so einfach im Operatorformalismus zu realisieren. Wir nutzen eine andere Möglichkeit, die auch oft im Zusammenhang mit Rechnungen in der klassischen Mechanik nützlich ist, nämlich die Darstellung der xy -Ebene als komplexe Zahlenebene. Entsprechend konstruieren wir die *nicht selbstadjungierten* zueinander hermitesch adjungierten Operatoren

$$S_{\pm} = S_x \pm iS_y. \quad (2.8.4)$$

Wir werden im folgenden intensiven Gebrauch von Kommutatorrelationen dieser Operatoren machen, die sich leicht aus (2.8.1) herleiten lassen. Besonders einfach ist die Kommutativität mit \vec{S}^2 einzusehen

$$[S_{\pm}, \vec{S}^2] = 0, \quad (2.8.5)$$

weil \vec{S}^2 Casimiroperator der Drehalgebra ist. Die Anwendung von (2.8.1) führt sofort auf

$$[S_z, S_{\pm}] = \pm S_{\pm}, \quad (2.8.6)$$

$$[S_+, S_-] = 2S_z. \quad (2.8.7)$$

Weiter rechnet man unter erneuter Anwendung von (2.8.1) leicht nach, daß

$$\vec{S}^2 = S_+ S_- + S_z(S_z - 1) \quad (2.8.8)$$

gilt, und durch Anwendung von (2.8.7) folgt hieraus sofort auch

$$\vec{S}^2 = S_- S_+ + S_z(S_z + 1). \quad (2.8.9)$$

Jetzt bestimmen wir die Eigenwerte von \vec{S}^2 und S_z . Zunächst ist \vec{S}^2 ein positiver Operator, was sich unmittelbar aus der Selbstadjungiertheit der \vec{S} ergibt. Damit ist $\lambda \geq 0$. Weiter zeigen wir, daß S_z für vorgegebenes λ beschränkt ist:

$$\sigma^2 = \langle \lambda, \sigma | S_z^2 | \lambda, \sigma \rangle = \langle \lambda, \sigma | \vec{S}^2 - S_x^2 - S_y^2 | \lambda, \sigma \rangle \leq \langle \lambda, \sigma | \vec{S}^2 | \lambda, \sigma \rangle = \lambda \Rightarrow \sigma^2 \leq \lambda. \quad (2.8.10)$$

Nun gilt wegen (2.8.6)

$$S_z S_{\pm} | \lambda, \sigma \rangle = \{ [S_z, S_{\pm}] + S_{\pm} \sigma \} | \lambda, \sigma \rangle = (\sigma \pm 1) S_{\pm} | \lambda, \sigma \rangle. \quad (2.8.11)$$

Das bedeutet, daß entweder $S_{\pm} | \lambda, \sigma \rangle$ Eigenvektor von S_z zum Eigenwert $\sigma \pm 1$ oder der Nullvektor ist.

Sei nun $s = \max\{\sigma\}$. Dann ist zwingend

$$S_+ | \lambda, s \rangle = 0, \quad (2.8.12)$$

und (2.8.9) ergibt

$$\lambda = s(s + 1). \quad (2.8.13)$$

Sei jetzt $-s' = \min\{\sigma\}$. Dann gilt wegen $S_- | \lambda, -s' \rangle = 0$ und (2.8.8) $\lambda = s'(s' + 1)$ und zusammen mit (2.8.13) und $-s' \leq s$ folgert man $s = s'$. Meist wird die Darstellung, die durch den Eigenwert von \vec{S}^2

definiert ist, durch s gekennzeichnet, und wir folgen diesem Brauch. Dabei ist der Eigenwert λ von \vec{S}^2 durch (2.8.13) gegeben. Neben der Masse ist also zu einer vollständigen Charakterisierung eines Elementarteilchens auch sein **Spin** s notwendig. Damit ist aber die Bestimmung der intrinsischen Eigenschaften eines freien Teilchens auch vollständig erfaßt, wie wir bei der Konstruktion der irreduziblen unitären Strahldarstellungen der Galilei-Gruppe gezeigt haben.

Jetzt legen wir die Orthonormalbasis des irreduziblen Darstellungsraums durch die Gleichung

$$S_- |\lambda, \sigma\rangle = N(\sigma) |\lambda, \sigma - 1\rangle \quad (2.8.14)$$

sowie die Forderung $N(\sigma) \in \mathbb{R}$ und $N(\sigma) \geq 0$ fest. Dies ist eine Rekursionsformel, die aus $|\lambda, s\rangle$ die Berechnung der übrigen zur irreduziblen Darstellung gehörigen Eigenvektoren von S_z gestattet. Diese bricht wegen der Beschränktheit der Eigenvektoren mit Erreichen des minimalen Eigenwertes $-s$ von S_z ab. Es muß also

$$S_-^k |\lambda, s\rangle = C_k |\lambda, s - k\rangle \quad \text{mit } k \in \mathbb{N} \quad (2.8.15)$$

sein. Aufgrund der obigen Überlegung, daß der minimale Eigenwert von S_z gerade $-s$ ist, folgt damit

$$\exists k \in \mathbb{N} : s - k = -s \Rightarrow \exists k \in \mathbb{N} : s = k/2. \quad (2.8.16)$$

Damit sind die möglichen Eigenwerte von \vec{S}^2 gemäß (2.8.13) durch $s \in \{0, 1/2, 1, \dots\}$ bestimmt. Die möglichen Eigenwerte von S_z sind dann aufgrund der Irreduzibilität der Darstellung gemäß (2.8.15) durch $\sigma \in \{-s, -s + 1, \dots, s\}$ gegeben, woraus sich die Dimension der Darstellung zu $\dim \text{Eig}[\vec{S}^2, s(s+1)] = 2s + 1$ ergibt. Da die möglichen Werte von s ganzzahlige Vielfache von $1/2$ sind, gibt es zu jeder Dimension genau eine Darstellung der Drehgruppe. Insbesondere gehört zu $s = 0$ die triviale Darstellung, in der alle Drehimpulsoperatoren den einen Basisvektor des Darstellungsraums annullieren, so daß alle Drehungen $\exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{S})$ auf diesem Darstellungsraum durch die Identität dargestellt werden. Dabei ist aber für halbzahligen Spin die Besonderheit zu beachten, daß Drehungen um 2π nicht zur Identität führen. Betrachten wir nämlich eine Drehung um die z -Achse, ergibt sich

$$\exp(-i\phi S_z) |\lambda, \sigma\rangle = \exp(-i\phi \sigma) |\lambda, \sigma\rangle. \quad (2.8.17)$$

Für $\phi = 2\pi$ ergibt sich aber

$$\exp(-i2\pi\sigma) = (-1)^{2\sigma}. \quad (2.8.18)$$

Falls also σ halbzahlig ist, ergibt sich ein Faktor -1 in (2.8.17). Dies ist allerdings für die Quantentheorie kein Problem, solange sich *alle* möglichen Zustandsvektoren eines Teilchens bei Drehungen um 2π mit -1 multiplizieren. Wir werden im folgenden sehen, daß der Bahndrehimpulsoperator (2.7.31) nur ganzzahlige Darstellungen besitzt, d.h. \vec{L}^2 besitzt stets Eigenwerte $l(l+1)$ mit $l \in \mathbb{N}_0 = \{0, 1, 2, \dots\}$. Bei einer Drehung um 2π liefert dieser also keinerlei Phasenfaktoren, so daß für ein einzelnes Elementarteilchen in der Tat alle Basisvektoren mit *demselben* Phasenfaktor (2.8.18) multipliziert werden.

Hat man es nun mit Systemen aus mehreren Teilchen verschiedenen Spins zu tun, folgt aus dieser Überlegung weiter, daß es keine Superpositionen von Zustandsvektoren für Teilchen mit ganzzahligem und halbzahligem Spin geben kann, ohne die Invarianz unter Drehungen zu verletzen. Solche „Verbote“ von Überlagerungen von Zuständen nennt man eine **Superauswahlregel**.

Wir werden weiter unten noch ausführlich erörtern, daß für $s = 1/2$ die Operatoren $\exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{S})$ genau den unitären $\mathbb{C}^{2 \times 2}$ -Matrizen mit Determinante 1 entsprechen. Diese bilden eine Gruppe, die man in der Mathematik als $SU(2)$, d.h. **Spezielle Unitäre Gruppe in zwei Dimensionen**, bezeichnet. Die $SU(2)$ besitzt, wie wir soeben gesehen haben, dieselbe Liealgebra wie die eigentliche Drehgruppe $SO(3)$,

ordnet aber jeder endlichen Drehung nicht eine $SU(2)$ -Matrix, sondern zwei zu, nämlich $\pm \exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{S})$. Der Spin erzeugt also nicht Darstellungen der eigentlichen Drehgruppe $SO(3)$ sondern der $SU(2)$. Wie wir gesehen haben, spricht allerdings quantentheoretisch nichts gegen eine solche Realisierung der Drehungen auf den Zuständen, solange wir die oben beschriebene Spin-Superauswahlregel beachten. Es ist auch empirisch wohlbekannt, daß es Teilchen mit Spin $1/2$ gibt, wie z.B. Elektronen. Außerdem wurden bislang auch nie experimentelle Hinweise auf Überlagerungszustände von Teilchen mit ganzzahligen und halbzahligen Spin gefunden, so daß die Charakterisierung der Elementarteilchen durch die Galilei-Gruppe im empirischen Sinne vollständig ist, solange man relativistische Effekte vernachlässigen kann.

Jetzt verbleibt zur vollständigen Bestimmung der Darstellungen der Spin-Drehgruppe (also mathematisch gesprochen der $SU(2)$) noch die Normierungsfaktoren in (2.8.14) zu berechnen,

$$N^2(\sigma) = \langle \mathbf{S}_- \lambda, \sigma | \mathbf{S}_- \lambda, \sigma \rangle = \langle \lambda, \sigma | \mathbf{S}_+ \mathbf{S}_- | \lambda, \sigma \rangle = \lambda - \sigma(\sigma - 1), \quad (2.8.19)$$

wobei wir von (2.8.8), (2.8.3) und (2.8.13) Gebrauch gemacht haben. Treffen wir die Phasenwahl so, daß $N(s)$ positiv reell wird, folgt daraus

$$\mathbf{S}_- | \lambda, \sigma \rangle = \sqrt{s(s+1) - \sigma(\sigma-1)} | \lambda, \sigma - 1 \rangle. \quad (2.8.20)$$

Schließlich ist die Wirkung von \mathbf{S}_+ auf die Basisvektoren zu bestimmen, denn dann wissen wir aus (2.8.4) auch, wie die Komponenten \vec{S}_x und \vec{S}_y auf die Basisvektoren $| \lambda, \sigma \rangle$ wirken. Definieren wir $N'(\sigma)$ durch

$$\mathbf{S}_+ | \lambda, \sigma \rangle = N'(\sigma) | \lambda, \sigma + 1 \rangle, \quad (2.8.21)$$

folgt

$$N'^2(\sigma) = \langle \mathbf{S}_+ \lambda, \sigma | \mathbf{S}_+ \lambda, \sigma \rangle = \langle \lambda, \sigma | \mathbf{S}_- \mathbf{S}_+ | \lambda, \sigma \rangle = \lambda - \sigma(\sigma + 1) \quad (2.8.22)$$

wobei wir (2.8.9) angewendet haben. Die gesuchte Gleichung lautet also

$$\mathbf{S}_+ | \lambda, \sigma \rangle = \sqrt{s(s+1) - \sigma(\sigma+1)} | \lambda, \sigma + 1 \rangle. \quad (2.8.23)$$

2.9 Das Noether-Theorem (quantenmechanisch)

Als nächstes müssen wir die Verträglichkeit der Symmetrietransformation mit der Zeitentwicklung herleiten. Dies muß eine Bedingung an die Symmetrietransformationen ergeben, die unabhängig von der Wahl des Bildes der Zeitentwicklung ist (vgl. Abschnitt 1.9ff). Daher können wir diese Bedingung in einem beliebigen Bild der Zeitentwicklung herleiten. Wir wählen dazu das Schrödingerbild. Ein beliebiger Zustand genügt dann wegen $\mathbf{Y}_S = \mathbf{H}_S$, $\mathbf{X}_S = 0$ (Definition des Schrödingerbildes) der Differentialgleichung

$$\frac{d}{dt} | \Psi_S, t \rangle = -i \mathbf{H}_S(t) | \Psi_S, t \rangle. \quad (2.9.1)$$

Nun sei $\mathbf{U}_g(t)$ eine beliebige (i.a. explizit zeitabhängige) unitäre Transformation. Sei dann

$$| \Psi'_S, t \rangle = \mathbf{U}_g(t) | \Psi_S, t \rangle. \quad (2.9.2)$$

Es ist klar, daß \mathbf{U} genau dann Symmetrietransformation ist, wenn auch $| \Psi'_S, t \rangle$ der Zeitentwicklung, die durch (2.9.1) definiert ist, genügt, denn \mathbf{U} ist definitionsgemäß dann Symmetrietransformation, wenn

der Zustand $|\Psi'_S, t\rangle$ stets äquivalent zum Zustand $|\Psi_S, t\rangle$ ist. Durch Ableitung von (2.9.2) nach der Zeit finden wir unter Verwendung von (2.9.1) und der Annahme, daß diese Gleichung auch für $|\Psi'_S, t\rangle$ mit demselben Hamilton-Operator $\mathbf{H}_s(t)$ zutrifft, daß \mathbf{U}_g genau dann Symmetrietransformation ist, wenn

$$\frac{1}{i} [\mathbf{U}_g, \mathbf{H}] + \left(\frac{\partial \mathbf{U}_g}{\partial t} \right)_{\text{expl}} = \dot{\mathbf{U}}_g := 0 \quad (2.9.3)$$

ist, wobei $\dot{\mathbf{U}}_g$ die physikalische Zeitableitung von \mathbf{U} bedeutet. Da diese Gleichung bildunabhängig ist, vgl. (1.9.13), stellt sie die gesuchte Symmetriebedingung dar.

Es ist ferner klar, daß dieselben Betrachtungen auch auf die infinitesimalen Erzeugenden der Einparameteruntergruppen der Symmetriegruppe zutreffen. Ist nämlich α der entsprechende Parameter der Einparameteruntergruppe und \mathbf{g} der dazugehörige Generator, so gilt (im hier betrachteten Schrödingerbild)

$$\mathbf{U}_g(t) = \exp[-i\alpha \mathbf{g}_S(t)], \quad (2.9.4)$$

und somit

$$\mathbf{g}_S(t) = \left. \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{U}_g(t) \right|_{\alpha=0}. \quad (2.9.5)$$

Leiten wir dann Gleichung (2.9.3) nach α ab und beachten, daß im zweiten Term auf der linken Seite die Ableitung nach α mit der expliziten Zeitableitung vertauscht werden kann, ergibt sich die bildunabhängige Gleichung

$$\dot{\mathbf{g}} = \frac{1}{i} [\mathbf{g}, \mathbf{H}] + \left(\frac{\partial \mathbf{g}}{\partial t} \right)_{\text{expl}} = 0. \quad (2.9.6)$$

Dies ist aber das quantentheoretische Pendant zum klassischen Noethertheorem, besagt doch (2.9.6), daß jeder Generator der Einparametersymmetriegruppe \mathbf{g} notwendig eine Erhaltungsgröße ist, und umgekehrt ist jede Erhaltungsgröße auch der Generator ein Einparametersymmetriegruppe des betrachteten Systems.

2.10 Einteilchenzustände für Teilchen mit Spin s

Nun können wir eine vollständige Beschreibung für ein freies Teilchen mit beliebigem Spin angeben. Die irreduzible Darstellung des Spins durch die Matrizen $\hat{D}(\vec{\phi})$ aus Abschnitt 2.7 ist nämlich vollständig durch die Spinbetragsquantenzahl s definiert.

Zunächst folgt aus dem im vorigen Abschnitt hergeleiteten Noether-Theorem und der Kommutatorrelation (2.6.40), daß die Erzeugenden \mathbf{K}_j für Boosts explizit zeitabhängig sein müssen, denn es muß

$$\dot{\mathbf{K}}_j = \frac{1}{i} [\mathbf{K}_j, \mathbf{H}] + \left(\frac{\partial \mathbf{K}_j}{\partial t} \right)_{\text{expl}} = \mathbf{p}_j + \left(\frac{\partial \mathbf{K}_j}{\partial t} \right)_{\text{expl}} \stackrel{!}{=} 0. \quad (2.10.1)$$

Nun folgt aber aus (2.6.37)

$$\dot{\mathbf{P}}_j = \left(\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} \right)_{\text{expl}} \stackrel{!}{=} 0 \quad (2.10.2)$$

und damit durch Integration von (2.10.1)

$$\mathbf{K}_j = m\mathbf{X}_j - \mathbf{P}_j t, \quad (2.10.3)$$

wobei \mathbf{X}_j entsprechend dem Korrespondenzprinzip mit der klassischen Mechanik die *nicht* explizit zeitabhängigen **Ortskomponentenoperatoren** sein müssen. In der Tat folgt aus (2.6.39) unter Verwendung von (2.6.36), daß diese Operatoren die **Heisenberg-Algebra** für Orts- und Impulskomponenten

$$[\mathbf{X}_j, \mathbf{P}_k] = i\delta_{jk} \mathbb{1}_{\mathcal{H}} \quad (2.10.4)$$

erfüllen. Wir haben bereits in Abschnitt 1.7 gezeigt, wie man mit diesen Kommutatorrelationen zu der aus QM 1 bekannten Darstellung der Quantentheorie mit Impuls- bzw. Ortswellenfunktionen gelangt. Für ein Teilchen mit Spin $s \neq 0$ kommen nur noch die $(2s + 1)$ Spinfreiheitsgrade hinzu. So ergibt sich z.B. für die Ortswellenfunktion eine $(2s + 1)$ -dimensionale Größe

$$\psi_\sigma(t, \vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{p} \cdot \vec{x}) \langle \vec{p}, \sigma | \psi, t \rangle, \quad (2.10.5)$$

wobei wir hier wieder im **Schrödingerbild** der Zeitentwicklung rechnen. Da der Spinoperator auch mit dem Ortsoperator vertauscht, können wir zugleich die drei Ortskomponenten und die z-Komponente des Spins messen. Die entsprechenden verallgemeinerten Eigenvektoren bezeichnen wir mit $|\vec{x}, \sigma\rangle$. Wie in Abschnitt 1.7 zeigt man sofort (*Übung!*), daß

$$\langle \vec{x}, \sigma | \vec{p}, \sigma' \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{p} \cdot \vec{x}) \delta_{\sigma\sigma'} \quad (2.10.6)$$

ist. Die Wirkung des Impulsoperators in der Ortsdarstellung ergibt sich sofort aus

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{P}} \psi_\sigma(t, \vec{x}) &= \langle \vec{x}, \sigma | \hat{\mathbf{P}} | \psi, t \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{p} \cdot \vec{x}) \vec{p} \langle \vec{p}, \sigma | \psi, t \rangle \\ &= -i \vec{\nabla}_{\vec{x}} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{p} \cdot \vec{x}) \vec{p} \langle \vec{p}, \sigma | \psi, t \rangle \\ &= -i \vec{\nabla}_{\vec{x}} \psi_\sigma(t, \vec{x}). \end{aligned} \quad (2.10.7)$$

Aus (2.7.12) folgt daraus sofort

$$\hat{H} \psi_\sigma(t, \vec{x}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \psi_\sigma(t, \vec{x}) = -\frac{\Delta_{\vec{x}}}{2m} \psi_\sigma(t, \vec{x}). \quad (2.10.8)$$

Als letztes Beispiel für den hier aus der Galileisymmetrie hergeleiteten Bra-Ket-Formalismus der nicht-relativistischen Quantentheorie für ein Teilchen mit Spin wollen wir die Wirkung einer **Drehung** auf die Ortswellenfunktion finden. Dazu benötigen wir lediglich (2.7.23). Sei $\psi'_\sigma(t, \vec{x})$ die Wellenfunktion für ein um $\vec{\phi}$ gedrehtes System. Dann gilt

$$\begin{aligned} \psi'_\sigma(t, \vec{x}) &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{p} \cdot \vec{x}) \langle \vec{p}, \sigma | \exp(i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{J}}) | \psi, t \rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{p} \cdot \vec{x}) \langle \exp(-i\vec{\phi} \cdot \vec{\mathbf{J}}) \vec{p}, \sigma | \psi, t \rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{p} \cdot \vec{x}) \sum_{\sigma'} \langle D_{\sigma\sigma'}^{-1}(\vec{\phi}) \hat{R}^{-1}(\vec{\phi}) \vec{p}, \sigma' | \psi, t \rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{p} \cdot \vec{x}) \sum_{\sigma'} D_{\sigma\sigma'}(\vec{\phi}) \langle \hat{R}^{-1}(\vec{\phi}) \vec{p}, \sigma' | \psi, t \rangle. \end{aligned} \quad (2.10.9)$$

Dabei haben wir von der Unitarität der Drehmatrizen Gebrauch gemacht, die zu $D_{\sigma'\sigma}^{-1} = D_{\sigma'\sigma}^\dagger = D_{\sigma\sigma'}^*$ führt. Nun substituieren wir $\vec{p} = \hat{R}(\vec{\phi})\vec{p}'$ und verwenden wieder die Orthogonalität von $\hat{R}(\vec{\phi})$, die zu

$$\vec{p} \cdot \vec{x} = [\hat{R}(\vec{\phi})\vec{p}'] \cdot \vec{x} = \vec{p}' \cdot [\hat{R}^\dagger(\vec{\phi})\vec{x}] = \vec{p}' \cdot \hat{R}^{-1}(\vec{\phi})\vec{x} \quad (2.10.10)$$

führt. Dies in (2.10.9) eingesetzt liefert (unter Verwendung von $\det \hat{R} = 1$)

$$\psi'_\sigma(t, \vec{x}) = \sum_{\sigma'} D_{\sigma\sigma'}(\vec{\phi}) \psi_{\sigma'}(t, \hat{R}^{-1}\vec{x}). \quad (2.10.11)$$

Man nennt eine mehrkomponentige Feldgröße ψ_σ , die sich unter Drehungen gemäß (2.10.11) verhält, ein **Spinorfeld** zur Darstellung $s \in \{0, 1/2, 1, \dots\}$. Das Spinorfeld zu $s = 0$ heißt dann entsprechend auch Skalarfeld, zu $s = 1$ Vektorfeld usw. Zur besseren Unterscheidung von den in der relativistischen Quantentheorie auftretenden Dirac-Spinoren bezeichnet man die hier in der nichtrelativistischen Quantentheorie vorkommenden Größen zum Spin $s = 1/2$ auch als **Weyl-Spinoren**.

Die Gl. (2.10.11) läßt sich freilich auch aus der Formel für infinitesimale Drehungen, angewandt auf die Wellenfunktion bestimmen, denn es ist

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}} = -i\vec{x} \times \vec{\nabla}_{\vec{x}} + \hat{\vec{S}}, \quad (2.10.12)$$

wobei $\hat{\vec{S}}$ die auf die Spinorkomponenten ψ_σ wirkenden $(2s + 1) \times (2s + 1)$ -Matrizen sind. Bezeichnen wir mit $\psi(t, \vec{x})$ also die $2s + 1$ -komponentige Spinorwellenfunktion, so ist die Änderung der Wellenfunktion unter einer infinitesimalen Drehung bis auf Größen zweiter Ordnung in $\delta\vec{\phi} = \vec{n}\delta\phi$ offenbar durch

$$\delta\psi(t, \vec{x}) = i\delta\phi\vec{n} \cdot \hat{\vec{J}}\psi(t, \vec{x}) = \delta\phi\vec{n} \cdot (\vec{x} \times \vec{\nabla}_{\vec{x}} + \hat{\vec{S}}) = \delta\phi\vec{n} \cdot \hat{\vec{S}}\psi(t, \vec{x} + \delta\phi\vec{n} \times \vec{x}) \quad (2.10.13)$$

gegeben. Dabei haben wir die Operatoridentität

$$\vec{n} \cdot (\vec{x} \times \vec{\nabla}_{\vec{x}}) = (\vec{n} \times \vec{x}) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{x}} \quad (2.10.14)$$

verwendet.

Etwas mehr Vorsicht ist bei der Betrachtung von **Galilei-Boosts** angebracht. Da die Generatoren $\vec{\mathbf{K}}$ explizit zeitabhängig sind, vertauschen sie nämlich nicht mit dem Hamiltonoperator (vgl. (2.6.40)). Die Spinorwellenfunktion im geboosteten Bezugssystem ist durch

$$\psi_\sigma(t, \vec{x}) = \langle \vec{x}, \sigma | \psi, t \rangle \quad (2.10.15)$$

gegeben. Im hier verwendeten Schrödingerbild der Zeitentwicklung gilt

$$|\psi, t\rangle = \exp(-it\mathbf{H})|\psi, 0\rangle. \quad (2.10.16)$$

Der Zustand im geboosteten Bezugssystem ist derjenige, für den zur Anfangszeit $t = 0$

$$|\psi', 0\rangle = \exp(-i\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{K}})|\psi, 0\rangle \quad (2.10.17)$$

gilt. Die Zeitentwicklung erfolgt dann mit dem ursprünglichen Hamiltonoperator

$$|\psi', t\rangle = \exp(-it\mathbf{H})|\psi', 0\rangle = \exp(-it\mathbf{H})\exp(-i\vec{\omega} \cdot \vec{\mathbf{K}})|\psi, 0\rangle. \quad (2.10.18)$$

Um wieder (2.7.13) anwenden zu können, schieben wir wieder die Entwicklung des Einsoperators nach Impuls-Spin-Eigenzuständen ein:

$$\begin{aligned}
 \psi'_\sigma(t, \vec{x}) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{p} \sum_{\sigma'} \langle \vec{x}, \sigma | \exp(-it\mathbf{H}) \exp(-i\vec{w} \cdot \vec{\mathbf{K}}) | \vec{p}, \sigma' \rangle \langle \vec{p}, \sigma' | \psi, 0 \rangle \\
 &\stackrel{(2.7.13)}{=} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{p} \sum_{\sigma'} \langle \vec{x}, \sigma | \exp(-it\mathbf{H}) | \vec{p} - m\vec{w}, \sigma' \rangle \langle \vec{p}, \sigma' | \psi, 0 \rangle \\
 &\stackrel{(2.7.12)}{=} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{p} \sum_{\sigma'} \exp\left[-\frac{i(\vec{p} - m\vec{w})^2}{2m} t\right] \langle \vec{x}, \sigma | \vec{p} - m\vec{w}, \sigma' \rangle \langle \vec{p}, \sigma' | \psi, 0 \rangle \\
 &\stackrel{(2.10.6)}{=} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \exp\left[i\vec{x} \cdot (\vec{p} - m\vec{w}) - i\frac{(\vec{p} - m\vec{w})^2}{2m} t\right] \langle \vec{p}, \sigma | \psi, 0 \rangle \\
 &= \exp\left(-im\vec{w} \cdot \vec{x} - i\frac{m\vec{w}^2}{2} t\right) \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \exp\left[i\vec{p} \cdot (\vec{x} + \vec{w}t) - i\frac{\vec{p}^2}{2m} t\right] \\
 &\quad \times \langle \vec{p}, \sigma | \psi, 0 \rangle \\
 &\stackrel{(2.7.12)}{=} \exp\left(-im\vec{w} \cdot \vec{x} - i\frac{m\vec{w}^2}{2} t\right) \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \exp[i\vec{p} \cdot (\vec{x} + \vec{w}t)] \\
 &\quad \times \langle \vec{p}, \sigma | \exp(-it\mathbf{H}) | \psi, 0 \rangle \\
 &\stackrel{(2.10.5)}{=} \exp\left(-im\vec{w} \cdot \vec{x} - i\frac{m\vec{w}^2}{2} t\right) \psi_\sigma(t, \vec{x} + \vec{w}t).
 \end{aligned} \tag{2.10.19}$$

Die Wellenfunktion verhält sich also nicht einfach wie ein Skalar unter Galilei-Boosts, wie man naiverweise erwarten würde, sondern erhält einen zusätzlichen Phasenfaktor. Wieder ergibt sich die Superwahlregel, daß Zustände zu Teilchen mit verschiedener Masse nicht superponiert werden dürfen, wenn die Theorie Galilei-invariant sein soll. Das Auftreten dieses Phasenfaktors ist auf die Rolle der Masse als nichttriviale Zentralladung zurückzuführen.

2.11 Die Pauli-Gleichung

In diesem Abschnitt behandeln wir als ein konkretes Beispiel für Teilchen mit Spin ein Teilchen mit Spin 1/2. Dies ist nicht nur die einfachste Realisierung eines Teilchens mit Spin, sondern es ist auch praktisch äußerst wichtig, da alle (bislang bekannten) Elementarteilchen, die die „Materie“ konstituieren, solche Spin-1/2-Teilchen sind⁶. Freilich beziehen sich alle Betrachtungen in diesem Abschnitt auf den Fall, daß die nichtrelativistische Beschreibung der Teilchen gerechtfertigt ist. Das ist allerdings für einen durchaus großen Anwendungsbereich der Fall. So können die Atome mit nicht zu großen Ladungszahlen durch die nichtrelativistische quantenmechanische Beschreibung der Bewegung der Elektronen um den Atomkern sehr gut beschrieben werden. Entsprechend wird auch die Molekül- und Festkörperphysik durch die nichtrelativistische Vielteilchenphysik, auf die wir im nächsten Kapitel ausführlich zu sprechen kommen, abgedeckt.

Wir wollen nun den Hamilton-Operator für ein Teilchen mit Spin 1/2, das sich in einem äußeren **elektromagnetischen Feld** \vec{E}, \vec{B} bewegt, finden. Dazu bedienen wir uns des Hilfsmittels der kanonischen Quantisierung, indem wir zunächst die Situation im Rahmen der klassischen Mechanik betrachten.

⁶Das sind die Leptonen (Elektron, Muon, τ) und Quarks (up, down, charm, strange, top, bottom).

Um die Lagrangefunktion aufstellen zu können, benötigen wir zunächst die Darstellung des elektromagnetischen Feldes durch die elektromagnetischen Potentiale:

$$\vec{E}(t, \vec{x}) = -\vec{\nabla}\Phi(t, \vec{x}) - \frac{\partial}{\partial t}\vec{A}(t, \vec{x}), \quad \vec{B}(t, \vec{x}) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(t, \vec{x}). \quad (2.11.1)$$

Dabei sind die Potentiale Φ und \vec{A} nur bis auf eine **Eichtransformation** bestimmt, denn für ein beliebiges skalares Feld χ ergeben

$$\Phi'(t, \vec{x}) = \Phi(t, \vec{x}) - \partial_t \chi(t, \vec{x}), \quad \vec{A}'(t, \vec{x}) = \vec{A}(t, \vec{x}) + \vec{\nabla} \chi(t, \vec{x}) \quad (2.11.2)$$

offensichtlich dieselben Felder \vec{E} und \vec{B} .

Die Lagrangefunktion für die (nichtrelativistische) Bewegung eines geladenen Punktteilchens im elektromagnetischen Feld lautet dann

$$L = \frac{m}{2} \dot{\vec{x}}^2 - q[\Phi(t, \vec{x}) - \dot{\vec{x}} \cdot \vec{A}(t, \vec{x})]. \quad (2.11.3)$$

Die Bewegungsgleichungen ergeben sich aus den Euler-Lagrange-Gleichungen

$$\frac{\partial L}{\partial \vec{x}} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{x}}} = 0. \quad (2.11.4)$$

Bildet man die Ableitungen, erhält man unter Verwendung von (2.11.1) in der Tat die richtige Bewegungsgleichung

$$m\ddot{\vec{x}} = q[\vec{E}(t, \vec{x}) + \dot{\vec{x}} \times \vec{B}(t, \vec{x})]. \quad (2.11.5)$$

Wir gehen nun in der üblichen Weise zum Hamilton-Formalismus über, indem wir zunächst die **kanonischen Impulse** berechnen:

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{x}}} = m\dot{\vec{x}} + q\vec{A}(t, \vec{x}). \quad (2.11.6)$$

Wir bemerken, daß dies *nicht* mit dem mechanischen Impuls $m\dot{\vec{x}}$ übereinstimmt. Die Hamilton-Funktion ergibt sich nach kurzer Rechnung (*Übung!*) zu

$$H = \vec{p} \cdot \dot{\vec{x}} - L = \frac{m}{2} \dot{\vec{x}}^2 + q\Phi(t, \vec{x}) = \frac{1}{2m} [\vec{p} - q\vec{A}(t, \vec{x})]^2 + q\Phi(t, \vec{x}). \quad (2.11.7)$$

Wir erhalten also die Hamiltonfunktion aus dem Ausdruck für die Energie eines freien Teilchens, indem wir $\dot{\vec{x}}$ gemäß (2.11.6) durch den kanonischen Impuls ausdrücken und die potentielle Energie $q\Phi$ addieren. Wir werden nun in ähnlicher Weise in der Quantentheorie vorgehen. Es ist dabei klar, daß wir den quantenmechanischen Hamilton-Operator nicht eindeutig aus der klassischen Hamiltonfunktion herleiten können. Es handelt sich bei der kanonischen Quantisierung lediglich um ein heuristisches Verfahren, welches letztlich nur durch den Erfolg in der Beschreibung der in Experimenten beobachteten Phänomene zu rechtfertigen ist. Später, bei der Behandlung der relativistischen Quantenfeldtheorie, werden wir eine überzeugendere Begründung für den nun herzuleitenden Hamilton-Operator finden.

Wir betrachten Teilchen mit Spin 1/2 genauer. Es ist gemäß Abschnitt 2.8 klar, daß die Eigenwerte des Operator S_z , die Werte $\sigma \in \{-1/2, +1/2\}$ annehmen können. Als Orthonormalbasis für die Spinzustände wählen wir entsprechend $|\sigma = 1/2\rangle$ und $|\sigma = -1/2\rangle$ (in dieser in der Literatur üblichen Reihenfolge). Bzgl. dieser Basis ergeben sich die Spin-Matrizen wie folgt. Zunächst gilt

$$S_z |\sigma\rangle = \sigma |\sigma\rangle \Rightarrow \hat{S} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} =: \frac{1}{2} \hat{\sigma}_z. \quad (2.11.8)$$

Die übrigen Komponenten finden wir aus (2.8.20)

$$\mathbf{S}_- |\sigma = 1/2\rangle = |\sigma = -1/2\rangle, \quad \mathbf{S}_- |\sigma = -1/2\rangle = 0 \quad (2.11.9)$$

und damit

$$\hat{S}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_+ = \hat{S}_-^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.11.10)$$

Aus (2.8.4) erhalten wir schließlich die übrigen Spinmatrizen

$$\begin{aligned} \hat{S}_x &= \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} =: \frac{1}{2} \hat{\sigma}_x, \\ \hat{S}_y &= \frac{1}{2i}(\hat{S}_+ - \hat{S}_-) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} =: \frac{1}{2} \hat{\sigma}_y. \end{aligned} \quad (2.11.11)$$

Die Matrizen $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ und $\hat{\sigma}_z$ heißen **Pauli-Matrizen**, und wir werden nun einige nützliche Rechenregeln herleiten. Wegen der Kommutatorrelationen (2.8.1) für die Spinoperatoren, die natürlicherweise auch für die Spinmatrizen gelten, folgt für die Pauli-Matrizen unmittelbar

$$[\hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k] = 2i\epsilon_{ljk} \hat{\sigma}_l. \quad (2.11.12)$$

Durch direktes Nachrechnen (*Übung*) findet man die nicht minder wichtigen **Antikommutatorregeln**

$$\{\hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k\} = 2\delta_{jk} \mathbb{1}_2. \quad (2.11.13)$$

Kommen wir nun zum Hamilton-Operator. Entsprechend unserem oben besprochenen heuristischen Vorgehen schreiben wir zunächst den Hamilton-Operator des freien Teilchens in der Form

$$\mathbf{H}_{\text{frei}} = \frac{1}{2m} \vec{\mathbf{p}}^2 = \frac{1}{2m} (\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{\mathbf{p}}) (\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{\mathbf{p}}). \quad (2.11.14)$$

Dabei haben wir benutzt, daß den Kommutatorrelationen (2.6.36) gemäß die Operatoren für die Impulskomponenten vertauschen und demnach der letzte Umformungsschritt sofort aus (2.11.13) folgt. Wir gehen nun entsprechend dem oben bei der analogen Situation der klassischen Mechanik besprochenen Prinzip der minimalen Substitution im Sinne der kanonischen Quantisierung vor, um den Hamilton-Operator für die Bewegung des Teilchens im elektromagnetischen Feld zu erhalten. Wie wir sogleich sehen werden, ist es dabei entscheidend, die etwas umständlich erscheinende Formulierung mit den Pauli-Matrizen in (2.11.14) zu verwenden und nicht direkt die übliche Form (welche für freie Teilchen selbstverständlich identisch ist). Wir erhalten dann den Hamilton-Operator

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m} [\hat{\vec{\sigma}} \cdot (\vec{\mathbf{p}} - q\vec{\mathbf{A}})] [\hat{\vec{\sigma}} \cdot (\vec{\mathbf{p}} - q\vec{\mathbf{A}})] + q\Phi. \quad (2.11.15)$$

Um diesen Hamilton-Operator genauer zu analysieren, bietet es sich an, in der Ortsdarstellung zu arbeiten. Dabei fassen wir die Wellenfunktionen

$$\psi_\sigma(t, \vec{x}) = \langle \vec{x}, \sigma | \Psi \rangle \quad (2.11.16)$$

zu einem zweikomponenten **Weyl-Spinor**

$$\psi(t, \vec{x}) = \begin{pmatrix} \psi_{+1/2}(t, \vec{x}) \\ \psi_{-1/2}(t, \vec{x}) \end{pmatrix} \quad (2.11.17)$$

zusammen. Auf diesen Wellenfunktionen operieren dann sowohl die aus QM I bekannten Differentialoperatoren als auch 2×2 -Matrizen wie die Pauli-Matrizen. Der Hamilton-Operator (2.11.15) lautet in der Ortsdarstellung offenbar

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} [\hat{\vec{\sigma}} \cdot (-i\vec{\nabla} - q\vec{A})] [\hat{\vec{\sigma}} \cdot (-i\vec{\nabla} - q\vec{A})] + q\hat{\Phi}. \quad (2.11.18)$$

Um den physikalischen Gehalt dieses Hamilton-Operators zu analysieren, multiplizieren wir zunächst den ersten Term (2.11.15) aus:

$$[\hat{\vec{\sigma}} \cdot (\vec{p} - q\vec{A})] [\hat{\vec{\sigma}} \cdot (\vec{p} - q\vec{A})] = (\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p})(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p}) - q[(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p})(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{A}) + (\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{A})(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p})] + q^2(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{A})(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{A}). \quad (2.11.19)$$

Dies läßt sich noch weiter vereinfachen. Da die Impulskomponenten miteinander kommutieren, gilt

$$(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p})(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p}) = \hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k p_j p_k = \frac{1}{2} \{ \hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k \} p_j p_k = \delta_{jk} p_j p_k = \vec{p}^2, \quad (2.11.20)$$

wobei wir (2.11.13) verwendet haben. Da das Vektorpotential eine reine Funktion des Ortsoperators ist, vertauschen auch dessen Komponenten, so daß dieselbe Rechnung

$$(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{A})(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{A}) = \vec{A}^2 \quad (2.11.21)$$

ergibt. Wenden wir uns nun dem mittleren Term in (2.11.19) zu. Hier ist Vorsicht geboten, denn die Impulskomponenten vertauschen nicht mit den Komponenten des ortsabhängigen Vektorpotentials. Hier ist es am einfachsten, die Wirkung des entsprechenden Differentialoperators auf die Wellenfunktion zu untersuchen:

$$\begin{aligned} [(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{p}})(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{A}}) + (\hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{A}})(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{p}})]\psi &= -i\hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k (\partial_j A_k + A_j \partial_k)\psi \\ &= -i\hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k [(\partial_j A_k)\psi + A_k \partial_j \psi + A_j \partial_k \psi]. \end{aligned} \quad (2.11.22)$$

Jetzt schreiben wir das Produkt der Pauli-Matrizen mit Hilfe von (2.11.12) und (2.11.13) wie folgt um:

$$\hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k = \frac{1}{2} \left[\{ \hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k \} + [\hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k] \right] = \delta_{jk} \mathbb{1}_2 + i\epsilon_{ljk} \hat{\sigma}_l. \quad (2.11.23)$$

Dies in (2.11.22) eingesetzt und ein wenig umgeformt, ergibt

$$[(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{p}})(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{A}}) + (\hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{A}})(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \hat{\vec{p}})]\psi = (\hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{A}} + \hat{\vec{A}} \cdot \hat{\vec{p}})\psi + (\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{B})\psi. \quad (2.11.24)$$

Dabei haben wir $\vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{B}$ gemäß (2.11.1) verwendet. Fassen wir nun (2.11.20-2.11.24) zu dem Hamilton-Operator (2.11.18) zusammen, finden wir schließlich

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A})^2 - \frac{q}{2m} g_s (\vec{S} \cdot \vec{B}) + q\Phi \quad \text{mit} \quad g_s = 2, \quad (2.11.25)$$

wobei wir $\vec{\sigma} = 2\vec{S}$ geschrieben haben.

Daraus ergibt sich, daß ein elementares Teilchen (z.B. ein Elektron) bei minimaler Substitution ein mit dem Spin des Teilchens verknüpft magnetisches Moment besitzt, das durch den Operator

$$\vec{\mu} = \mu_B g_s \vec{S} \quad \text{mit} \quad \mu_B = \frac{e}{2m_e} = 5.7883817555(79) \cdot 10^{-11} \frac{\text{MeV}}{\text{T}}, \quad g_s = 2 \quad (\text{SI-Einheiten}) \quad (2.11.26)$$

repräsentiert wird (Zahlenwert aus $[N^+ 10]$). Es ist dabei zu beachten, daß für ein Elektron der negative Wert $q_e = -e$ mit der Elementarladung

$$e = 1.602176487(40) \cdot 10^{-19} \text{ C} \quad (\text{SI-Einheiten}) \quad (2.11.27)$$

zu verwenden ist. In unseren natürlichen Einheiten, wo das modifizierte Wirkungsquantum $\hbar = 1$ und die Lichtgeschwindigkeit $c = 1$ gesetzt sind, und in den ebenfalls in diesem Skript verwendeten **Heaviside-Lorentz-Einheiten** (HL-Einheiten) der Elektrodynamik ist e eine dimensionslose Variable, die sich aus der **Sommerfeldschen Feinstrukturkonstante**

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi} = \frac{1}{137.035999679(94)} \quad (\text{HL-Einheiten}) \quad (2.11.28)$$

ergibt. In SI-Einheiten ist

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \quad (\text{SI-Einheiten}). \quad (2.11.29)$$

Man kann übrigens leicht zwischen natürlichen Einheiten und SI-Einheiten hin- und herrechnen, indem man den Konversionsfaktor

$$\hbar c = 197.3269631(49) \text{ MeV fm} \quad (2.11.30)$$

verwendet. Außerdem ist in HL-Einheiten $\epsilon_0 = \mu_0 = 1$ zu setzen.

Der Parameter g_s in (2.11.25) heißt **Gyrofaktor** und ist (ähnlich wie die elektrische Ladung) eine für das Teilchen charakteristische Größe. Für Elementarteilchen ergibt sich aus dem Prinzip der minimalen Kopplung an elektromagnetische Felder der Gyrofaktor 2, wobei dies allerdings in der hier gezeigten nichtrelativistischen Behandlung nicht allzu zwingend erscheint, weil wir ja die minimale Kopplung in der spezifischen Weise mit den in den Hamiltonoperator freier Teilchen eingeschobenen Pauli-Matrizen (2.11.14) vornehmen mußten. Würden wir die minimale Kopplung einfach mit dem Hamiltonoperator $\vec{p}^2/(2m)$ vornehmen, erhielten wir ein verschwindendes magnetisches Moment, also $g_s = 0$. In der relativistischen Beschreibung von Spin-1/2-Teilchen vermöge der **Dirac-Gleichung** führt das Prinzip der minimalen Kopplung zwingend auf $g_s = 2$ für elementare Teilchen. Dies war (neben der Vorhersage der Existenz von Antiteilchen) einer der größten Erfolge der Dirac-Gleichung.

Man bezeichnet die in (2.11.26) definierte Größe μ_B als das **Bohrsche Magneton**. Es wurde von Bohr in seinem Atommodell, basierend auf der von ihm entwickelten „alten Quantentheorie“, bei dem Versuch, die Aufspaltung der Spektrallinien bei Atomen in magnetischen Feldern zu erklären, (**Zeeman-Effekt**) eingeführt. Während die klassische Elektronentheorie von Lorentz eine kontinuierliche Aufspaltung der Spektrallinien ergab, konnte Bohr den sog. **anomalen Zeemaneffekt** erklären, der auf der Quantelung des Bahndrehimpulses beruht. Dies werden wir gleich noch näher ausführen. Die allerdings ebenfalls beobachtete Aufspaltung in nur 2 (statt mindestens 3 aufgrund der Quantelung des Bahndrehimpulses) konnte nur durch Einführung des Elektronenspins erklärt werden, die schließlich durch Goudsmith und Uhlenbeck erfolgte, nachdem Kramers von Pauli überzeugt worden war, diese Idee besser nicht zu veröffentlichen. Der Hamilton-Operator (2.11.25) wurde schließlich von Pauli vorgeschlagen, nachdem er schließlich doch von der Korrektheit des Spins zur Spinquantenzahl 1/2 überzeugt werden konnte. Die Schrödinger-Gleichung mit dem Hamilton-Operator (2.11.25) für die zweikomponentige Weyl-Spinor-Wellenfunktion,

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \vec{x}) = -\frac{1}{2m} (\vec{\nabla} - iq\vec{A})^2 \psi(t, \vec{x}) - g_s \mu_B \hat{S} \cdot \vec{B}(t, \vec{x}) \psi(t, \vec{x}) + q\Phi(t, \vec{x}) \psi(t, \vec{x}) \quad (2.11.31)$$

heißt daher **Pauli-Gleichung**.

Wir bemerken noch, daß sich bei der sehr genau möglichen Vermessung des magnetischen Moments des Elektrons eine kleine Abweichung vom Wert $g_e = 2$ für ein elementares Teilchen ergibt. Der neueste Wert für diese Abweichung beträgt gemäß $[N^+10]$

$$\frac{g_e - 2}{2} = (1159.65218073 \pm 0.00000028) \cdot 10^{-6}. \quad (2.11.32)$$

Theoretisch sind diese winzigen Abweichungen durch sich in der **Quantenelektrodynamik** ergebende Korrekturen in höherer Ordnung der Störungstheorie erklärbar.

Die Hadronen, allen voran die Kernbausteine Proton und Neutron, weisen allerdings deutlich von 2 verschiedene Gyrofactoren auf. Dies weist darauf hin, daß sie keine elementaren Teilchen sind, sondern ein komplizierter Bindungszustand aus drei Valenzquarks aufgrund der **starken Wechselwirkung**. Die Werte für die Gyrofactoren sind durch (wieder cf. $[N^+10]$)

$$\frac{1}{2}g_p = 2.792847356 \pm 0.000000023, \quad \frac{1}{2}g_n = -1.9130427 \pm 0.00000005 \quad (2.11.33)$$

gegeben. Freilich beziehen sich diese Gyrofactoren auf das **Bohrsche Kernmagneton**

$$\mu_B^{(\text{nucl})} = \frac{e}{2m_p} = 3.1524512326(45) \cdot 10^{-14} \frac{\text{MeV}}{\text{T}} \quad (\text{SI-Einheiten}). \quad (2.11.34)$$

Der Gyrofaktor $g_s \simeq 2$, der sich hier aus der minimalen Kopplung in der spezifischen Form des freien Hamilton-Operators mit σ -Matrizen ergeben hat, folgt (allerdings eindeutig!) auch aus der relativistischen **Dirac-Gleichung**, auf die wir in einem späteren Kapitel genauer eingehen werden.

In der Atomphysik (insbesondere bei der Behandlung des Wasserstoffatoms in der Näherung, wo das Proton als einfaches Coulomb-Feld behandelt wird) ist es bei der Berechnung der Energieeigenzustände notwendig, den Symmetrien des Problems entsprechend die Pauligleichung in räumliche Kugelkoordinaten umzuschreiben, denn man wird simultane Eigenzustände von \mathbf{H} , \vec{J}^2 , J_z und S_z bzw. \mathbf{H} , \vec{J}^2 , \vec{L}^2 und L_z und S_z verwenden (bei ausgeschaltetem äußeren Magnetfeld). Den Zeeman-Effekt kann man dann für schwache Felder störungstheoretisch behandeln. Wir gehen darauf in dieser Vorlesung nicht näher ein. Diese Probleme werden ausführlich in vielen Quantenmechanik-Lehrbüchern behandelt (z.B. $[LL77]$).

Der Vollständigkeit halber schreiben wir noch den Hamilton-Operator für ein **konstantes Magnetfeld** etwas um. Offenbar ist das Vektorpotential durch

$$\vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{x} \times \vec{B} \quad \text{für} \quad \vec{B} = \text{const} \quad (2.11.35)$$

gegeben, denn es gilt in der Tat

$$(\vec{\nabla} \times \vec{A})_j = \epsilon_{jkl} \partial_k A_l = -\frac{1}{2} \epsilon_{jkl} \epsilon_{lmn} \partial_k (x_m B_n) = -\frac{\delta_{jm} \delta_{kn} - \delta_{jn} \delta_{km}}{2} B_n \delta_{km} = B_j. \quad (2.11.36)$$

Der erste Term in (2.11.25) lautet also

$$(\vec{p} - q\vec{A})^2 = \vec{p}^2 - q(\vec{p}\vec{A} + \vec{A}\vec{p}) + q^2\vec{A}^2 = \vec{p}^2 - q\vec{B} \cdot \vec{L} + q^2\vec{A}^2. \quad (2.11.37)$$

Dabei haben wir verwendet, daß $[\mathbf{x}_j, \mathbf{p}_k] = 0$ für $j \neq k$ und daher $\vec{\mathbf{L}} = \vec{\mathbf{x}} \times \vec{\mathbf{p}} = -\vec{\mathbf{p}} \times \vec{\mathbf{x}}$ ist. Setzen wir dies in (2.11.25) ein, finden wir

$$\mathbf{H} = \frac{\vec{\mathbf{p}}^2}{2m} - \mu_B \vec{\mathbf{B}} \cdot (\vec{\mathbf{L}} + g_s \vec{\mathbf{S}}) + \frac{q^2}{2m} \vec{\mathbf{A}}^2 + q\Phi \quad \text{für} \quad \vec{\mathbf{A}} = -\frac{1}{2} \vec{\mathbf{x}} \times \vec{\mathbf{B}}, \quad \vec{\mathbf{B}} = \text{const.} \quad (2.11.38)$$

Man kann aufgrund des zweiten Terms

$$\vec{\mathbf{M}} = \mu_B (\vec{\mathbf{L}} + g_s \vec{\mathbf{S}}) \quad (2.11.39)$$

als Operator für das **totale magnetische Moment** des Teilchens interpretieren. Dabei entspricht der Bahnanteil im Sinne des Korrespondenzprinzips der entsprechenden klassischen Größe für ein auf einer Kreisbahn laufendes geladenes Punktteilchen (*Übung*). Der Spinanteil weist jedoch den zusätzlichen Gyrofaktor g_s auf und besitzt kein Analogon in der klassischen Physik eines geladenen Punktteilchens. Wir betrachten schließlich noch die **Eichinvarianz** der Pauligleichung, d.h. die Unabhängigkeit der physikalischen Bedeutung der Zeitentwicklung der Wellenfunktion von der Wahl der Eichung der elektromagnetischen Potentiale. Dazu machen wir den Ansatz

$$\psi'(t, \vec{\mathbf{x}}) = \exp[i\alpha(t, \vec{\mathbf{x}})]\psi(t, \vec{\mathbf{x}}) \quad (2.11.40)$$

für die eichtransformierte Wellenfunktion, denn ein reiner Phasenfaktor ändert nichts am physikalischen Gehalt der Wellenfunktion. In der Tat gilt dann für die linke Seite der Pauli-Gleichung (2.11.31)

$$i \frac{\partial \psi'}{\partial t} = i \exp(i\alpha) \left(i \frac{\partial \alpha}{\partial t} \psi + \frac{\partial \psi}{\partial t} \right). \quad (2.11.41)$$

Zur Auswertung der rechten Seite betrachten wir zunächst

$$(\vec{\nabla} - iq\vec{\mathbf{A}}')\psi' = \exp(i\alpha) [\vec{\nabla}\psi + i(\vec{\nabla}\alpha)\psi - iq(\vec{\mathbf{A}} + \vec{\nabla}\chi)\psi]. \quad (2.11.42)$$

Setzen wir nun

$$\alpha = q\chi, \quad (2.11.43)$$

so folgt

$$(\vec{\nabla} - iq\vec{\mathbf{A}}')\psi' = \exp(iq\chi)(\vec{\nabla} - iq\vec{\mathbf{A}})\psi. \quad (2.11.44)$$

Wendet man darauf nochmals diesen Operator an, folgt

$$(\vec{\nabla} - iq\vec{\mathbf{A}}')^2 \psi' = \exp(iq\chi)(\vec{\nabla} - iq\vec{\mathbf{A}})^2 \psi. \quad (2.11.45)$$

Damit folgt zusammen mit (2.11.41) und (2.11.43)

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \psi'}{\partial t} &= \exp(iq\chi) \left(i \frac{\partial \psi}{\partial t} - q \frac{\partial \chi}{\partial t} \psi \right) = -(\vec{\nabla} - iq\vec{\mathbf{A}}')^2 \psi' - \mu_B g_s \vec{\mathbf{B}} \cdot \vec{\mathbf{S}} \psi' + q\Phi' \psi' \\ &= \exp(iq\chi) \left[-\frac{1}{2m} (\vec{\nabla} - iq\vec{\mathbf{A}})^2 \psi + \left(\Phi - \frac{\partial \chi}{\partial t} \right) \psi - \mu_B g_s \vec{\mathbf{B}} \cdot \vec{\mathbf{S}} \psi \right]. \end{aligned} \quad (2.11.46)$$

Kürzen des gemeinsamen Phasenfaktors ergibt also, daß aus der Pauligleichung für ψ' mit den elektromagnetischen Potentialen Φ' und $\vec{\mathbf{A}}'$ die Pauligleichung für ψ mit den ursprünglichen elektromagnetischen Potentialen Φ und $\vec{\mathbf{A}}$ folgt. Die Pauli-Gleichung ist also invariant unter der **lokalen Eichtransformation**

$$\begin{aligned} \psi'(t, \vec{\mathbf{x}}) &= \exp[iq\chi(t, \vec{\mathbf{x}})]\psi(t, \vec{\mathbf{x}}), \\ \Phi'(t, \vec{\mathbf{x}}) &= \Phi(t, \vec{\mathbf{x}}) - \frac{\partial}{\partial t} \chi(t, \vec{\mathbf{x}}), \quad \vec{\mathbf{A}}'(t, \vec{\mathbf{x}}) = \vec{\mathbf{A}}(t, \vec{\mathbf{x}}) + \vec{\nabla} \chi(t, \vec{\mathbf{x}}). \end{aligned} \quad (2.11.47)$$

Dabei ist χ ein beliebiges skalares Feld. Wir werden in einem späteren Kapitel noch genau auf die Eichinvarianz der Elektrodynamik zurückkommen, die sich dort als notwendige Folgerung aus der Symmetrie der speziell relativistischen Raumzeit (**Minkowski-Raum**) unter **Poincaré-Transformationen** ergeben wird.

Eine interessante Folgerung aus dem Transformationsverhalten (2.11.47) ist, daß es in Theorien mit mehreren Teilchensorten keine Überlagerungen von Zustandsvektoren (bzw. Wellenfunktionen in der Ortsdarstellung) zu Teilchen mit verschiedener Ladung geben darf, weil für solche Überlagerungen die Theorie nicht mehr eichinvariant wäre, weil dann die Phasenfaktoren für die verschiedenen Wellenfunktionen verschieden wären, denn diese enthält explizit die jeweilige Ladung der Teilchen. Dieses Verbot von Superpositionen heißt **Ladungs-Superauswahlregel**.

Wir leiten schließlich noch die Erhaltung der Norm der Wellenfunktion unter Zeitentwicklungen aus der Pauli-Gleichung her, die im abstrakten Bra-Ket-Formalismus (z.B. im Schrödingerbild) schon aus der Selbstadjungiertheit von \mathbf{H} folgt. Allerdings ergibt sich bei der Herleitung für die Wellenfunktion der **Wahrscheinlichkeitsstrom** für Spin-1/2-Teilchen im elektromagnetischen Feld, der uns im nächsten Kapitel noch nützlich sein wird. Die Wahrscheinlichkeitsdichte für die Messung eines Teilchens am Ort \vec{x} mit Spin-z-Komponente $\sigma = \pm 1/2$ ist nach dem Bornschen Postulat durch

$$P(t, \vec{x}, \sigma) = |\langle \vec{x}, \sigma | \psi(t) \rangle|^2 = |\psi_\sigma(t, \vec{x})|^2 \quad (2.11.48)$$

gegeben⁷. Interessiert man sich für die reine Teilchendichte, unabhängig davon, welche Spineinstellung man vorfindet, folgt

$$P(t, \vec{x}) = \sum_{\sigma} |\psi_\sigma(t, \vec{x})|^2 = \psi^\dagger(t, \vec{x})\psi(t, \vec{x}). \quad (2.11.49)$$

Wir wollen nun zeigen, daß es eine **Wahrscheinlichkeitsstromdichte** $\vec{j}(t, \vec{x})$ gibt, so daß die **Kontinuitätsgleichung**

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \quad (2.11.50)$$

gilt. Dazu leiten wir (2.11.49) nach der Zeit ab und verwenden die Pauli-Gleichung für die Zeitableitungen. Wir benötigen dazu zunächst die Pauligleichung für den adjungierten Weyl-Spinor ψ^\dagger . Bilden wir also die hermitesch Adjungierte der Gleichung (2.11.31):

$$-i \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} = -\frac{1}{2m} (\vec{\nabla} + i\vec{A})^2 \psi^\dagger - g_s \mu_B \psi^\dagger \hat{S} \cdot \vec{B} + q\Phi(t, \vec{x})\psi^\dagger. \quad (2.11.51)$$

dabei haben wir die Selbstadjungiertheit der Spinmatrizen verwendet. Nach einigen Umformungen (*Übung*) gelangt man schließlich zu der folgenden Form des Wahrscheinlichkeitsstromes

$$\vec{j} = \frac{1}{2mi} [\psi^\dagger \vec{\nabla} \psi - (\vec{\nabla} \psi^\dagger) \psi - 2iq\vec{A} \psi^\dagger \psi]. \quad (2.11.52)$$

Es läßt sich auch leicht zeigen (*Übung*), daß dieser Ausdruck unter der Eichtransformation (2.11.47) invariant ist, wie es für physikalisch beobachtbare Größen wie den Wahrscheinlichkeitsstrom sein muß⁸.

⁷Wir verwenden hier o.b.d.A. das Schrödinger-Bild der Zeitentwicklung.

⁸Diese Größe ist physikalisch beobachtbar, denn man kann die Anzahl der Teilchen eines im durch ψ beschriebenen Zustand präparierten Ensembles zählen, die in einem bestimmten Zeitintervall dt durch ein Flächenelement $d\vec{F}$ fliegen. Der Erwartungswert dieser Anzahl von Teilchen (pro einlaufendes Teilchen) ist dann definitionsgemäß durch $dN = dt d\vec{F} \cdot \vec{j}$ gegeben.

Wir bestimmen noch den **Operator der elektrischen Stromdichte**. Dazu müssen wir den Erwartungswert der Teilchenenergie

$$E = \langle \mathbf{H} \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \psi^\dagger \mathbf{H} \psi \quad (2.11.53)$$

mit dem Hamilton-Operator (2.11.25) betrachten. Den Zusammenhang zur elektrischen Stromdichte ergibt sich aus dem Korrespondenzprinzip. In der Lagrangefunktion (2.11.3) hat man den Anteil

$$L_{\text{mag}} = q \dot{\vec{x}} \cdot \vec{A} \quad (2.11.54)$$

bzw. für eine kontinuierliche Ladungsverteilung

$$L_{\text{mag}} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \vec{J} \cdot \vec{A} \quad \text{mit} \quad \vec{J} = \rho \vec{v}, \quad (2.11.55)$$

wo ρ die Ladungsdichte der Ladungsverteilung bezeichnet. Variiert man also in der Lagrangefunktion \vec{A} , erhält man

$$\delta L = \delta L_{\text{mag}} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \delta \vec{A} \cdot \vec{J}. \quad (2.11.56)$$

Die entsprechende Variation im Hamilton-Operator ist

$$\delta H = -\delta L = - \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \delta \vec{A} \cdot \vec{J}. \quad (2.11.57)$$

Genauso zeigt man (*Übung*), daß eine Variation nach dem skalaren Potential Φ

$$\delta H = -\delta L = + \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \delta \Phi \rho \quad (2.11.58)$$

zur elektrischen Ladungsdichte führt.

Wenden wir diese Gleichungen auf (2.11.53) mit dem Hamilton-Operator (2.11.25) an, erhalten wir für die elektrische Ladungs- und Stromdichte

$$\rho = q \psi^\dagger \psi = qP, \quad \vec{J} = q\vec{j} + \mu_B g_s \vec{\nabla} \times (\psi^\dagger \hat{S} \psi). \quad (2.11.59)$$

Neben der konvektiven Stromdichte $\rho \vec{v} = q\vec{j}$ erhalten wir also noch einen Beitrag vom intrinsischen magnetischen Moment der Teilchen, den sie aufgrund ihres Spins besitzen. Es ist klar, daß wegen (2.11.50) und der Relation $\vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{V}) = 0$ für ein beliebiges Vektorfeld \vec{V} die Kontinuitätsgleichung auch für die elektrische Ladung gilt,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0, \quad (2.11.60)$$

d.h. die elektrische Ladung ist eine Erhaltungsgröße. Wir weisen noch darauf hin, daß bei einer Normierung von ψ auf 1 die hier betrachteten Ladungen und Ströme sich auf ein Teilchen im Sinne der Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Quantentheorie beziehen. Will man reale Ensembles aus N Teilchen beschreiben, wobei man die Korrelationen zwischen den Teilchen vernachlässigen kann, kann man die entsprechenden Größen mit N multiplizieren, um die im realen Experiment auftretenden Ladungs- und Stromverteilungen zu berechnen.

2.12 Der Stern-Gerlach-Versuch

Der Stern-Gerlach-Versuch zur „Richtungsquantelung“ wurde 1922, also schon vor der Entwicklung der modernen Quantentheorie ausgeführt⁹. Das Bohr-Sommerfeldsche Atommodell sagte allerdings bereits damals voraus, daß der Drehimpuls quantisiert sein sollte. Außerdem war bekannt, daß ein Atom mit einer Elektronenkonfiguration in einem Zustand zum Bahndrehimpuls $l \neq 0$ (in moderner Sprache ausgedrückt) ein entsprechendes magnetisches Moment wie durch (2.11.39) aufweisen muß. Der Spin war allerdings noch unbekannt. Gleichwohl sollte ein Atomstrahl mit Atomen mit magnetischem Moment in einem inhomogenen Magnetfeld abgelenkt werden. Während die klassische Physik einfach eine kontinuierliche Aufweitung des Strahls vorhersagte, mußte nach dem Bohrschen Atommodell der Strahl in einem Magnetfeld mit Feldgradient in z-Richtung entsprechend der Quantelung der z-Komponente des Bahndrehimpulses in diskreter Weise abgelenkt werden. Stern und Gerlach gelang der Nachweis dieser Richtungsquantelung eines Atomstrahls von Silberatomen. Sie fanden eine Aufspaltung des Strahls entsprechend zweier Einstellmöglichkeiten der z-Komponente des Drehimpulses, was mit der damaligen Vorhersage des Bohr-Sommerfeld-Modells verträglich war. Die moderne Quantentheorie würde allerdings bei einem Teilchen ohne Spin nur Aufspaltungen in eine ungerade Anzahl von Strahlen vorhersagen, denn der Bahndrehimpuls gehört immer zu Darstellungen der Drehgruppe mit Drehimpulsquantenzahl $l \in \mathbb{N}_0$, und die z-Komponente des Bahndrehimpulses kann immer nur die $(2l + 1)$ Werte $m_z = \{0, \pm 1, \dots, \pm l\}$ annehmen.

Im Lichte der modernen Quantentheorie betrachtet ist allerdings die Aufspaltung in zwei Strahlen für Silberatome leicht erklärbar: Das Silberatom besitzt ein Valenzelektron, das sich im Grundzustand in einem Bahndrehimpulszustand $l = 0$ (s-Orbital) befindet. Die übrigen Elektronen füllen ihre entsprechenden Orbitale vollständig auf, so daß deren Gesamtdrehimpuls 0 ist. Entsprechend ist der Gesamtdrehimpuls des Atoms $J = 1/2$. Es verhält sich also wie ein neutrales Teilchen mit einer großen Masse und einem magnetischen Moment aufgrund des Spins $1/2$ dieses Elektrons, solange das Atom nicht auf irgendeine Weise in angeregte Zustände übergeht. Dies ist aber unter den Versuchsbedingungen von Stern und Gerlach nur höchst unwahrscheinlich. Daher können wir bei der Analyse des Experiments das Silberatom einfach als neutrales Teilchen mit einem magnetischen Moment entsprechend dem vom Spin des Valenzelektrons behandeln. Entsprechend der beiden Einstellmöglichkeiten für die z-Komponente des Spins ($\sigma = \pm 1/2$) spaltet sich also der Strahl in der Tat in zwei Teilstrahlen auf, von denen einer aus Teilchen mit $\sigma = 1/2$ und einer aus solchen mit $\sigma = -1/2$ besteht.

Schon diese qualitative Beschreibung zeigt, warum der Stern-Gerlach-Versuch auch heute noch als Musterbeispiel für den quantenmechanischen Meßprozeß dient: Er zeigt alle Charakteristika einer quantenmechanischen Messung, und wir wollen daher dieses Experiment aus quantentheoretischer Sicht genauer betrachten. Der Versuchsaufbau ist schematisch in Abb. 2.1 dargestellt. In einem Ofen wird Silber geschmolzen, und durch eine Öffnung tritt ein Atomstrahl aus und wird durch Blenden auf eine bestimmte Richtung fokussiert. Dies können wir im Sinne der Quantentheorie als **Präparation der Silberatome** auffassen. Wir haben es allerdings mit einem **gemischten Zustand** von Teilchen zu tun, die einen Impuls besitzen, der entsprechend einer thermischen Verteilung um den Mittelwert $\langle \vec{p} \rangle = \vec{e}_x p_0$ verteilt ist. Die Atome durchlaufen nun ein **inhomogenes zeitlich konstantes Magnetfeld**, welches wir in der Nähe des Strahls durch die Entwicklung bis zur ersten Ordnung in den Raumkoordinaten approximieren können:

$$\vec{B} = (B_0 + \beta z)\vec{e}_z - \beta y\vec{e}_y. \quad (2.12.1)$$

⁹Eine äußerst vergnügliche Darstellung der Historie des Stern-Gerlach-Versuchs findet sich in [FH03].

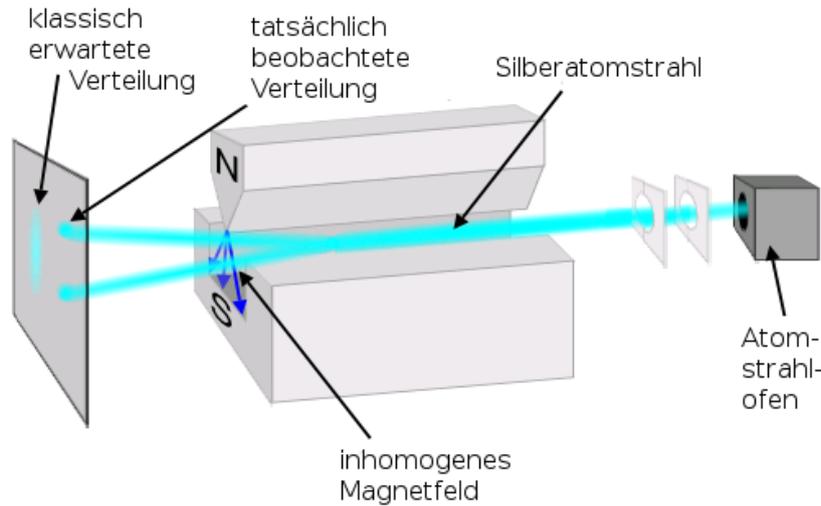


Abbildung 2.1: Schematischer Aufbau des Stern-Gerlach-Versuchs (Quelle des Bildes: Wikipedia).

Dieses Feld erfüllt offenbar die Maxwell-Gleichungen

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad \vec{\nabla} \times \vec{B} = 0 \quad (2.12.2)$$

für ein statisches Magnetfeld in einem quellenfreien Raumbereich. Der Hamiltonoperator (2.11.25) vereinfacht sich im gegebenen Falle wegen $q = 0$ zu¹⁰

$$\mathbf{H} = \frac{\vec{p}^2}{2M} + \mu_B g_s \vec{S} \cdot \vec{B}. \quad (2.12.3)$$

Setzen wir (2.12.1) ein, erhalten wir ein vom Spin abhängiges Potential, dessen klassisches Analogon einer konstanten Kraft entspricht. Um die Analyse weiter zu vereinfachen, nehmen wir an, daß $|B_0| \gg \beta |y|$ ist, wobei wir annehmen, der Strahl sei hinreichend in xy -Richtung um $x = 0, y = 0$ fokussiert. Dann können wir zunächst den einfacheren Hamiltonoperator

$$\mathbf{H}' = \frac{\vec{p}^2}{2M} + \mu_B g_s (B_0 + \beta z) S_z \quad (2.12.4)$$

verwenden. Betrachten wir Teilchen in einem S_z -Eigenzustand, haben wir es also mit der Bewegung in einem konstanten Kraftfeld zu tun, und die Atome werden für $\sigma = 1/2$ nach unten, für $\sigma = -1/2$ nach oben abgelenkt. Ein Atomstrahl, dessen Zustand durch eine beliebige Superposition aus solchen Eigenzuständen beschrieben wird, spaltet sich also entsprechend in zwei Teilstrahlen auf.

Falls die Strahlen in der yz -Ebene hinreichend fokussiert bleiben, bilden sich zwei wohlseparierte Teilstrahlen, die in der hier betrachteten Näherung aus reinen S_z -Eigenzuständen bestehen, d.h. in diesen Teilstrahlen haben wir es mit Teilchen zu tun, die eine wohldefinierte z -Komponente des Spins besitzen. Vorher war diese Spinkomponente unbestimmt. Durch das inhomogene Magnetfeld können wir nun einen der Teilstrahlen ausfiltern und so Teilchen mit determinierter Spinkomponente präparieren. Der Zustand des Gesamtensembles wird aber immer noch durch eine Superposition bzw. durch einen Statistischen Operator beschrieben. Allerdings sind nach Durchlaufen des Magnetfeldes **Ort und Spin- z -Komponente** verschränkt, d.h. eine hinreichend genaue Ortsmessung liefert zugleich auch einen

¹⁰Das Vorzeichen des Spinterms kehrt sich wegen der negativen Ladung des Elektrons um.

wohlbestimmten Spinzustand. Man kann also durch Nachweis eines Silberatoms am Schirm mit einer nahezu 100%-Wahrscheinlichkeit sagen, welchen Wert $\sigma = \pm 1/2$ die Spin-z-Komponente dieses Silberatoms besitzt. Voraussetzung dafür ist allerdings, daß der Ort der Teilchen zumindest in z-Richtung so scharf bestimmt ist, daß die beiden Teilstrahlen als wohlsepariert angesehen werden können. In diesem Zusammenhang nennt man die Ortskomponente z auch eine **Zeigervariable**, denn sie wird bei dem betrachteten Versuchsaufbau zur Messung der eigentlich interessierenden Observable, nämlich der Spin-z-Komponente, im Sinne des Zeigers eines Meßgerätes verwendet.

Wir betrachten nun diese Vorgänge quantitativ. Zunächst beschreiben wir den Anfangszustand des Atomstrahls vereinfacht durch einen beliebigen Spinzustand und bzgl. des Ortes als Gaußsches Wellenpaket, das um $\vec{x} = 0$ gepeakt ist und einen entsprechend der Unschärferelation bestimmten Impuls mit $\langle \vec{p} \rangle = p_0 \vec{e}_x$ besitzt:

$$\psi_\sigma(t=0, \vec{x}) = \frac{c_\sigma}{(2\pi\Delta^2)^{3/4}} \exp\left(-\frac{\vec{x}^2}{4\Delta^2} + ip_0x\right), \quad |c_{1/2}|^2 + |c_{-1/2}|^2 = 1. \quad (2.12.5)$$

Diese Wellenfunktion ist normiert (*Übung!*):

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} |\psi(t=0, \vec{x})|^2 = 1. \quad (2.12.6)$$

Die zeitliche Entwicklung dieser Wellenfunktion ist durch den Hamiltonoperator (2.12.3) bestimmt.

Wir betrachten hier aber nur den einfacheren Hamiltonoperator (2.12.4) und berechnen den **Propagator**. Dazu verwenden wir die Methode, die wir in Abschnitt 1.10 verwendet haben, um den Propagator für das freie Teilchen zu berechnen.

Wir berechnen also die Zeitentwicklung im Heisenberg-Bild, d.h. der Zustandsvektor $|\psi\rangle$ ist zeitlich konstant, und die Zeitabhängigkeit der hier relevanten Observablenoperatoren wird durch die Heisenbergschen Bewegungsgleichungen

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \frac{1}{i} [\vec{x}, \mathbf{H}'] = \frac{\vec{p}}{M}, \quad (2.12.7)$$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{1}{i} [\vec{p}, \mathbf{H}'] = -\vec{e}_z M a S_z, \quad (2.12.8)$$

$$\frac{dS_z}{dt} = \frac{1}{i} [S_z, \mathbf{H}'] = 0 \quad (2.12.9)$$

beschrieben. Dabei haben wir zur Abkürzung die Beschleunigung $a = \mu_B g_s \beta / M$ eingeführt. Die Gleichungen (2.12.7)-(2.12.9) sind unter Berücksichtigung der Anfangsbedingungen

$$\vec{x}(0) = \vec{x}', \quad \vec{p}(0) = \vec{p}', \quad S_z(0) = S'_z \quad (2.12.10)$$

zu lösen. Die Integration ist in diesem Falle sehr einfach und ergibt (*Übung!*)

$$\begin{aligned} \vec{x} &= -\frac{a}{2} t^2 S'_z \vec{e}_z + \frac{1}{M} \vec{p}' t + \vec{x}', \\ \vec{p} &= -M a t S'_z \vec{e}_z + \vec{p}', \\ S_z &= S'_z. \end{aligned} \quad (2.12.11)$$

Wie wir in (1.10.17) gesehen haben, ist das konjugiert Komplexe des Propagators durch

$$U_{\sigma\sigma'}^*(t, \vec{x}; t_0=0, \vec{x}') = \langle t=0, \vec{x}', \sigma' | t, \vec{x}, \sigma \rangle = \langle t=0, \vec{x}', \sigma' | \exp(it\mathbf{H}) | t=0, \vec{x}, \sigma \rangle \quad (2.12.12)$$

gegeben. Diese Gleichung folgt unmittelbar aus der Bewegungsgleichung für die Eigenvektoren nicht explizit zeitabhängiger Observablen im Heisenbergbild

$$|t, \vec{x}, \sigma\rangle = \exp(it\mathbf{H})|t=0, \vec{x}, \sigma\rangle. \quad (2.12.13)$$

Es handelt sich also um die Komponenten der simultanen \vec{x} - S_z -Eigenvektoren bzgl. der \vec{x}' - S'_z -Eigenbasis. Wir können diese Größe unter Verwendung von (2.12.11) bestimmen, indem wir zunächst die simultanen Eigenwertgleichungen in dieser Basis schreiben:

$$\begin{aligned} \hat{x} U_{\sigma\sigma'}^* &= \left(-\frac{a}{2} \vec{e}_z t^2 \sigma' + \frac{t}{iM} \vec{\nabla}_{x'} + \vec{x}' \right) U_{\sigma\sigma'}^* \stackrel{!}{=} \vec{x} U_{\sigma\sigma'}^*, \\ \hat{S}_z U_{\sigma\sigma'}^* &= \sigma' U_{\sigma\sigma'}^* \stackrel{!}{=} \sigma U_{\sigma\sigma'}^*. \end{aligned} \quad (2.12.14)$$

Die letzte Gleichung besagt, daß $U_{\sigma\sigma'} \propto \delta_{\sigma\sigma'}$ ist. In der hier betrachteten Näherung bleibt also ein Spin-z-Eigenzustand stets in diesem Eigenzustand, maW. es erfolgt während der Bewegung durch das Magnetfeld kein „Spin-Flip“. Wie wir unten noch sehen werden, ist dies allerdings die wesentliche Folge der hier betrachteten Näherung. Die Lösung von (2.12.14) ist ebenfalls einfach durch direkte Integration zu gewinnen (*Übung!*):

$$U_{\sigma\sigma'}(t, \vec{x}, \vec{x}') = N(t) \exp \left\{ \frac{iM}{2t} [(\vec{x}' - \vec{x})^2 - at^2 \sigma(z' + z)] \right\} \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (2.12.15)$$

Dabei haben wir die Integrationskonstanten so angepaßt, daß unter der Voraussetzung, daß wir $N(t)$ so wählen können, daß

$$N(t) = N^*(-t) \quad (2.12.16)$$

ist,

$$U_{\sigma'\sigma}^*(-t, \vec{x}', \vec{x}) = U_{\sigma\sigma'}(t, \vec{x}, \vec{x}') \quad (2.12.17)$$

gilt¹¹. Um $N(t)$ zu bestimmen, verwenden wir die Tatsache, daß $U_{\sigma\sigma'}(t, \vec{x}, \vec{x}')$ die zeitabhängige Schrödingergleichung erfüllt. Dies führt auf eine lineare Differentialgleichung erster Ordnung für $N(t)$, die die Lösung (*Übung!*)

$$N(t) = N(t) = \left(\frac{M}{2\pi i t} \right)^{3/2} \exp[i\Phi_1(t)] \quad \text{mit} \quad \Phi_1(t) = -\frac{Ma\sigma t(24B_0 + \beta a\sigma_0 t^2)}{24\beta} \quad (2.12.18)$$

besitzt. Dabei haben wir die zunächst unbestimmte Normierungskonstante bereits so gewählt, daß auch die Anfangsbedingung

$$U_{\sigma,\sigma'}(t=0, \vec{x}, \vec{x}') = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \quad (2.12.19)$$

erfüllt ist.

Die Wellenfunktion mit dem Gaußschen Wellenpaket (2.12.5) als Anfangsbedingung lautet also

$$\begin{aligned} \psi_\sigma(t, \vec{x}) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}' \sum_{\sigma'} U_{\sigma\sigma'}(t, \vec{x}; \vec{x}') \psi_{\sigma'}(t=0, \vec{x}') = \left(\frac{2}{\pi} \right)^{3/4} \left(\frac{M\Delta}{it + 2M\Delta^2} \right)^{3/2} c_\sigma \\ &\times \exp \left\{ -\frac{M^2\Delta^2}{4\Delta^4 M^2 + t^2} \left[\left(x - \frac{p_0 t}{M} \right)^2 + y^2 + \left(z + \frac{a\sigma t^2}{2} \right)^2 \right] \right\} \\ &\times \exp[i\Phi(t, \vec{x})] \end{aligned} \quad (2.12.20)$$

¹¹vgl. (1.10.11)

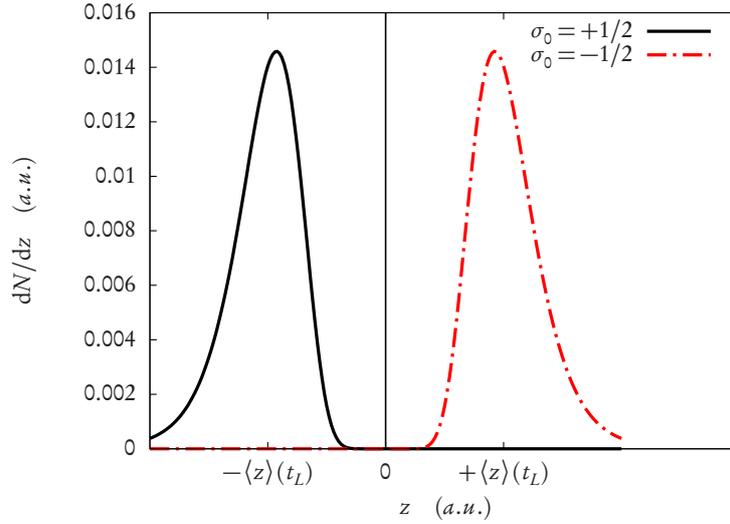


Abbildung 2.2: Wahrscheinlichkeitsverteilung für die z -Position eines Teilchens nach Durchlaufen eines inhomogenen Magnetfeldes bei $x = L$. Anfangs lag eine bei $\vec{x} = 0$ gepeakte Gaußverteilung vor, wobei die Teilchen mit gleicher Wahrscheinlichkeit eine Spinkomponente $\sigma = +1/2$ oder $\sigma = -1/2$ besitzen.

mit der Phase

$$\Phi(t, \vec{x}) = -\frac{a\sigma B_0 t}{\beta} - \frac{M}{24(4M^2\Delta^4 + t^2)} \left\{ 16\Delta^4 [3p_0^2 t - 6M p_0 x + aM^2 \sigma t (a\sigma t^2 + 6z)] \right. \\ \left. \beta t (a^2 \sigma_0^2 t^4 + 12a\sigma_0 t^2 z - 12\vec{x}^2) \right\}. \quad (2.12.21)$$

Um diese Wellenfunktion zu interpretieren, bilden wir ihr Betragsquadrat:

$$|\psi_\sigma(t, \vec{x})|^2 = \left(\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{M^2 \Delta^2}{4M^2 \Delta^4 + t^2} \right)^{3/2} |c_\sigma|^2 \\ \times \exp \left\{ -\frac{2M^2 \Delta^2}{4\Delta^4 M^2 + t^2} \left[\left(x - \frac{p_0 t}{M} \right)^2 + y^2 + \left(z + \frac{a\sigma}{2} t^2 \right)^2 \right] \right\}. \quad (2.12.22)$$

Die Ortswahrscheinlichkeitsverteilung für ein Teilchen mit anfangs scharf bestimmter Spin- z -Komponente σ ist also zur Zeit t in der Tat eine Gaußverteilung, mit Ortserwartungswerten entsprechend der Bewegung des entsprechenden klassischen Teilchens. Dies liegt daran, daß die Kraft hier konstant ist und folglich die Ortserwartungswerte aufgrund des Ehrenfestschen Theorems die klassischen Bewegungsgleichungen erfüllen. Dies ersieht man auch durch direkte Mittelwertbildung aus (2.12.11). Die Unschärfe jeder der Ortskomponenten ist

$$\Delta x(t) = \Delta y(t) = \Delta z(t) = \frac{\sqrt{4\Delta^4 M^2 + t^2}}{2M\Delta}. \quad (2.12.23)$$

Stellen wir nun einen Schirm bei $x = L$ auf, erreicht das Maximum des Wellenpakets diesen Schirm bei $t = t_L = 2ML/p_0$, und wir erhalten eine gute Separation der beiden Peaks in z -Richtung, wenn die entsprechende Unschärfe klein gegen $2z(t_L) = a\sigma t_L^2$ ist.

Gemessen werden (unter der Annahme einer idealen Photoplatte, die jedes Teilchen, das auf sie trifft, auch wirklich registriert) alle Teilchen, die im Laufe der Zeit $t \in (-\infty, \infty)$ bei $x = L$ ankommen. Die entsprechende Verteilung erhalten wir offenbar, indem wir die Stromkomponente

$$j_x(t, x = L, y, z) = \frac{1}{2M\hbar} \sum_{\sigma} [\psi_{\sigma} \partial_x \psi - (\partial_x \psi_{\sigma}^*) \psi] \quad (2.12.24)$$

über $t \in \mathbb{R}$ integrieren. In Abb. 2.2 haben wir diese Stromkomponente für die Situation, daß anfangs gleich viele Teilchen mit Spin-z-Komponenten $\sigma = \pm 1/2$ vorhanden waren (d.h. $c_{+1/2} = c_{-1/2} = 1/\sqrt{2}$) numerisch über $t \in \mathbb{R}$ und $y \in \mathbb{R}$ integriert, d.h. wir betrachten die Verteilung in z-Richtung. In der Tat sind aufgrund der Wahl der Anfangsparameter für dieses Beispiel die beiden Peaks entsprechend der Anfangseinstellung des Spins wohlsepariert, und die Teilchen besitzen entsprechend unserer Näherung des Hamiltonoperators (2.12.4) praktisch reine Spin-z-Zustände, wenn wir einen der beiden Teilstrahlen durch eine Blende laufen lassen, und den anderen vollständig absorbieren.

Betrachtet man statt der Näherung (2.12.4) den genaueren Hamiltonoperator (2.12.5), läßt sich das Problem nicht mehr geschlossen lösen. Die Heisenbergschen Bewegungsgleichungen für Orts-, Impuls- und Spinoperatoren lauten dann nämlich

$$\begin{aligned} \dot{\vec{p}} &= \frac{1}{\hbar} [\vec{p}, \mathbf{H}] = -a\mathbf{S}_z \vec{e}_z + a\mathbf{S}_y \vec{e}_y, \\ \dot{\vec{x}} &= \frac{\vec{p}}{M}, \\ \dot{\vec{S}} &= \mu_B g_s \vec{B} \times \vec{S}. \end{aligned} \quad (2.12.25)$$

Man kann allerdings mit Hilfe der zeitabhängigen Störungstheorie zeigen, daß für $B_0 \gg \beta \langle \gamma \rangle$ die Beimischungen von Teilchen mit entgegengesetzten Spin klein sind, weil die Korrekturglieder mit der großen **Larmorfrequenz** $\omega = \mu_B g_s B_0$ oszillieren und sich somit bei der Zeitintegration der entsprechenden Stromkomponente j_x gegenseitig aufheben. Genauere numerische Untersuchungen zur Berücksichtigung des Spin-Flips beim Stern-Gerlach-Versuch finden sich in [PBCBGC05].

Kapitel 3

Erinnerung an die Statistische Thermodynamik

In diesem Kapitel fassen wir kurz die wesentlichen Grundlagen der statistischen Thermodynamik zusammen, wobei wir uns auf **Gleichgewichtszustände** und das **großkanonische Ensemble** beschränken. Wesentlich für die Thermodynamik ist der Begriff der **Entropie**, die wir hier über die **von Neumann-Entropie** des Statistischen Operators einführen. Ein tieferes Verständnis der Entropie liefert die **Informationstheorie**, die aus der statistischen Signaltheorie hervorgegangen ist, wo der informationstheoretische Entropiebegriff von **Shannon** eingeführt wurde. Dieses Konzept wurde dann von **Jaynes** auf die Quantentheorie angewandt. Einführungen zum informationstheoretischen Zugang zur statistischen Physik bieten [Jay57a, Jay57b, Kat67, Hob87, Hee08b]. Elementarere gute Darstellungen zur Thermodynamik und statistischen Physik sind [Som78, LL87, Cal85, Rei65, LMB04].

3.1 Die Entropie

Die Entropie wird nach **von Neumann** als Funktional des Statistischen Operators eines Systems durch

$$S[\mathbf{R}] = -k_B \langle \ln \mathbf{R} \rangle_{\mathbf{R}} = -k_B \text{Tr}[\mathbf{R} \ln \mathbf{R}] \quad (3.1.1)$$

definiert. Dabei bezeichnet

$$k_B = 1.3806504(24) \cdot 10^{-23} \text{ J/K} = 8.617343(15) \cdot 10^{-5} \text{ eV/K} \quad (3.1.2)$$

die **Boltzmann-Konstante**. Auf die Temperatureinheit **Kelvin** kommen wir gleich noch zurück.

Die Entropie ist ein **Maß für die fehlende Information** über den Systemzustand bei gegebenem Statistischen Operator. Wir wollen diese Interpretation als **Informationsmaß** in dieser Vorlesung nicht genauer begründen. Wir bemerken nur, daß für einen reinen Zustand $\mathbf{R}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$

$$S[\mathbf{R}_\psi] = 0 \quad (3.1.3)$$

ist. Dabei verwenden wir bei der Spurbildung in der Entropieformel für den Fall, daß für einen normierten Vektor $|n\rangle$ das Matrixelement $R_{nn} = \langle n | \mathbf{R} | n \rangle = 0$ ist

$$\lim_{R_{nn} \rightarrow 0^+} R_{nn} \ln R_{nn} = 0. \quad (3.1.4)$$

Zur Berechnung von (3.1.3) denken wir uns ein Orthonormalsystem $\{|n\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$ mit $|1\rangle = |\psi\rangle$ gegeben. Dann ist $R_{\psi,11} = 1$ und $R_{\psi,nn} = 0$ für $n \geq 2$. Mit dem Grenzwert (3.1.4) erhalten wir dann

$$S[\mathbf{R}_\psi] = -k_B \sum_{n=1}^{\infty} R_{\psi,nn} \ln R_{\psi,nn} = -k_B 1 \cdot \ln 1 = 0. \quad (3.1.5)$$

Allgemein können wir bei der Spurbildung als VONS die Eigenvektoren $|n\rangle$ des Statistischen Operators verwenden¹

$$S[\mathbf{R}] = -k_B \sum_{n=1}^{\infty} R_{nn} \ln R_{nn}. \quad (3.1.6)$$

Da \mathbf{R} gemäß Abschnitt 1.14 ein positiv semidefiniter selbstadjungierter Operator mit

$$\text{Tr } \mathbf{R} = \sum_{n=1}^{\infty} R_{nn} = 1 \quad \text{mit} \quad R_{nn} \geq 0 \quad (3.1.7)$$

ist, muß $0 \leq R_{nn} \leq 1$ sein. Dies ergibt sich auch daraus, daß R_{nn} die Wahrscheinlichkeit dafür ist, bei einer Messung eines geeigneten vollständigen Satzes kompatibler Observabler, für die $|n\rangle$ ein Eigensystem ist, das System im Zustand $|n\rangle$ vorzufinden. Jedenfalls folgt aus (3.1.7) wegen $\ln x < 0$ für $x < 1$, daß

$$S[\mathbf{R}] \geq 0 \quad (3.1.8)$$

ist.

Nach dem **Prinzip vom geringsten Vorurteil** müssen wir nun denjenigen Statistischen Operator wählen, der unter Berücksichtigung der vorliegenden Information die **maximale Entropie** ergibt.

3.2 Das großkanonische Ensemble

In dieser Vorlesung werden wir ausschließlich die **großkanonische Beschreibung** thermodynamischer Systeme verwenden, da diese für praktische Probleme am einfachsten zu handhaben ist und die wesentlichen Aspekte der Beschreibung **makroskopischer Systeme** abdeckt. Das paradigmatische Beispiel für diese Beschreibung ist ein Gas oder Plasma in einem Behälter. Dabei greift man sich ein sehr großes Teilvolumen dieses Behälters heraus, sodaß die darin enthaltenen Gasteilchen (also Atome, Moleküle oder Ionen) mit den übrigen Gasteilchen und mit den Behälterwänden Energie austauschen können. Zugleich liegt auch die Teilchenzahl in dem Teilvolumen nicht exakt fest, denn es können sich Teilchen aus dem Teilvolumen heraus- oder in es hineinbewegen.

Gemäß der von Neumann-Gleichung (1.15.3) repräsentiert ein Statistischer Operator genau dann einen **stationären Zustand**, wenn er eine Funktion der **Erhaltungsgrößen des Systems** ist (d.h. mit dem Hamilton-Operator kommutiert) und nicht explizit von der Zeit abhängt. Für das großkanonische Ensemble betrachtet man die **Energie und Teilchenzahl** als die wichtigen Erhaltungsgrößen. Allerdings betrachten wir ja nur ein Teilvolumen eines größeren Gesamtvolumens eines Gases, und da muß die Energie und Teilchenzahl nicht exakt erhalten sein. Im **Gleichgewichtszustand** dürfen wir aber erwarten, daß es keinen makroskopischen Energie- und Teilchenfluß geben wird, d.h. im Mittel über nicht zu kleine Zeiten wird die Gesamtenergie und Teilchenzahl der in dem betrachteten Volumen enthaltenen Teilchen konstant sein, und wir geben die **mittlere Energie und die mittlere Teilchenzahl** als bekannte Größen vor.

Nach dem Prinzip vom geringsten Vorurteil suchen wir also denjenigen Statistischen Operator \mathbf{R} , für den die Entropie (3.1.1) maximal wird, wobei die Einschränkungen

$$\text{Tr } \mathbf{R} \stackrel{!}{=} 1, \quad \langle \mathbf{H} \rangle = \text{Tr } \mathbf{H} \mathbf{R} \stackrel{!}{=} U, \quad \langle \mathbf{N} \rangle = \text{Tr } (\mathbf{N} \mathbf{R}) \stackrel{!}{=} N \quad (3.2.1)$$

¹Wir schreiben im folgenden die Formeln für den Fall, daß der Statistische Operator ein rein diskretes Spektrum besitzt. Für den Fall, daß er auch kontinuierliche Eigenwerte besitzt, ist entsprechend zu integrieren.

erfüllt sein müssen. Eine solche Extremwertaufgabe mit Nebenbedingungen löst man bekanntlich mit Hilfe der Methode der **Lagrange-Parameter**, d.h. wir betrachten das Funktional

$$S'[\mathbf{R}] = S[\mathbf{R}] - k_B \langle (\Phi - 1)\mathbb{1} + \beta\mathbf{H} + \alpha\mathbf{N} \rangle = -k_B \text{Tr}[\mathbf{R}(\ln \mathbf{R} + (\Phi - 1)\mathbb{1} + \beta\mathbf{H} + \alpha\mathbf{N})] \quad (3.2.2)$$

Dabei sind Φ , β und α die Lagrangeparameter, die so zu bestimmen sind, daß die drei Zwangsbedingungen (3.2.1) erfüllt sind. Wir legen also \mathbf{R} dadurch fest, daß $S'[\mathbf{R}]$ maximal werden muß. Dazu variieren wir (3.2.2) nach \mathbf{R} , wobei wir uns dank der Lagrange-Parameter nicht mehr um die Nebenbedingungen zu kümmern brauchen:

$$\begin{aligned} \delta S'[\mathbf{R}] &= -k_B \text{Tr}[\delta \mathbf{R}(\ln \mathbf{R} + (\Phi - 1)\mathbb{1} + \beta\mathbf{H} + \alpha\mathbf{N} + \mathbb{1})] \\ &= -k_B \text{Tr}[\delta \mathbf{R}(\ln \mathbf{R} + \Phi\mathbb{1} + \beta\mathbf{H} + \alpha\mathbf{N})] \stackrel{!}{=} 0. \end{aligned} \quad (3.2.3)$$

Da $\delta \mathbf{R}$ beliebig ist, muß die Klammer verschwinden, und daraus folgt

$$\mathbf{R} = \exp(-\Phi\mathbb{1} - \beta\mathbf{H} - \alpha\mathbf{N}). \quad (3.2.4)$$

Es gilt

$$\text{Tr} \mathbf{R} = \exp(-\Phi) \text{Tr}[\exp(-\beta\mathbf{H} - \alpha\mathbf{N})] = \exp(-\Phi) Z(\beta, \alpha) \stackrel{!}{=} 1 \Rightarrow \Phi = \ln Z. \quad (3.2.5)$$

Die Größe

$$Z = \text{Tr}[\exp(-\beta\mathbf{H} - \alpha\mathbf{N})] \quad (3.2.6)$$

heißt **großkanonische Zustandssumme** und $\Phi = \ln Z$ **großkanonisches thermodynamisches Potential**. Es ist klar, daß die thermodynamischen Größen im allgemeinen noch von **äußeren Systemparametern** abhängen werden, die in den obigen Formalismus über den Hamiltonoperator und den Teilchenzahloperator oder auch durch Randbedingungen eingehen. Ein wichtiges Beispiel für den letzteren Fall ist das betrachtete **Volumen** V , das durch geeignete Randbedingungen an die Wellenfunktionen in der Ortsdarstellung beschrieben wird. Darauf gehen wir im nächsten Kapitel konkret ein. Für die jetzt folgenden allgemeineren Betrachtungen, genügt es, einfach davon auszugehen, daß die thermodynamischen Größen auch vom Volumen abhängen.

Die großkanonische Zustandssumme (3.2.6) ist deshalb äußerst nützlich, weil wir bei ihrer Kenntnis sofort die mittlere Energie und die mittlere Teilchenzahl ausrechnen können. Da die Teilchenzahl voraussetzungsgemäß eine Erhaltungsgröße ist, muß $[\mathbf{N}, \mathbf{H}] = 0$ sein, und wir können die Ableitungen nach den Lagrangeparametern bilden, als wären \mathbf{H} und \mathbf{N} Zahlen, d.h. es ist

$$\frac{\partial}{\partial \beta} Z(\beta, \alpha, V) = -\text{Tr}[\mathbf{H} \exp(-\beta\mathbf{H} - \alpha\mathbf{N})] = -Z(\beta, \alpha, V) \langle H \rangle = -Z(\beta, \alpha, V) U(\beta, \alpha, V). \quad (3.2.7)$$

Also ist

$$U(\beta, \alpha, V) = -\frac{1}{Z(\beta, \alpha, V)} \frac{\partial}{\partial \beta} Z(\beta, \alpha, V) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z(\beta, \alpha, V) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \Phi(\beta, \alpha, V). \quad (3.2.8)$$

Genauso folgt

$$N(\beta, \alpha, V) = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \Phi(\beta, \alpha, V). \quad (3.2.9)$$

Wir geben schließlich noch die Entropie für den Gleichgewichtsoperator (3.2.4) an:

$$\begin{aligned} S(\beta, \alpha, V) &= -k_B \text{Tr}(\mathbf{R} \ln \mathbf{R}) = k_B (\Phi + \langle \beta\mathbf{H} + \alpha\mathbf{N} \rangle) \\ &= k_B [\Phi(\beta, \alpha, V) + \beta U(\beta, \alpha, V) + \alpha N(\beta, \alpha, V)]. \end{aligned} \quad (3.2.10)$$

3.3 Phänomenologische Thermodynamik

Um den Anschluß der großkanonischen Größen an die üblichen Größen der phänomenologischen Thermodynamik zu finden, gehen wir vom **ersten Hauptsatz der Thermodynamik** aus, demzufolge eine infinitesimale Zustandsänderung zur Änderung der inneren Energie

$$dU = TdS - pdV + \mu dN \quad (3.3.1)$$

führt, wobei T die Temperatur, p den Druck und μ das thermodynamische Potential des Systems bezeichnen. Dies lösen wir nach

$$dS = \frac{1}{T}(dU + pdV - \mu dN) \quad (3.3.2)$$

auf. Die „natürlichen unabhängigen Variablen“ für die Entropie sind also U , V und N , und es gelten die thermodynamischen Beziehungen

$$\frac{\partial}{\partial U} S(U, V, N) = \frac{1}{T}, \quad \frac{\partial}{\partial V} S(U, V, N) = \frac{p}{T}, \quad \frac{\partial}{\partial N} S(U, V, N) = -\frac{\mu}{T}. \quad (3.3.3)$$

Vergleichen wir nun (3.3.2) mit (3.2.10). Dazu bilden wir das totale Differential dieser Gleichung, wobei wir zunächst β , α und V als unabhängige Variablen zu verwenden haben. Dann folgt unter Berücksichtigung von (3.2.8) und (3.2.10) nach einigen Zusammenfassungen

$$dS = k_B \left[\beta dU + \alpha dN + dV \frac{\partial}{\partial V} \Phi(\beta, \alpha, V) \right]. \quad (3.3.4)$$

Vergleichen wir (3.3.4) mit (3.3.2), erhalten wir die Beziehungen

$$k_B \beta = \frac{1}{T}, \quad k_B \alpha = -\frac{\mu}{T}, \quad k_B \frac{\partial}{\partial V} \Phi(\beta, \alpha, V) = \frac{p}{T}. \quad (3.3.5)$$

Eine typische Berechnung der **Zustandsgleichungen** eines Systems mit Hilfe des großkanonischen Formalismusses besteht also darin, zunächst die Zustandssumme Z bzw. das kanonische Potential Φ als Funktion von β , α und V zu berechnen. Dadurch sind U , N und S gemäß (3.2.8-3.2.10) als Funktion dieser großkanonischen unabhängigen Variablen bestimmt. Über (3.3.5) gewinnen wir dann die phänomenologischen Größen.

Daraus folgen dann alle übrigen thermodynamisch interessanten Größen. Dies erkennen wir, indem wir uns an die physikalische Interpretation des ersten Hauptsatzes (3.3.1) erinnern. Demnach ändert sich die innere Energie durch Änderung der Entropie, des Volumens und der Teilchen entsprechend der drei Terme im totalen Differential (3.3.1). Der erste Term bedeutet dabei die Zu- bzw. Abfuhr von **Wärmeenergie** $\delta Q = TdS$ zum System bzw. aus dem System, der zweite die mechanische Arbeit $\delta W = -pdV$ und schließlich der dritte die Energieänderung aufgrund der Hinzufügung oder Entnahme von Teilchen in das System bzw. aus dem System. Dies entspricht auch **Transportgrößen** im Gleichgewichtslimes, nämlich dem Fluß von Wärme, mechanischer bzw. chemischer Energie. Dabei muß man sich allerdings die Zustandsänderungen so langsam ausgeführt vorstellen, daß das System sich stets im Gleichgewicht befindet, bzw. man führt die Zustandsänderung aus und wartet hinreichend lange, sodaß sich das Gleichgewicht für die neue Situation einstellt und betrachtet Änderung der betreffenden Energieanteile zur Gesamtenergieänderung erst nach dieser Einstellung des neuen Gleichgewichts.

Eine interessante Größe ist auch die **Wärmekapazität**, die die Energie angibt, die man pro Teilchen benötigt, um dem System unter bestimmten Nebenbedingungen Wärme zuzuführen. Gemäß (3.3.1) ist die innere Energie $U(S, V, N)$ das geeignete thermodynamische Potential, um die Wärmekapazität bei konstant gehaltenem Volumen und Teilchenzahl zu bestimmen:

$$C_{V,N} = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{V,N}. \quad (3.3.6)$$

Dabei bedeuten die Indizes an den in Klammern eingeschlossenen partiellen Ableitungen die bei dieser Ableitung konstant zu haltenden Größen. Wir müssen also ggf. die natürlichen unabhängigen Variablen einer Zustandsgröße durch andere ersetzen, um weitere Größen zu erhalten.

3.4 Legendre-Transformationen thermodynamischer Potentiale

Oft sind aber auch noch andere thermodynamische Potentiale nützlich. Dazu stellen wir zunächst eine allgemeine thermodynamische Betrachtung an. In der Thermodynamik lassen sich die Größen in **Quantitätsgrößen (extensive Variablen)** und **Intensitätsgrößen (intensive Variablen)** unterscheiden. In unseren obigen Betrachtungen waren z.B. U , S und N extensive und T , p und μ intensive Größen. Halten wir die intensive Größen konstant und erhöhen die Teilchenzahl N um einen Faktor λ , müssen sich erfahrungsgemäß auch alle übrigen extensiven Größen um denselben Faktor λ ändern. Wir haben also das **Skalenverhalten**

$$U(\lambda S, \lambda V, \lambda N) = \lambda U(S, V, N), \quad (3.4.1)$$

d.h. U als Funktion von extensiven Größen ist eine **homogene Funktion ersten Grades** dieser Größen. Differenzieren wir diese Gleichung nach λ und setzen anschließend $\lambda = 1$ erhalten wir

$$U = S \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_{V,N} + V \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{S,N} + N \left(\frac{\partial U}{\partial N} \right)_{S,V}. \quad (3.4.2)$$

Der Vergleich mit (3.3.1) liefert andererseits die thermodynamischen Beziehungen

$$\left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_{V,N} = T, \quad U = S \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_{V,N} + V \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{S,N} = -p, \quad \left(\frac{\partial U}{\partial N} \right)_{S,V} = \mu, \quad (3.4.3)$$

und daher folgt aus (3.4.3)

$$U = TS - pV + \mu N. \quad (3.4.4)$$

Wir können nun weitere thermodynamische Potentiale mit Hilfe der **Legendre-Transformation** erhalten. Diese Methode hat zum Ziel, an andere natürliche unabhängige Variable angepaßte Größen zu erhalten. Führen wir z.B. die **Enthalpie** durch

$$H = U + pV, \quad (3.4.5)$$

so ergibt der erste Hauptsatz (3.3.1)

$$dH = dU + pdV + Vdp = TdS + Vdp + \mu dN. \quad (3.4.6)$$

Dies besagt, daß die natürlichen unabhängigen Variablen für die Enthalpie S , p und N sind. Es gelten die thermodynamischen Beziehungen

$$\left(\frac{\partial H}{\partial S} \right)_{p,N} = T, \quad \left(\frac{\partial H}{\partial p} \right)_{S,N} = V, \quad \left(\frac{\partial H}{\partial N} \right)_{S,p} = \mu. \quad (3.4.7)$$

Aus der Enthalpie erhalten wir die **Wärmekapazität bei konstantem Druck** zu

$$C_{p,N} = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_{p,N}. \quad (3.4.8)$$

Gemäß (3.4.4) gilt noch die Beziehung

$$H = TS + \mu N. \quad (3.4.9)$$

Die **Helmholtzsche Freie Energie** ist hingegen durch

$$F = U - TS = -pV + \mu N \quad (3.4.10)$$

definiert. Mit dem ersten Hauptsatz (3.3.1) erhalten wir

$$dF = dU - TdS - SdT = -SdT - pdV + \mu dN. \quad (3.4.11)$$

Die natürlichen unabhängigen Variablen sind T , V und N , und es gelten die thermodynamischen Relationen

$$\left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V,N} = -S, \quad \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T,N} = -p, \quad \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{V,N} = \mu. \quad (3.4.12)$$

Die **Gibbssche Energie** ist wiederum eine Legendretransformierte der freien Energie

$$G = F + pV = \mu N. \quad (3.4.13)$$

Mit (3.4.10) erhalten wir

$$dG = dF + pdV + Vdp = -SdT + Vdp + \mu dN, \quad (3.4.14)$$

d.h. die natürlichen Variablen sind T , p und N . Die dazugehörigen thermodynamischen Relationen lauten

$$\left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_{p,N} = -S, \quad \left(\frac{\partial G}{\partial p} \right)_{T,N} = V, \quad \left(\frac{\partial G}{\partial N} \right)_{T,p} = \mu. \quad (3.4.15)$$

Schließlich ergibt sich noch das großkanonische Potential mit etwas undefinierten unabhängigen Variablen als

$$\Omega = F - \mu N = -pV. \quad (3.4.16)$$

Verwenden wir wieder (3.4.11), erhalten wir

$$d\Omega = dF - \mu dN - Nd\mu = -SdT - pdV - Nd\mu. \quad (3.4.17)$$

Die unabhängigen Variablen sind hier T , V und μ , und es gelten die Relationen

$$\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{V,\mu} = -S, \quad \left(\frac{\partial \Omega}{\partial V} \right)_{S,\mu} = -p, \quad \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T,V} = -N. \quad (3.4.18)$$

Vergleichen wir dies mit unserer ursprünglichen Definition (3.2.5). Aus (3.2.10) und (3.3.5) folgt

$$U - \mu N + k_B T \Phi = TS, \quad (3.4.19)$$

und daher

$$-k_B T \Phi = U - TS - \mu N = F - \mu N \stackrel{(3.4.16)}{=} \Omega. \quad (3.4.20)$$

In den ursprünglichen statistischen Variablen geschrieben ist also wegen (3.4.16)

$$p = -\frac{\Omega}{V} = \frac{k_B T \Phi}{V} = \frac{\Phi(\beta, \alpha, V)}{\beta V}. \quad (3.4.21)$$

Das großkanonische Potential liefert also auch unmittelbar die **Zustandsgleichung des Systems**.

Kapitel 4

Vielteilchensysteme aus freien Teilchen

In diesem Kapitel wenden wir uns der Theorie von Systemen aus gleichartigen, d.h. **ununterscheidbaren Teilchen** zu. Während in der klassischen Physik Teilchen schon dadurch stets voneinander unterscheidbar bleiben, daß man sie durch ihre jeweiligen Anfangspositionen und -impulse kennzeichnen kann, ist es in der Quantentheorie unmöglich, über längere Zeiträume individuelle Teilchen voneinander zu unterscheiden, es sei denn sie unterscheiden sich durch eine intrinsische Eigenschaft voneinander, d.h. z.B. durch ihre Masse, ihren Spin oder diverse Ladungsquantenzahlen.

4.1 Ein System von zwei ununterscheidbaren Teilchen

Wir betrachten als erstes zwei ununterscheidbare Teilchen mit Spin $s \in \{0, 1/2, 1, \dots\}$. Zunächst ist eine Basis dieses Systems durch die Produktzustände

$$|\xi_1, \xi_2\rangle = |\xi_1\rangle \otimes |\xi_2\rangle, \quad (4.1.1)$$

wobei wir mit $\xi_k = (\vec{x}_k, \sigma_k)$ bezeichnen, wobei \vec{x}_k Orts- und Spin-z-Komponente des k -ten Teilchens sind. Wir arbeiten hier im **Schrödingerbild**, wo die als Basisvektoren dienenden Eigenvektoren von (nicht explizit zeitabhängigen) Observablenoperatoren zeitunabhängig sind. Wir definieren nun den Permutationsoperator

$$\mathcal{P}_2 |\xi_1, \xi_2\rangle := |\xi_2, \xi_1\rangle. \quad (4.1.2)$$

Dieser Operator ergibt für identische Teilchen einen Sinn, weil die Einteilchenzustände in diesem Falle im gleichen Hilbertraum \mathcal{H}_1 liegen. Der Permutationsoperator wird nun auf den gesamten Produktraum $\mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1$ linear fortgesetzt. Da die Produktzustände (4.1.1) eine vollständige Basis von \mathcal{H}_2 bilden, bedeutet das

$$\mathcal{P}_2 |\Psi\rangle = \int d\xi_1 \int d\xi_2 |\xi_2, \xi_1\rangle \langle \xi_1, \xi_2 | \Psi \rangle \quad \text{mit} \quad \int d\xi_1 := \sum_{\sigma_1=-s}^s \int_{\mathbb{R}^3} d^3 x_1. \quad (4.1.3)$$

Es ist klar, daß \mathcal{P}_2 **selbstadjungiert** ist und daß

$$\mathcal{P}_2^2 = \mathbb{1} \quad (4.1.4)$$

gilt. Damit ist also \mathcal{P}_2 auch unitär.

Die Ununterscheidbarkeit der Teilchen impliziert weiter, daß *alle* Observablen \mathbf{A} im Zweiteilchenraum mit \mathcal{P}_2 kommutieren. Andernfalls wäre sonst der Operator

$$\mathbf{A}' = \mathcal{P}_2 \mathbf{A} \mathcal{P}_2 \quad (4.1.5)$$

von \mathbf{A} verschieden. Das kann aber nicht sein, weil \mathbf{A}' sich von \mathbf{A} nur dadurch unterscheidet, daß er sich auf ein System bezieht, bei denen lediglich die Teilchen untereinander vertauscht sind, und dann könnte man durch Messung von \mathbf{A} bzw. \mathbf{A}' die Teilchen doch voneinander unterscheiden.

Im Hilbertraum für zwei ununterscheidbare Teilchen muß also der Permutationsoperator \mathcal{P}_2 diagonal sein, d.h. *alle* Vektoren müssen Eigenvektoren von \mathcal{P}_2 sein. Da die Eigenwerte von \mathcal{P}_2 wegen (4.1.4) nur ± 1 sein können, müssen aufgrund des Superpositionsprinzips also *alle* Vektoren entweder Eigenvektoren von \mathcal{P}_2 zum Eigenwert 1 oder -1 sein. Teilchen der ersten Art nennen wir **Bosonen** und der zweiten Art **Fermionen**. Es ist ein empirisches Faktum und läßt sich aus der relativistischen Quantentheorie unter recht schwachen Annahmen auch theoretisch begründen, daß **Teilchen mit ganzzahligem Spin Bosonen** und solche mit **halbzahligem Spin Fermionen** sind.

Der zur Beschreibung zweier ununterscheidbarer Teilchen geeignete Hilbertraum ist also nicht \mathcal{H}_2 , sondern nur einer der Teilräume \mathcal{H}_2^\pm zum Eigenwert ± 1 von \mathcal{P}_2 , je nachdem, ob es sich bei den Teilchen um Bosonen (oberes Vorzeichen) oder Fermionen (unteres Vorzeichen) handelt. Die geeigneten Basen sind durch die symmetrisierten bzw. antisymmetrisierten Produkte der Einteilchenbasisvektoren gegeben:

$$|\xi_1, \xi_2\rangle^\pm = \frac{1}{\sqrt{2!}}(|\xi_1, \xi_2\rangle \pm |\xi_2, \xi_1\rangle). \quad (4.1.6)$$

Um deren Vollständigkeit für die Räume \mathcal{H}_2^\pm zu zeigen, berechnen wir zunächst

$$\begin{aligned} \langle \xi_1, \xi_2 | \xi'_1, \xi'_2 \rangle^\pm &= 1/2! \langle \xi_1, \xi_2 \pm \xi_2, \xi_1 | \xi'_1, \xi'_2 \pm \xi'_2, \xi'_1 \rangle \\ &= \delta(\xi_1 - \xi'_1) \delta(\xi_2 - \xi'_2) \pm \delta(\xi_1 - \xi'_2) \delta(\xi_2 - \xi'_1). \end{aligned} \quad (4.1.7)$$

Dann folgt

$$\int d\xi_1 \int d\xi_2 |\xi_1, \xi_2\rangle^{\pm\pm} \langle \xi_1, \xi_2 | \xi'_1, \xi'_2 \rangle^\pm = |\xi'_1, \xi'_2\rangle^\pm \pm |\xi'_2, \xi'_1\rangle^\pm = 2 |\xi'_1, \xi'_2\rangle^\pm \quad (4.1.8)$$

Wir haben also im Zweiteilchenraum die Vollständigkeitsrelation

$$\frac{1}{2!} \int d\xi_1 \int d\xi_2 |\xi_1, \xi_2\rangle^{\pm\pm} \langle \xi_1, \xi_2 | = \mathbb{1}_2^\pm, \quad (4.1.9)$$

wobei wir den Identitätsoperator auf dem symmetrisierten bzw. antisymmetrisierten Zweiteilchenraum mit $\mathbb{1}_2^\pm$ bezeichnet haben.

4.2 Systeme von N ununterscheidbaren Teilchen und Fockraum

Die Argumente, die wir eben im Falle eines Systems aus zwei ununterscheidbaren Teilchen angewendet haben, können wir uns wörtlich wiederholt denken für N identische Teilchen. Freilich ist dann die Gruppe S_N der Permutationen von N Elementen relevant. Sie besteht nämlich aus $N! = 1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot N$ Permutationen. Für $N \geq 3$ ist diese Gruppe auch nicht mehr Abelsch, und die Permutationsoperatoren \mathcal{P}_p auf dem N -fachen Produkt des Einteilchenraumes mit sich selbst \mathcal{H}_N sind daher nicht mehr

simultan diagonalisierbar. Andererseits gilt nach wie vor unser physikalisches Argument, daß die Observablen unseres Systems allesamt mit *allen* Permutationsoperatoren vertauschen müssen und also nur solche Unterräume von \mathcal{H}_N zur Beschreibung von N ununterscheidbaren Teilchen geeignet sein können, in denen *alle* \mathcal{P}_P simultan diagonalisierbar sind und also das Bild dieser Darstellung abelsch sein muß. Die Darstellungstheorie der symmetrischen Gruppe (vgl. z.B. [Smi61] Bd. III/1) besagt nun, daß es genau zwei Abelsche Darstellungen gibt, nämlich die triviale, für die alle Permutationen durch den Einheitsoperator oder die alternierende, für die

$$\mathcal{P}_P^- = (-1)^{\sigma(P)} \quad \text{mit} \quad \sigma(P) = \begin{cases} 0 & \text{falls } P \text{ gerade Permutation,} \\ 1 & \text{falls } P \text{ ungerade Permutation,} \end{cases} \quad (4.2.1)$$

gilt. Dabei heißt eine Permutation $P : \mathbb{N}_N = \{1, 2, \dots, N\} \rightarrow \mathbb{N}_N$ gerade (ungerade), wenn man eine gerade (ungerade) Anzahl von Vertauschungen von Paaren benötigt, um das N -Tupel $(1, 2, \dots, N)$ in die durch die Permutation P vorgegebene Reihenfolge $(P(1), P(2), \dots, P(N))$ zu bringen.

Es ist dann weiter klar, daß die entsprechenden Bosonen- bzw. Fermionen- N -Teilchenräume von den vollständig symmetrisierten bzw. antisymmetrisierten Produktzuständen einer beliebigen vollständigen Einteilchenbasis aufgespannt werden. Wir wählen zunächst wieder die Orts-Spin-Eigenbasis $\{|\xi\rangle = |\vec{x}, \sigma\rangle\}$ als Einteilchenbasis. Dann haben wir

$$\begin{aligned} |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle^\pm &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P \in \mathbb{S}_N} (\pm 1)^{\sigma(P)} |\xi_{P(1)} \otimes \dots \otimes \xi_{P(N)}\rangle \\ &:= \sqrt{N!} \mathcal{P}_N^\pm |\xi_{P(1)} \otimes \dots \otimes \xi_{P(N)}\rangle \end{aligned} \quad (4.2.2)$$

als eine vollständige Basis für den bosonischen bzw. fermionischen N -Teilchenraum \mathcal{H}_N^\pm . Man rechnet leicht nach, daß der Symmetrisierungs- bzw. Antisymmetrisierungsoperator

$$\mathcal{P}_N^\pm = \frac{1}{N!} \sum_{P \in \mathbb{S}_N} (\pm 1)^{\sigma(P)} \mathcal{P}_P \quad (4.2.3)$$

im vollständigen Produktraum \mathcal{H}_N hermitesch ist und die Projektionseigenschaft

$$(\mathcal{P}^\pm)^2 = \mathcal{P}^\pm \quad (4.2.4)$$

besitzt, d.h. er projiziert beliebige Zustände in \mathcal{H}_N auf den vollständig symmetrisierten bzw. antisymmetrisierten Teilraum \mathcal{H}_N^\pm . In diesen Räumen selbst ist damit dieser Operator auch wieder unitär, allerdings nicht auf dem gesamten Raum \mathcal{H}_N .

Das Rechnen in diesen Räumen erweist sich jedoch als recht kompliziert. Zum Glück existiert ein Formalismus, die sog. **Feldquantisierung**, die Vielteilchenrechnungen erheblich vereinfacht. Um zu diesem Formalismus zu gelangen, müssen wir das Konzept einer festen Teilchenzahl verlassen. Wir betrachten stattdessen einen größeren Hilbertraum, in dem wir alle N simultan behandeln können, den sog. **Fockraum**. Wir postulieren dazu, daß es genau einen Zustand, das **Vakuum** $|\Omega\rangle$ gibt, der den Fall beschreibt, daß kein Teilchen vorhanden ist, d.h. der dazugehörige Hilbertraum ist eindimensional und addieren weiter orthogonal alle N -Teilchenräume auf:

$$\mathcal{H}_F^\pm = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_N^\pm. \quad (4.2.5)$$

Dieser Vektorraum ist dadurch definiert, daß man beliebige Linearkombinationen von Vektoren aus denselben und verschiedenen \mathcal{H}_N^\pm bilden kann. Bzgl. der Addition von Vektoren und der Multiplikationen mit komplexen Zahlen sollen dabei die üblichen Vektorraumrechenregeln gelten. Weiter wird

dieser Vektor zu einem Hilbert-Raum, indem wir für das Skalarprodukt der (anti-)symmetrisierten Produktzustände durch

$$\begin{aligned} {}^\pm \langle \xi_1, \dots, \xi_N | \xi'_1, \dots, \xi'_{N'} \rangle^\pm &= \delta_{NN'} {}^\pm \langle \xi_1, \dots, \xi_N | \xi'_1, \dots, \xi'_N \rangle^\pm \\ &= \delta_{NN'} \sum_{P \in \mathcal{S}_N} (\pm 1)^{\sigma(P)} \prod_{k=1}^N \delta(\xi_k - \xi'_{P(k)}) \end{aligned} \quad (4.2.6)$$

definieren. Da dieses Skalarprodukt die üblichen Rechenregeln einer Sesquilinearform erfüllen soll, ist es damit auch für alle Zustandsvektoren in \mathcal{H}_F^\pm definiert, und die Vollständigkeitsrelation für diese Basiszustände lautet

$$\sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \int d\xi_1 \dots \int d\xi_N |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle^{\pm\pm} \langle \xi_1, \dots, \xi_N| = \mathbb{1}_{\text{Fock}}^\pm. \quad (4.2.7)$$

Wir definieren nun **Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren** im Fockraum, indem wir zunächst die Wirkung eines Erzeugungsoperators auf die N -Teilchenbasiszustände definieren:

$$\psi^\dagger(\xi) |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle^\pm := |\xi, \xi_1, \dots, \xi_N\rangle^\pm. \quad (4.2.8)$$

Der Erzeugungsoperator führt also den N -Teilchenbasiszustand in einen $N + 1$ -Teilchenbasiszustand über oder bildet im fermionischen Falle diesen Vektor auf 0 ab, wenn $|\xi\rangle$ schon in dem ursprünglichen (anti-)symmetrisierten Produktbasisvektor enthalten ist. Multiplizieren wir also die Vollständigkeitsrelation (4.2.7) mit dem Erzeugungsoperator, folgt sofort

$$\psi^\dagger(\xi) = |\xi\rangle^{\pm\pm} \langle \Omega| + \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{N!} \int d\xi_1 \dots \int d\xi_N |\xi, \xi_1, \dots, \xi_N\rangle^{\pm\pm} \langle \xi_1, \dots, \xi_N|. \quad (4.2.9)$$

Durch hermitesche Adjunktion folgt, daß entsprechend

$$\psi(\xi) = |\Omega\rangle^\pm \langle \xi| + \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{N!} \int d\xi_1 \dots \int d\xi_N |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle^{\pm\pm} \langle \xi, \xi_1, \dots, \xi_N| \quad (4.2.10)$$

ein Vernichtungsoperator ist, der den durch ξ gekennzeichneten Einteilchenzustand aus einem (anti-)symmetrisierten Basiszustand entfernt, sofern er enthalten war oder andernfalls den entsprechenden Vektor auf 0 abbildet. Insbesondere annulliert $\psi(\xi)$ für alle ξ den Vakuumzustand:

$$\psi(\xi) |\Omega\rangle = 0, \quad \langle \Omega| \psi^\dagger(\xi) = 0. \quad (4.2.11)$$

Mit Hilfe der Darstellungen (4.2.9) und (4.2.10) folgen unter Verwendung von (4.2.6) die folgenden Vertauschungsregeln:

$$[\psi(\xi_1), \psi(\xi_2)]_{\mp} = [\psi^\dagger(\xi_1), \psi^\dagger(\xi_2)]_{\mp} = 0, \quad [\psi(\xi_1), \psi^\dagger(\xi_2)]_{\mp} = \delta(\xi_1 - \xi_2). \quad (4.2.12)$$

Wir bemerken, daß wir es im bosonischen Fall formal mit einer Algebra zu tun haben, die den Leiteroperatoren für kontinuierlich viele durch ξ durchnummerierte harmonische Oszillatormoden entspricht. Wie wir bei dessen Behandlung in QM I gesehen haben, ergeben sich allein aufgrund der Vertauschungsrelationen (4.2.12) bereits die symmetrisierten Basiszustände. Sie entsprechen Besetzungszuständen für Oszillatormoden. Hier handelt es sich um **Besetzungszustände für Teilchen**.

Es läßt sich auch leicht zeigen, daß im fermionischen Fall die Konstruktion des Fockraums allein aufgrund der Antikommutatorrelationen (4.2.12) möglich ist. Die Antikommutatorrelationen sorgen dabei automatisch für die Einhaltung des **Pauli-Prinzips**, wonach es keine Zustände gibt, in denen zwei oder mehr Teilchen ein und denselben Einteilchenzustand besetzen können.

Im folgenden wollen wir zeigen, wie wir die Quantenmechanik von Vielteilchensysteme identischer Bosonen oder Fermionen mit Hilfe der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren formulieren können. In dem hier betrachteten nichtrelativistischen Fall hat das den Vorteil, daß es sich mit den Feldoperatoren i.a. einfacher rechnen läßt als im Hilbertraum fester Teilchenzahl mit (anti-)symmetrisierten Produktzuständen. Da die Teilchenzahl für nichtrelativistische Prozesse i.a. erhalten bleibt, sind diese Formulierungen der Vielteilchenquantenmechanik also vollständig äquivalent. Im relativistischen Fall stellt sich allerdings heraus, daß eine physikalisch befriedigende Beschreibung für Vielteilchensysteme fester Teilchenzahl problematisch ist und auch nicht der Erfahrung entspricht, denn bei Stoßprozessen mit relativistischen Energien können Teilchen-Antiteilchenpaare oder z.B. elektromagnetische Strahlen (im quantentheoretischen Bild also Photonen) erzeugt und/oder vernichtet werden.

4.3 Fockraumformulierung für Observablen

4.3.1 Die Teilchendichte

Betrachten wir zunächst den Operator für die **Teilchendichte**. Wir behaupten, daß die Teilchendichte für ein Teilchen mit Spinkomponente σ an der Position \vec{x} durch den Operator

$$\rho(\xi) = \psi^\dagger(\xi)\psi(\xi) \quad (4.3.1)$$

repräsentiert wird. Daß dies eine physikalisch sinnvolle Definition ist, ergibt sich durch Anwendung des Operators auf einen (anti-)symmetrisierten Basisfockzustand. Dazu berechnen wir zunächst den Kommutator mit einem beliebigen Erzeugungsoperator:

$$\begin{aligned} [\rho(\xi), \psi^\dagger(\xi_1)]_- &= [\psi^\dagger(\xi)\psi(\xi), \psi^\dagger(\xi_1)]_- \\ &= \psi^\dagger(\xi) [\psi(\xi), \psi^\dagger(\xi_1)]_{\mp} \pm [\psi^\dagger(\xi), \psi^\dagger(\xi_1)]_{\mp} \psi(\xi) \\ &= \psi^\dagger(\xi)\delta(\xi - \xi_1). \end{aligned} \quad (4.3.2)$$

Nun können wir diese Vertauschungsrelation benutzen, um die Wirkung des Dichteoperators (4.3.1) auf den Basisfockzustand zu berechnen, indem wir den Fockzustand mittels Erzeugungsoperatoren

darstellen:

$$\begin{aligned}
 \varrho(\xi) |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle^\pm &= \varrho(\xi) \psi^\dagger(\xi_1) \cdots \psi^\dagger(\xi_N) |\Omega\rangle \\
 &= \left\{ [\varrho(\xi), \psi^\dagger(\xi_1)] + \psi^\dagger(\xi_1) \varrho(\xi) \right\} \psi^\dagger(\xi_2) \cdots \psi^\dagger(\xi_N) |\Omega\rangle \\
 &= \left\{ \psi^\dagger(\xi_1) \delta(\xi - \xi_1) + \psi^\dagger(\xi_1) \varrho(\xi) \right\} \psi^\dagger(\xi_2) \cdots \psi^\dagger(\xi_N) |\Omega\rangle \\
 &= \dots \\
 &= \psi^\dagger(\xi_1) \cdots \psi^\dagger(\xi_N) \left\{ \sum_{k=1}^N \delta(\xi - \xi_k) + \varrho(\xi) \right\} |\Omega\rangle \\
 &= \psi^\dagger(\xi_1) \cdots \psi^\dagger(\xi_N) \sum_{k=1}^N \delta(\xi - \xi_k) |\Omega\rangle \\
 &= \sum_{k=1}^N \delta(\xi - \xi_k) |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle^\pm.
 \end{aligned} \tag{4.3.3}$$

Der Basisfockzustand ist also Eigenzustand des Operators (4.3.1) zum Eigenwert $\sum_{k=1}^N \delta(\xi - \xi_k)$. Das ist aber genau die Teilchendichte für die durch diesen Basisfockzustand repräsentierte physikalische Situation, daß N Teilchen mit wohlbestimmten Spin an wohlbestimmten Positionen sitzen.

Es ist weiter klar, daß der Operator für die Gesamtteilchenzahl durch Integration über den Raum und Summation über die Spinzustände des Teilchendichteoperators

$$\mathbf{N} = \int d\xi \varrho(\xi) \tag{4.3.4}$$

gegeben sein sollte. Integrieren wir die Beziehung (4.3.3) über ξ , finden wir in der Tat

$$\mathbf{N} |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle^\pm = N |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle^\pm, \tag{4.3.5}$$

d.h. der Basisfockzustand ist Eigenvektor von \mathbf{N} zum Eigenwert N , der Gesamtteilchenzahl dieses Zustands.

4.3.2 Einteilchenoperatoren

Betrachten wir nun Operatoren von Observablen im N -Teilchenraum, ist klar, daß diese mit allen Permutationsoperatoren \mathcal{P}_P ($P \in \mathcal{S}_N$) vertauschen müssen, weil sonst eben die Messung dieser Observablen eine Unterscheidbarkeit von Zuständen, die sich nur durch bestimmte Permutationen der Teilchen untereinander unterscheiden, erlauben würde, und das widerspricht wiederum der Ununterscheidbarkeit der Teilchen. Es ergibt also etwa keinen Sinn, nach dem Impuls eines bestimmten Teilchens zu fragen. Nur der Gesamtimpuls des Systems ist eine physikalisch sinnvolle Observable.

Sei nun also \mathbf{A} irgendeine auf ein Teilchen bezogene Observable, so können wir die Summe dieser Einteilchenobservable über alle Teilchen im System betrachten, also im N -Teilchenraum

$$\mathbf{A}_1^{(N)} = \sum_{k=1}^N \mathbf{A}_k, \tag{4.3.6}$$

wobei wir zur Abkürzung

$$\mathbf{A}_k = \underbrace{\mathbb{1} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}}_{(k-1)\text{-mal}} \otimes \mathbf{A} \otimes \underbrace{\mathbb{1} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}}_{[N-(k-1)]\text{-mal}} \tag{4.3.7}$$

geschrieben haben.

Um eine Darstellung mit Hilfe der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren zu erreichen, verwenden wir die auf den N -Teilchenraum eingeschränkte Vollständigkeitsrelation (4.2.7)

$$\mathbf{A}_1^{(N)} = \frac{1}{(N!)^2} \int d\xi_1 \cdots \int d\xi_N \int d\xi'_1 \cdots \int d\xi'_N |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle^\pm \langle \xi_1, \dots, \xi_N | \mathbf{A}_1^{(N)} | \xi'_1, \dots, \xi'_N \rangle^\pm \langle \xi'_1, \dots, \xi'_N |. \quad (4.3.8)$$

Zur Berechnung des Matrixelements drücken wir die Bra- und Ketvektoren gemäß (4.2.2) mit Hilfe des (Anti-)Symmetrisierungsoperators durch Produktzustände aus. Dabei ist zu beachten, daß \mathcal{P}_N^\pm mit $\mathbf{A}_1^{(N)}$ vertauscht und die Projektionseigenschaft (4.2.4) besitzt:

$$\begin{aligned} \langle \xi_1, \dots, \xi_N | \mathbf{A}_1^{(N)} | \xi'_1, \dots, \xi'_N \rangle^\pm &= N! \langle \xi_1 \otimes \cdots \otimes \xi_N | \mathcal{P}_N^\pm \mathbf{A}_1^{(N)} \mathcal{P}_N^\pm | \xi'_1 \otimes \cdots \otimes \xi'_N \rangle \\ &= N! \langle \xi_1 \otimes \cdots \otimes \xi_N | \mathbf{A}_1^{(N)} \mathcal{P}_N^\pm | \xi'_1 \otimes \cdots \otimes \xi'_N \rangle \\ &= \sum_{P \in \mathcal{S}_N} (\pm 1)^{\sigma(P)} \langle \xi_1 \otimes \cdots \otimes \xi_N | \mathbf{A}_1^{(N)} | \xi'_{P(1)} \otimes \cdots \otimes \xi'_{P(N)} \rangle \\ &= \sum_{P \in \mathcal{S}_N} (\pm 1)^{\sigma(P)} \sum_{k=1}^N \langle \xi_1 \otimes \cdots \otimes \xi_N | \mathbf{A}_k | \xi'_{P(1)} \otimes \cdots \otimes \xi'_{P(N)} \rangle \\ &= \sum_{P \in \mathcal{S}_N} (\pm 1)^{\sigma(P)} \sum_{k=1}^N \delta(\xi_1 - \xi'_{P(1)}) \cdots \delta(\xi_{k-1} - \xi'_{P(k-1)}) \langle \xi_k | \mathbf{A} | \xi'_{P(k)} \rangle \\ &\quad \times \delta(\xi_{k+1} - \xi'_{P(k+1)}) \cdots \delta(\xi_N - \xi'_{P(N)}) \end{aligned} \quad (4.3.9)$$

Im folgenden schreiben wir

$$A(\xi_j, \xi'_k) := \langle \xi_j | \mathbf{A} | \xi'_k \rangle \quad (4.3.10)$$

für das **Einteilchenmatrixelement**. Setzen wir (4.3.9) und (4.3.10) in (4.3.8) ein und integrieren in jedem Summanden der Summe über k über $\xi_1, \dots, \xi_{k-1}, \xi_{k+1}, \dots, \xi_N$, wobei wir die δ -Distributionen in (4.3.9) ausnutzen können, erhalten wir

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_1^{(N)} &= \frac{1}{(N!)^2} \sum_{P \in \mathcal{S}_N} (\pm 1)^{\sigma(P)} \sum_{k=1}^N \int d\xi_k \int d\xi'_1 \cdots d\xi'_N A(\xi_k, \xi'_{P(k)}) \\ &\quad \times \left| \xi'_{P(1)}, \dots, \xi'_{P(k-1)}, \xi_k, \xi'_{P(k+1)}, \dots, \xi'_{P(N)} \right\rangle^\pm \langle \xi'_1, \dots, \xi'_N |. \end{aligned} \quad (4.3.11)$$

In dem Bra-Vektor können wir nun die Argumente in die durch die Permutation vorgegebene Reihenfolge bringen. Da der Zustand vollständig (anti-)symmetrisiert ist, gilt

$$\langle \xi'_1, \dots, \xi'_N | = (\pm 1)^{\sigma(P)} \langle \xi'_{P(1)}, \dots, \xi'_{P(N)} |. \quad (4.3.12)$$

In dem so umsortierten Bra- und auch im Ketvektor in (4.3.11) bringen wir nun noch das Argument $\xi'_{P(k)}$ bzw. ξ_k ganz nach vorne. Dazu müssen wir es mit den $k-1$ davorstehenden Argumenten vertauschen. Dabei entsteht aufgrund der Antisymmetrie unter diesen Vertauschen jedesmal der Faktor

$(\pm)^{k-1}$. Insgesamt erhalten wir

$$\mathbf{A}_1^{(N)} = \frac{1}{(N!)^2} \sum_{P \in S_N} \sum_{k=1}^N \int d\xi_k \int d\xi'_1 \cdots d\xi'_N A(\xi_k, \xi'_{P(k)}) \left| \xi_{P(k)}, \xi'_{P(1)}, \dots, \xi_{P(k-1)}, \xi_{P(k+1)}, \dots, \xi'_{P(N)} \right\rangle^{\pm} \left\langle \xi'_{P(k)}, \xi'_{P(1)}, \dots, \xi'_{P(k-1)}, \xi'_{P(k+1)}, \dots, \xi'_{P(N)} \right|. \quad (4.3.13)$$

Nun können wir für jede Permutation die Integrationsvariablen umbenennen, ohne daß dies das Resultat ändert:

$$\begin{aligned} \xi_k &= \xi, & \xi'_{P(k)} &= \xi'', \\ \xi'_{P(1)} &= \xi''_1, \dots, & \xi'_{P(k-1)} &= \xi''_{k-1}, & \xi'_{P(k+1)} &= \xi''_k, \dots, & \xi'_{P(N)} &= \xi''_{N-1}. \end{aligned} \quad (4.3.14)$$

Daraus ersehen wir, daß in (4.3.13) jeder der Summanden sowohl bzgl. der Summe über die Permutationen als auch bzgl. der Summe über k stets den gleichen Beitrag liefert. Wir haben also einen Faktor $N! \cdot N$, was

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_1^{(N)} &= \frac{1}{(N-1)!} \int d\xi \int d\xi'' A(\xi, \xi'') \\ &\quad \times \int d\xi''_1 \cdots d\xi''_{N-1} \left| \xi, \xi''_1, \dots, \xi''_{N-1} \right\rangle^{\pm\pm} \left\langle \xi'', \xi''_1, \dots, \xi''_{N-1} \right| \end{aligned} \quad (4.3.15)$$

ergibt. Nun wenden wir (4.2.8) und die entsprechende adjungierte Gleichung auf den Ket- und den Bravektor in (4.3.15) an:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_1^{(N)} &= \int d\xi \int d\xi'' A(\xi, \xi'') \\ &\quad \times \underbrace{\psi^\dagger(\xi) \int d\xi''_1 \cdots d\xi''_{N-1} \frac{1}{(N-1)!} \left| \xi''_1, \dots, \xi''_{N-1} \right\rangle^{\pm\pm} \left\langle \xi''_1, \dots, \xi''_{N-1} \right| \psi(\xi'')}_{\mathbb{1}_{N-1}^{\pm}} \end{aligned} \quad (4.3.16)$$

wobei wir (4.2.7) für den $N-1$ -Teilchenanteil des Fockraumes verwendet haben. Um nun $\mathbf{A}_1^{(\text{Fock})}$ zu erhalten, müssen wir nur noch die orthogonale Summe bzgl. N bilden

$$\mathbf{A}_1^{(\text{Fock})} = \int d\xi \int d\xi'' A(\xi, \xi'') \psi^\dagger(\xi) \psi(\xi''). \quad (4.3.17)$$

Angesichts dieser einfachen Formel erscheint die eben durchgeführte Rechnung recht mühsam. In Abschnitt 4.3.5 werden wir die weitaus elegantere Methode der **Feldquantisierung** verwenden, um zum gleichen Resultat zu gelangen.

Betrachten wir aber noch einige Beispiele für Einteilchenoperatoren. Beginnen wir mit dem **Gesamtimpuls** des Vielteilchensystems. Im N -Teilchenraum ist offenbar

$$\vec{\mathbf{P}}^{(N)} = \sum_{k=1}^N \vec{\mathbf{p}}_k. \quad (4.3.18)$$

Der Gesamtimpuls ist also in dem obigen Sinne ein Einteilchenoperator. Das in (4.3.17) benötigte Einteilchenmatrixelement ist schnell berechnet:

$$\vec{p}(\xi, \xi'') = \langle \xi | \vec{\mathbf{p}} | \xi'' \rangle = -i \vec{\nabla}_x \langle \vec{x} | \xi'' \rangle \delta_{\sigma\sigma''} = -i \vec{\nabla}_x \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}'') \delta_{\sigma\sigma''}. \quad (4.3.19)$$

Dabei haben wir uns (1.3.4) bedient. Setzen wir dies in (4.3.17) ein und führen zunächst das Integral über \vec{x}'' und die Summe über σ'' aus, erhalten wir

$$\vec{\mathbf{P}}^{(\text{Fock})} = \int d\xi \psi^\dagger(\xi) (-i\vec{\nabla}) \psi(\xi). \quad (4.3.20)$$

Angenommen wir betrachten Systeme von Teilchen, die nicht untereinander wechselwirken, so ist auch der Hamiltonoperator ein Einteilchenoperator:

$$\mathbf{H}_1^{(N)} = \sum_{k=1}^N \left[\frac{\vec{\mathbf{p}}_k^2}{2m} + V(\vec{\mathbf{x}}_k) \right]. \quad (4.3.21)$$

Dabei ist V irgendein äußeres Potential (man denke z.B. an Elektronen, die sich in einem äußeren elektrostatischen Feld bewegen). Die Berechnung des Einteilchenmatrixelements bzgl. der Einteilchen-Orts-Spin-Basis berechnet sich wieder auf analoge Weise wie beim Impulsoperator. Das Ergebnis für die Einteilchengesamtenergie im Fockraum ist schließlich (*Übung!*)

$$\mathbf{H}_1^{(\text{Fock})} = \int d\xi \psi^\dagger(\xi) \left[-\frac{1}{2m} \Delta + V(x) \right] \psi(\xi). \quad (4.3.22)$$

Ebenso zeigt man, daß der **Gesamtspinoperator** durch

$$\vec{\mathbf{S}}^{(\text{Fock})} = \int d\xi \psi^\dagger(\vec{x}, \sigma) \sum_{\sigma'} \vec{s}_{\sigma, \sigma'} \psi(\vec{x}, \sigma') \quad (4.3.23)$$

gegeben ist (*Übung!*).

4.3.3 Zweiteilchenoperatoren

Die Wechselwirkung zwischen zwei Teilchen wird i.a. durch ein **Potential** beschrieben, wobei wir der Einfachheit annehmen, die Kräfte seien Zentralkräfte und unabhängig von den Spinfreiheitsgraden der Teilchen. Für ein N -Teilchensystem lautet der entsprechende Operator

$$\mathbf{V}_2^{(N)} = \frac{1}{2} \sum_{j_1 \neq j_2} V(|\vec{\mathbf{x}}_{j_1} - \vec{\mathbf{x}}_{j_2}|). \quad (4.3.24)$$

Mit einer ähnlichen Rechnung wie oben für Einteilchenoperatoren zeigt man, daß die äquivalente Formulierung im Fockraum

$$\mathbf{V}_2^{(\text{Fock})} = \frac{1}{2} \int d\xi_1 \int d\xi_2 V(|\vec{\mathbf{x}}_1 - \vec{\mathbf{x}}_2|) \psi^\dagger(\xi_1) \psi^\dagger(\xi_2) \psi(\xi_2) \psi(\xi_1) \quad (4.3.25)$$

lautet (*Übung!*). Dabei ist für Fermionen auf die Reihenfolge der Erzeuger und Vernichter zu achten. Dieser Beitrag ist im Fall wechselwirkender Teilchen zu (4.3.22) zu addieren, um den Gesamthamiltonoperator zu erhalten.

4.3.4 Formulierung als Quantenfeldtheorie

Wir können nun am Beispiel nichtwechselwirkender Teilchen zeigen, daß die Vernichtungsoperatoren $\psi(\xi)$ der Schrödingergleichung genügen. Die obige Formulierung unserer Fockraumtheorie haben wir im **Schrödingerbild** vorgenommen. Deshalb sind die Operatoren $\psi(\xi)$ nicht zeitabhängig. Wir können aber den Operator berechnen, der gemäß unserem Postulat 4 (vgl. Abschnitt 1.1) die Zeitableitung des Feldoperators repräsentiert:

$$\dot{\psi}(\xi) = \frac{1}{i} [\psi(\xi), \mathbf{H}_1^{(\text{Fock})}]. \quad (4.3.26)$$

Zur Berechnung des Kommutators benötigen wir dazu für Bosonen und Fermionen etwas unterschiedliche Formeln. Durch Ausmultiplizieren erhalten wir für drei Operatoren \mathbf{A} , \mathbf{B} und \mathbf{C} die Gleichungen

$$[\mathbf{A}, \mathbf{BC}] = [\mathbf{A}, \mathbf{B}]\mathbf{C} + \mathbf{B}[\mathbf{A}, \mathbf{C}], \quad (4.3.27)$$

$$\{\mathbf{A}, \mathbf{BC}\} = \{\mathbf{A}, \mathbf{B}\}\mathbf{C} - \mathbf{B}\{\mathbf{A}, \mathbf{C}\}. \quad (4.3.28)$$

Offenbar müssen wir in (4.3.26) für den Hamiltonoperator (4.3.22) einsetzen¹. Wir können dabei das Integral aus dem Kommutator herausziehen. Dann entsteht der Kommutator

$$\begin{aligned} [\psi(\xi), \psi^\dagger(\xi') \hat{H}_{\xi'} \psi(\xi')] &= [\psi(\xi), \psi^\dagger(\xi')]_{\mp} \hat{H}_{\xi'} \psi(\xi') \pm \psi^\dagger(\xi') \underbrace{[\psi(\xi), \hat{H}_{\xi'} \psi(\xi')]_{\mp}}_{\hat{H}_{\xi'} [\psi(\xi), \psi(\xi')]_{\mp}} \\ &\stackrel{(4.2.12)}{=} \delta(\xi - \xi') \hat{H}_{\xi'} \psi(\xi') \end{aligned} \quad (4.3.29)$$

wobei wir mit \hat{H} den Einteilchenhamiltonoperator in der Ortsdarstellung bezeichnet haben, der klar vom entsprechenden Fockraumoperator $\mathbf{H}_1^{(\text{Fock})}$ unterschieden werden muß. Integration dieser Gleichung bzgl. ξ' liefert dann

$$i\dot{\psi}(\xi) = \hat{H}\psi(\xi) = \left[-\frac{\Delta}{2m} + V(\vec{x}) \right] \psi(\xi). \quad (4.3.30)$$

In der Tat erfüllt also die kovariante Zeitableitung des Feldoperators die **Schrödingergleichung**. Gehen wir zum **Heisenbergbild** über, wird die Analogie vollkommen, denn im Heisenbergbild entspricht die kovariante Zeitableitung der gewöhnlichen Ableitung der Operatoren nach der Zeit. Das läßt sich auch leicht explizit nachprüfen. Denn wegen (1.9.5) und (1.10.1) gilt

$$\frac{d\mathbf{B}}{dt} = i\mathbf{H}_H^{(\text{Fock})}\mathbf{B} \quad \text{mit} \quad \mathbf{H}_H^{(\text{Fock})} = \mathbf{B}\mathbf{H}^{(\text{Fock})}\mathbf{B}^\dagger. \quad (4.3.31)$$

Multiplizieren wir diese Gleichung von links mit \mathbf{B}^\dagger erhalten wir (wieder wegen (1.9.1))

$$\mathbf{B}^\dagger \frac{d\mathbf{B}}{dt} = i\mathbf{H}^{(\text{Fock})} \quad (4.3.32)$$

bzw. durch erneutes Multiplizieren mit \mathbf{B} von links

$$\frac{d\mathbf{B}}{dt} = i\mathbf{B}\mathbf{H}^{(\text{Fock})}. \quad (4.3.33)$$

¹Freilich müssen wir die Integrationsvariable umbenennen, um nicht in Konflikte mit dem Argument ξ in (4.3.26) zu geraten! Nennen wir also die Integrationsvariable ξ' .

Da der Hamiltonoperator im Schrödingerbild $\mathbf{H}^{(\text{Fock})}$ nicht von der Zeit abhängt, ist

$$\mathbf{B} = \exp\left(it\mathbf{H}^{(\text{Fock})}\right). \quad (4.3.34)$$

Also ist

$$\mathbf{H}_H^{(\text{Fock})} = \mathbf{B}\mathbf{H}^{(\text{Fock})}\mathbf{B}^\dagger = \mathbf{H}^{(\text{Fock})} \quad (4.3.35)$$

und der Feldoperator im Heisenbergbild

$$\psi_H(t, \xi) = \mathbf{B}\psi(\xi)\mathbf{B}^\dagger. \quad (4.3.36)$$

Ableiten dieses Ausdrucks nach der Zeit liefert unter Verwendung von (4.3.34) in der Tat sofort

$$\partial_t \psi_H(t, \xi) = -i\mathbf{B} \left[\psi(\xi), \mathbf{H}^{(\text{Fock})} \right] \mathbf{B}^\dagger = \frac{1}{i} \mathbf{B} \hat{H} \psi(\xi) \mathbf{B}^\dagger = \frac{1}{i} \hat{H} \psi_H(t, \xi). \quad (4.3.37)$$

Der **Feldoperator im Heisenbergbild** erfüllt also dieselbe Schrödingergleichung wie die Wellenfunktion für ein Teilchen. Historisch wurde der Fock-Raumformalismus daher auch als „**zweite Quantisierung**“ bezeichnet. Dabei verstand man als „erste Quantisierung“ den Übergang von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik, indem man Ort und Impuls als Operatoren im Hilbertraum auffaßte und korrespondenzmäßig (d.h. über die Identifikation der Poissonklammeralgebra der klassischen Theorie mit der Kommutatoralgebra der Operatoren) die kanonischen Kommutatorrelationen festlegte. Die Fock-Raumformulierung der Vielteilchentheorie bezeichnete man dann als die „zweite Quantisierung“. In der Tat kann man die Kommutatorrelationen durch „kanonische Quantisierung“ aus der **Hamilton-Formulierung des Prinzips der kleinsten Wirkung** für klassische Feldtheorien gewinnen (wobei wieder die Poissonklammern der klassischen Theorie auf Kommutatoren in der Quantentheorie führen). Unser Zugang zur Fock-Raumformulierung zeigt aber, daß es sich nicht um eine neue Theorie handelt, sondern lediglich um eine alternative mathematische Formulierung der Quantentheorie eines Vielteilchensystems gleichartiger Teilchen, wobei als einziges neues Postulat das **Prinzip von der Ununterscheidbarkeit gleichartiger Teilchen** hinzugetreten ist, welches uns auf die vollständig symmetrischen (antisymmetrischen) N -Teilchenräume für Bosonen (bzw. Fermionen) geführt hat.

Es ist weiter klar, daß wir den nunmehr hergeleiteten Fock-Raumformalismus auch mit irgendeiner anderen Einteilchenbasis hätten beginnen können, z.B. mit der Impuls-Spindarstellung. Das führt natürlich wieder auf dieselbe Theorie wie unsere Orts-Spindarstellung.

Im Fall **wechselwirkender Teilchen**, z.B. wenn der Hamiltonoperator eine Zweiteilchenwechselwirkung der Art (4.3.25) enthält, werden die operatorwertigen Bewegungsgleichungen nichtlinear, und man kann i.a. keine Lösungen für diese Gleichungen finden. Daher ist man bei wechselwirkenden Teilchen auf Näherungsverfahren wie die Störungstheorie angewiesen, die wir im nächsten Kapitel besprechen werden.

4.3.5 Kanonische Feldquantisierung

Man kann auf die quantentheoretische Formulierung der Vielteilchensysteme im **Fock-Raum** auch noch auf andere Weise gelangen, und zwar indem man in Analogie zur kanonischen Quantisierung von Punktteilchensystemen zunächst eine klassische Feldtheorie betrachtet und die Feldgleichungen aus dem **Hamiltonschen Prinzip der kleinsten Wirkung** herleitet und dann über die **Poisson-Klammern** der klassischen Theorie zu Kommutator- bzw. Antikommutatorregeln für bosonische bzw. fermionische Feldoperatoren übergeht. Die Rechtfertigung dieses eher heuristischen Verfahrens besteht darin, daß sich daraus die korrekten Kommutatorregeln für die Operatoren der Galileigruppe, formuliert

in der Fock-Raumdarstellung für das Vielteilchenproblem, ergeben. Freilich stimmen die über diese Methode gewonnenen Kommutatorregeln und damit die Konstruktion des Fock-Raums mit den oben hergeleiteten Resultaten überein. Als Beispiel betrachten wir nichtwechselwirkende Spin-1/2-Teilchen in einem vorgegebenen äußeren elektromagnetischen Feld wie in Abschnitt 2.11.

Um die kanonische Feldquantisierung durchführen zu können, benötigen wir zunächst die Formulierung einer klassischen Feldtheorie durch das Hamiltonsche Prinzip der kleinsten Wirkung. Wir suchen also zuerst eine Lagrangefunktion, die auf die **Pauli-Gleichung** (2.11.31) führt. Allgemein betrachten wir die Felder $\psi_\sigma(t, \vec{x})$ als kontinuierlich viele Freiheitsgrade, die durch \vec{x} und σ parametrisiert sind, wobei σ freilich nur die diskreten Werte $\pm 1/2$ annehmen kann. Entsprechend sollte sich die **Lagrange-Funktion** aus einer **Lagrange-Dichte** vermöge

$$L[\psi, \psi^*, \dot{\psi}, \dot{\psi}^*; t] = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \mathcal{L}(\psi, \psi^*, \dot{\psi}, \dot{\psi}^*, \vec{\nabla}\psi, \vec{\nabla}\psi^*; t, \vec{x}) \quad (4.3.38)$$

ergeben. Dabei behandeln wir ψ und ψ^* als unabhängige Feldfreiheitsgrade, da die Spinorkomponenten der Felder komplexwertig sind und im Hamiltonschen Prinzip Real- und Imaginärteil als unabhängige reelle Feldfreiheitsgrade angesehen werden können. Dazu äquivalent ist es, die Spinorkomponenten und ihr konjugiert Komplexes als unabhängig voneinander anzunehmen.

Um die Bewegungsgleichungen herzuleiten, betrachten wir die **Wirkung**

$$A[\psi, \psi^*] = \int_{t_1}^{t_2} dt L[\psi, \psi^*, t] = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \mathcal{L}(\psi, \psi^*, \dot{\psi}, \dot{\psi}^*, \vec{\nabla}\psi, \vec{\nabla}\psi^*; t, \vec{x}). \quad (4.3.39)$$

Wieder in Analogie zur kanonischen Mechanik der Punktteilchen, ergeben sich die Bewegungsgleichungen aus der Stationarität der Wirkung unter unabhängiger Variation der Spinorfeldkomponenten ψ und ψ^* unter der Einschränkung

$$\delta\psi_\sigma(t_1, \vec{x}) = \delta\psi_\sigma(t_2, \vec{x}) = \delta\psi_\sigma^*(t_1, \vec{x}) = \delta\psi_\sigma^*(t_2, \vec{x}) = 0. \quad (4.3.40)$$

Führen wir die Variation aus, erhalten wir wegen

$$\delta\dot{\psi}_\sigma = \partial_t(\delta\psi_\sigma), \quad \delta\dot{\psi}_\sigma^* = \partial_t(\delta\psi_\sigma^*), \quad \delta\vec{\nabla}\psi_\sigma = \vec{\nabla}(\delta\psi_\sigma), \quad \delta\vec{\nabla}\psi_\sigma^* = \vec{\nabla}(\delta\psi_\sigma^*) \quad (4.3.41)$$

durch partielle Integration nach t bzw. \vec{x}

$$\begin{aligned} \delta A = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \left\{ \delta\psi_\sigma \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\sigma} - \partial_t \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \psi_\sigma)} - \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\vec{\nabla} \psi_\sigma)} \right] \right. \\ \left. + \delta\psi_\sigma^* \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\sigma^*} - \partial_t \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \psi_\sigma^*)} - \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\vec{\nabla} \psi_\sigma^*)} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.3.42)$$

Damit dies für unabhängige Variationen der ψ_σ und ψ_σ^* verschwindet, müssen die eckigen Klammern verschwinden. Dies liefert die **Euler-Lagrange-Gleichungen** für Felder

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\sigma} - \partial_t \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \psi_\sigma)} - \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\vec{\nabla} \psi_\sigma)} \right] &= 0, \\ \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\sigma^*} - \partial_t \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \psi_\sigma^*)} - \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\vec{\nabla} \psi_\sigma^*)} \right] &= 0. \end{aligned} \quad (4.3.43)$$

Da die Wirkung ein reelles Funktional sein muß, sind die ersten Gleichungen gerade das Konjugiert Komplexe der zweiten Gleichungen, und man muß nur einen Satz Gleichungen wirklich ausrechnen. Eine Lagrange-Dichte für die Pauligleichung ist offenbar durch

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & i\psi_\sigma^* \partial_t \psi_\sigma - \frac{1}{2m} [(i\vec{\nabla} - q\vec{A})\psi_\sigma^*] \cdot [(-i\vec{\nabla} - q\vec{A})\psi_\sigma] - q\Phi \psi_\sigma^* \psi_\sigma \\ & + \frac{1}{2} g_s \mu_B \psi_\sigma^* \vec{B} \cdot \hat{\sigma}_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma'} \end{aligned} \quad (4.3.44)$$

gegeben. Um zu zeigen, daß für diese Lagrange-Dichte aus den Euler-Lagrange-Gleichungen tatsächlich die Pauli-Gleichung resultiert, bilden wir die entsprechenden Ableitungen nach ψ_σ^* :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\sigma^*} &= i\partial_t \psi_\sigma + \frac{q\vec{A}}{2m} \cdot (-i\vec{\nabla} - q\vec{A})\psi_\sigma - q\Phi \psi_\sigma + \frac{1}{2} g_s \mu_B \vec{B} \cdot \hat{\sigma}_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma'}, \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \psi_\sigma^*)} &= 0, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\vec{\nabla} \psi_\sigma^*)} = \frac{1}{2m} (-\vec{\nabla} + iq\vec{A})\psi_\sigma. \end{aligned} \quad (4.3.45)$$

Dies in (4.3.42) eingesetzt, liefert

$$i\partial_t \psi_\sigma + \frac{q\vec{A}}{2m} \cdot (-i\vec{\nabla} - q\vec{A})\psi_\sigma - q\Phi \psi_\sigma + \frac{1}{2} g_s \mu_B \vec{B} \cdot \hat{\sigma}_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma'} - \frac{1}{2m} [-\Delta \psi_\sigma + iq\vec{\nabla} \cdot (\vec{A}\psi_\sigma)] = 0. \quad (4.3.46)$$

Dies zusammengefaßt ergibt schließlich

$$i\partial_t \psi_\sigma = -\frac{1}{2m} (\vec{\nabla} - iq\vec{A})^2 \psi_\sigma + q\Phi \psi_\sigma - \frac{1}{2} g_s \mu_B \vec{B} \cdot \hat{\sigma}_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma'}. \quad (4.3.47)$$

Dies ist in der Tat die Pauli-Gleichung (2.11.31) in Komponentenschreibweise, d.h. die Lagrangedichte (4.3.44) repräsentiert tatsächlich die Feldtheorie für ein Spin-1/2-Feld, das der Pauli-Gleichung genügt. Um kanonisch quantisieren zu können, müssen wir allerdings zur **Hamiltonschen Formulierung** des Wirkungsprinzips übergehen. Auch hier geht man wieder analog zur Punktmechanik vor. Da wir es allerdings nun mit kontinuierlich vielen Freiheitsgraden zu tun haben, müssen wir zunächst **Funktionalableitungen** definieren. Betrachten wir dazu die Lagrangefunktion (4.3.38) und bilden die Variation nach ψ_σ mit $\delta \psi_\sigma^* = \delta \psi_\sigma = \delta \psi_\sigma^*$:

$$\delta L = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} \left[\delta \psi_\sigma \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\sigma} + \delta (\vec{\nabla} \psi_\sigma) \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\vec{\nabla} \psi_\sigma)} \right]. \quad (4.3.48)$$

Da wir bei der Variation $\delta \vec{x} = \delta t = 0$ voraussetzen, gilt wieder $\delta (\vec{\nabla} \psi_\sigma) = \vec{\nabla} \delta \psi_\sigma$, so daß wir im zweiten Term partiell integrieren können, was zu

$$\delta L = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} \delta \psi_\sigma \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\sigma} - \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\vec{\nabla} \psi_\sigma)} \right] \quad (4.3.49)$$

führt. Daher definieren wir als die **Funktionalableitung** von L nach ψ_σ

$$\frac{\delta L}{\delta \psi_\sigma(t, \vec{x})} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_\sigma} - \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\vec{\nabla} \psi_\sigma)}. \quad (4.3.50)$$

Entsprechend folgt (*Übung!*)

$$\frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}_\sigma(t, \vec{x})} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_\sigma}. \quad (4.3.51)$$

Wieder analog zur klassischen Mechanik führen wir die **kanonisch konjugierten Feldimpulse**

$$\Pi_\sigma(t, \vec{x}) = \frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}_\sigma} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_\sigma} = i\psi_\sigma^*, \quad \Pi_\sigma^*(t, \vec{x}) = \frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}_\sigma^*} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_\sigma^*} = 0, \quad (4.3.52)$$

ein. Die Hamiltonfunktion folgt dann als **funktionale Legendretransformation**:

$$H[\psi, \psi^*, \Pi, \Pi^*] = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} [\Pi_\sigma \dot{\psi}_\sigma + \Pi_\sigma^* \dot{\psi}_\sigma^*] - L = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \mathcal{H}(\Pi, \Pi^*, \psi, \psi^*, \vec{\nabla}\psi, \vec{\nabla}\psi^*). \quad (4.3.53)$$

Die **Hamilton-Dichte** ist also durch

$$\mathcal{H} = \Pi_\sigma \dot{\psi}_\sigma + \Pi_\sigma^* \dot{\psi}_\sigma^* - \mathcal{L} \quad (4.3.54)$$

gegeben. Mit der Lagrangedichte (4.3.44) für die Pauli-Gleichung folgt

$$\Pi_\sigma = i\psi_\sigma^*, \quad (4.3.55)$$

und (*Übung*)

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2mi} [(\vec{\nabla} + iq\vec{A})\Pi_\sigma] \cdot [(\vec{\nabla} - iq\vec{A})\psi_\sigma] + \frac{\Phi}{i} \Pi_\sigma \psi_\sigma - \frac{g_s \mu_B}{2i} \Pi_\sigma (\vec{B} \cdot \vec{\sigma}_{\sigma\sigma'}) \psi_{\sigma'}. \quad (4.3.56)$$

Es ist leicht zu zeigen, daß die **Hamiltonschen kanonischen Feldgleichungen**

$$\begin{aligned} \dot{\psi}_\sigma &= \frac{\delta H}{\delta \Pi_\sigma} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \Pi_\sigma} - \nabla \cdot \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\vec{\nabla}\Pi_\sigma)}, \\ \dot{\Pi}_\sigma &= -\frac{\delta H}{\delta \psi_\sigma} = -\left[\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \psi_\sigma} - \nabla \cdot \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\vec{\nabla}\psi_\sigma)} \right] \end{aligned} \quad (4.3.57)$$

für ψ wieder auf die Pauli-Gleichung (4.3.47) und für Π auf die konjugiert komplexe Pauli-Gleichung führen (*Übung!*). Wie in der klassischen Mechanik ist also die Hamilton-Formulierung äquivalent zur Lagrange-Formulierung des Hamiltonschen Prinzips der kleinsten Wirkung.

Im hier vorliegenden Falle folgt der Zusammenhang (4.3.55) zwischen kanonischen Feldimpulsen und Feldern nicht aus den Hamiltonschen kanonischen Feldgleichungen, weil die Lagrange-Dichte linear in $\dot{\psi}$ und entsprechend die Hamilton-Dichte linear in Π ist. Da allerdings die kanonische Feldgleichung für Π gerade die konjugiert komplexe Pauli-Gleichung für ψ^* erfüllt, können wir (4.3.55) als Nebenbedingung voraussetzen.

Wie in der klassischen Mechanik können wir vermöge

$$\{A, B\}_{\text{pb}} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \left[\frac{\delta A}{\delta \psi_\sigma(t, \vec{x})} \frac{\delta B}{\delta \Pi_\sigma(t, \vec{x})} - \frac{\delta A}{\delta \Pi_\sigma(t, \vec{x})} \frac{\delta B}{\delta \psi_\sigma(t, \vec{x})} \right] \quad (4.3.58)$$

auch **Poisson-Klammern** für beliebige Funktionale der Felder und kanonischen Feldimpulse definieren. Dabei sind die Funktionale über ihre entsprechenden Dichten

$$A[\psi, \Pi] = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \mathcal{A}(\psi, \Pi, \vec{\nabla}\psi, \vec{\nabla}\Pi, \dots) \quad (4.3.59)$$

definiert. Aus den Hamiltonschen kanonischen Gleichungen folgt dann für die Zeitableitung eines beliebigen Funktionals

$$\frac{d}{dt}A[\psi, \Pi] = \{A, H\}_{\text{pb}}. \quad (4.3.60)$$

Auch die Bewegungsgleichungen, die sich aus den Hamiltonschen Kanonischen Gleichungen (4.3.57) ergeben, können mit Poissonklammern ausgedrückt werden, denn wegen

$$\psi_{\sigma}(t, \vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}' \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \delta_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma'}(t, \vec{x}') \quad (4.3.61)$$

ist

$$\frac{\delta \psi_{\sigma}(t, \vec{x})}{\delta \psi_{\sigma'}(t, \vec{x}')} = \delta_{\sigma\sigma'} \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}'). \quad (4.3.62)$$

Daraus folgen insbesondere die elementaren Poisson-Klammerbeziehungen

$$\begin{aligned} \left\{ \psi_{\sigma}(t, \vec{x}), \psi_{\sigma'}(t, \vec{x}') \right\}_{\text{pb}} &= \left\{ \Pi_{\sigma}(t, \vec{x}), \Pi_{\sigma'}(t, \vec{x}') \right\}_{\text{pb}} = 0, \\ \left\{ \psi_{\sigma}(t, \vec{x}), \Pi_{\sigma'}(t, \vec{x}') \right\}_{\text{pb}} &= \delta_{\sigma\sigma'} \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}'). \end{aligned} \quad (4.3.63)$$

Entsprechend der kanonischen Quantisierung in der Punktmechanik können nun die Poisson-Klammerrelationen für Funktionale der klassischen Felder als Kommutatorrelationen für **bosonische Feldoperatoren** uminterpretiert werden:

$$\begin{aligned} \left[\psi_{\sigma}(t, \vec{x}), \psi_{\sigma'}(t, \vec{x}') \right] &= \left[\Pi_{\sigma}(t, \vec{x}), \Pi_{\sigma'}(t, \vec{x}') \right] = 0, \\ \left[\psi_{\sigma}(t, \vec{x}), \Pi_{\sigma'}(t, \vec{x}') \right] &= i \delta_{\sigma\sigma'} \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \quad (\text{Bosonen}). \end{aligned} \quad (4.3.64)$$

Für **fermionische Feldoperatoren** müssen wir hingegen **Antikommutatorrelationen** postulieren:

$$\begin{aligned} \left\{ \psi_{\sigma}(t, \vec{x}), \psi_{\sigma'}(t, \vec{x}') \right\} &= \left\{ \Pi_{\sigma}(t, \vec{x}), \Pi_{\sigma'}(t, \vec{x}') \right\} = 0, \\ \left\{ \psi_{\sigma}(t, \vec{x}), \Pi_{\sigma'}(t, \vec{x}') \right\} &= i \delta_{\sigma\sigma'} \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \quad (\text{Fermionen}). \end{aligned} \quad (4.3.65)$$

Es zeigt sich, daß dieses Vorgehen alle Beziehungen aus den vorherigen Abschnitten 4.3.2-4.3.4 reproduziert. Dabei ergibt sich die Zeitabhängigkeit der Feldoperatoren im **Heisenberg-Bild**. Für Zweiteilchenwechselwirkungen über ein Potential ist zum sich bei der kanonischen Quantisierung der Hamiltondichte (4.3.56) ergebenden Einteilchen-Hamilton-Operator noch der Zweiteilchenoperator (4.3.25) hinzuzufügen.

4.3.6 Das Noether-Theorem im Feldformalismus

Wir können nun, wieder analog wie in der Punktmechanik, die Bedeutung von **Symmetrien** für die Felder betrachten. Dabei liegt wieder eine Symmetrie vor, wenn die **Bewegungsgleichungen forminvariant** unter der entsprechenden Transformation sind. So ist die **Schrödinger-Gleichung** für ein freies

Teilchen forminvariant unter den **Galilei-Transformationen**. Für Felder bietet es sich an, die Analyse der Symmetrien in der Lagrange-Formulierung durchzuführen. Betrachten wir also zunächst die Wirkung für klassische Felder ψ^2 .

Es bietet sich nun an, bereits hier die relativistische Notation für die Raumkomponenten und die Zeit anzuwenden. Wir fassen diese Komponenten zusammen in einen **Vierervektor**, dessen Komponenten wir mit hochgestellten griechischen Indizes versehen. Sie laufen stets von 0 bis 3, d.h. wir setzen $x^0 := t$. Die hochgestellten Indizes sind nicht mit Potenzen zu verwechseln. Wir werden weiter unten bei der Behandlung der Lorentz-Transformationen sehen, warum diese Schreibweise nützlich ist. Unsere Vierervektoren sind wie folgt definiert

$$x = (x^\mu) = \begin{pmatrix} t \\ \vec{x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix}. \quad (4.3.66)$$

Hat man irgendeine Funktion $f(x) = f(t, \vec{x})$ gegeben, so bezeichnen wir die Komponenten des **Vierervektorgradienten** mit einem unteren Index, d.h. es gilt

$$\partial_\mu f(x) := \frac{\partial}{\partial x^\mu} f(x). \quad (4.3.67)$$

Es ist also

$$[\partial_\mu f(x)] = \begin{pmatrix} \partial_t f(x) \\ \vec{\nabla} f(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial_t f(x) \\ \partial_x f(x) \\ \partial_y f(x) \\ \partial_z f(x) \end{pmatrix}. \quad (4.3.68)$$

Über wiederholte griechische Indizes wird wieder stillschweigend summiert (**Einsteinsche Summationskonvention**).

Wir betrachten nun infinitesimale Transformationen der Form

$$\delta x^\mu = \delta \alpha_a T_a^\mu(x), \quad \delta \psi = \delta \alpha_a \Lambda_a(\psi, x). \quad (4.3.69)$$

Dabei sind die $\delta \alpha_a$ die „infinitesimalen“ Parameter der betrachteten Symmetriegruppe. Die Wirkung können wir nun in der Form

$$A[\psi] = \int_{\mathbb{R}^4} d^4x \mathcal{L}(\psi, \partial_\mu \psi, x) \quad (4.3.70)$$

schreiben. Die Bewegungsgleichungen ergeben sich, wie in Abschnitt 4.3.5 gezeigt, aus der Stationarität dieses Funktionals unter beliebigen Variationen der Felder, wobei die Raumzeitkoordinaten x^μ nicht mitvariiert werden. Dieses **Hamiltonsche Wirkungsprinzip für Felder** führt auf die **Euler-Lagrange-Gleichungen** (4.3.43). In unserer Vierervektornotation können wir diese übersichtlicher zu

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} - \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \psi)} = 0 \quad (4.3.71)$$

zusammenfassen.

²Im folgenden wird für mehrkomponentige Felder, wie z.B. Spinorfeldern, stets stillschweigend über alle Feldkomponenten summiert. Für komplexe Felder sind auch wieder ψ und ψ^* als unabhängige Feldfreiheitsgrade anzusehen.

Es ist klar, daß für eine vorgegebene Feldgleichung die Wirkung nicht eindeutig bestimmt ist. Fügen wir nämlich zur Lagrangedichte eine beliebige **Viererddivergenz**

$$\mathcal{L}'(\psi, \partial_\mu \psi, x) = \mathcal{L}(\psi, \partial_\mu \psi, x) + \partial_\mu \Omega^\mu(\psi, x) \quad (4.3.72)$$

hinzu, ergeben sich mit (4.3.71) identische Feldgleichungen. Dies ergibt sich sofort aus (*Übung!*)

$$\partial_\mu \Omega^\mu(\psi, x) = \frac{\partial}{\partial \psi} \Omega^\mu(\psi, x) \partial_\mu \psi + \partial_\mu^{(\text{expl})} \Omega^\mu(\psi, x) \quad (4.3.73)$$

durch Einsetzen der Lagrangedichte \mathcal{L}' in (4.3.71). Hier und im folgenden bezeichnet der Operator $\partial_\mu^{(\text{expl})}$ die Ableitung der betreffenden Funktion nach den Raumzeitkomponenten hinsichtlich der expliziten Abhängigkeit von diesen Variablen, d.h. die Abhängigkeit, die nicht implizit in den Feldern ψ und ihren Ableitungen $\partial_\mu \psi$ steckt.

Wir betrachten nun die Variation der Wirkung (4.3.70) unter der allgemeinen Transformation (4.3.69). Im Gegensatz zur Variation beim Hamiltonschen Prinzip haben wir hier zu berücksichtigen, daß wir nicht nur die Felder variieren wollen, sondern auch die Raumzeitargumente. Es gilt

$$\delta A[\psi] = \int_{\mathbb{R}^4} d^4 x' \mathcal{L}(\psi', \partial'_\mu \psi', x') - \int_{\mathbb{R}^4} d^4 x \mathcal{L}(\psi, \partial_\mu \psi, x). \quad (4.3.74)$$

Wir müssen also zunächst das Vierervolumenelement transformieren, wobei wir nur bis zur ersten Ordnung in den δx entwickeln müssen. Offenbar ist

$$d^4 x' = \det \left(\frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\nu} \right) d^4 x = d^4 x \det(\partial_\nu x'^\mu) \quad (4.3.75)$$

mit der **Jacobi-Matrix**

$$\partial_\nu x'^\mu = \partial_\nu (x^\mu + \delta x^\mu) = \delta^\mu_\nu + \partial_\nu (\delta x^\mu), \quad (4.3.76)$$

wobei

$$\delta^\mu_\nu := \begin{cases} 1 & \text{für } \mu = \nu \\ 0 & \text{für } \mu \neq \nu \end{cases} \quad (4.3.77)$$

wieder das **Kronecker-Symbol** bezeichnet, diesmal allerdings in unserer Vierervektorschreibweise mit einem hoch- und einem tiefgestellten Index. Die Entwicklung der Determinante der Jacobi-Matrix (4.3.76) nach Zeilen (oder auch Spalten) zeigt, daß Terme in erster Ordnung in δx^μ nur vom Produkt der Diagonalelemente herrühren können, so daß wir

$$\det(\partial_\nu \delta x^\mu) = 1 + \partial_\nu (\delta x^\nu) + \mathcal{O}(\delta \alpha_a^2) \quad (4.3.78)$$

erhalten. Es ist also

$$\delta d^4 x = d^4 x' - d^4 x = d^4 x \partial_\nu (\delta x^\nu). \quad (4.3.79)$$

Außerdem vertauscht auch die Ableitung der Felder nach Raumzeitkomponenten nicht mehr mit der Variation. Vielmehr gilt

$$\delta(\partial_\mu \psi) = \partial'_\mu \psi' - \partial_\mu \psi = (\partial'_\mu x^\nu) \partial_\nu (\psi + \delta \psi) - \partial_\mu \psi. \quad (4.3.80)$$

Hier tritt die inverse Jacobimatrix der Transformation auf. Wir müssen sie also zunächst invertieren. Die Inverse benötigen wir aber wieder nur bis zur ersten Ordnung in den $\delta \alpha_a$. Es ist

$$\partial'_\mu x^\nu = (\partial_\nu x^\mu)^{-1} = (\delta^\mu_\nu + \partial_\nu (\delta x^\mu))^{-1} = \delta^\nu_\mu - \partial_\nu (\delta x^\mu) + \mathcal{O}(\delta \alpha_a^2). \quad (4.3.81)$$

In der Tat gilt nämlich

$$[\delta^\mu{}_\nu + \partial_\nu(\delta x^\mu)][\delta^\nu{}_\rho - \partial_\rho(\delta x^\nu)] = \delta^\mu{}_\rho + \partial_\rho(\delta x^\mu) - \partial_\rho(\delta x^\mu) + \mathcal{O}(\delta \alpha_a^2) = \delta^\mu{}_\rho + \mathcal{O}(\delta \alpha_a^2). \quad (4.3.82)$$

Nun ist

$$\delta \mathcal{L} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \delta \psi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi)} \delta(\partial_\mu \psi) + \delta x^\mu \partial_\mu^{(\text{expl})} \mathcal{L}. \quad (4.3.83)$$

Berechnen wir also die Variation der Wirkung (4.3.74), ergibt sich mit Hilfe der Beziehungen (4.3.79-4.3.83) als Bedingung dafür, daß eine Symmetrietransformation vorliegt,

$$\begin{aligned} \delta A &= \int_{\mathbb{R}^4} d^4 x \left[\delta \mathcal{L} + \mathcal{L} \partial_\mu \delta x^\mu \right] \\ &= \int_{\mathbb{R}^4} d^4 x \left\{ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \delta \psi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi)} \partial_\mu \delta \psi + \delta x^\mu \partial_\mu^{(\text{expl})} \mathcal{L} \right. \\ &\quad \left. - \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi)} \partial_\nu \psi - \mathcal{L} \delta^\mu{}_\nu \right] \partial_\mu \delta x^\nu \right\} \stackrel{!}{=} 0. \end{aligned} \quad (4.3.84)$$

Damit dies für beliebige Felder ψ gilt, muß der Integrand bis auf eine totale Viererdivergenz der Form (4.3.73) verschwinden, d.h. es existiert ein Vierervektor $\Omega^\mu(\psi, x)$, so daß

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \delta \psi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi)} \partial_\mu \delta \psi + \delta x^\mu \partial_\mu^{(\text{expl})} \mathcal{L} - \Theta^\mu{}_\nu \partial_\mu \delta x^\nu + \partial_\mu \delta \Omega^\mu(\psi, x) = 0 \quad (4.3.85)$$

gilt. Dabei haben wir den **kanonischen Energie-Impulstensor**

$$\Theta^\mu{}_\nu = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi)} \partial_\nu \psi - \mathcal{L} \delta^\mu{}_\nu \quad (4.3.86)$$

eingeführt.

Falls also (4.3.85) für die Transformationen (4.3.69) erfüllt ist, sind diese Transformationen **Symmetrietransformationen**. Für Lösungen der Feldgleichungen (4.3.71) folgt nun durch Bilden der Viererdivergenz von (4.3.86) bzgl. μ , nach kurzer Rechnung (*Übung!*)

$$\partial_\mu \Theta^\mu{}_\nu = -\partial_\nu^{(\text{expl})} \mathcal{L} \quad (4.3.87)$$

und damit

$$\partial_\mu \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi)} \delta \psi - \Theta^\mu{}_\nu \delta x^\nu + \delta \Omega^\mu \right] = 0. \quad (4.3.88)$$

Dies ist das **Noether-Theorem** für Felder: Setzt man (4.3.69) für $\delta \psi$ und δx^ν ein, ergibt sich für jede unabhängige Symmetrietransformation ein Vektorfeld

$$j_a^\mu(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi)} \Lambda_a(\psi, x) + \frac{\partial \Omega_a^\mu}{\partial \psi} + \left(\partial_\nu^{(\text{expl})} \Omega_a^\mu - \Theta^\mu{}_\nu \right) T_a^\nu(x), \quad (4.3.89)$$

das der **Kontinuitätsgleichung**

$$\partial_\mu j_a^\mu = 0 \quad (4.3.90)$$

genügt. Dabei haben wir

$$\delta \Omega^\mu = \delta \alpha_a \Omega_a^\mu \quad (4.3.91)$$

gesetzt. Diesen Sachverhalt kennen wir aus der Elektrodynamikvorlesung im Zusammenhang mit der **Erhaltung der Ladung**. Man nennt j_a^μ daher die **Noether-Stromdichte** (oft auch etwas ungenau den **Noether-Strom**), der der durch α_a parametrisierten Symmetrietransformation zugeordnet ist.

Um zu sehen, daß mit (4.3.90) ein Erhaltungssatz verbunden ist, trennen wir diese Gleichung zunächst wieder in Zeit- und Ortsableitungen auf:

$$\partial_t j_a^0 + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_a = 0. \quad (4.3.92)$$

Bringen wir die Dreierdivergenz auf die rechte Seite und integrieren über den ganzen Raum, so folgt aus dem **Gaußschen Integralsatz**

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} j_a^0(t, \vec{x}) = - \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(t, \vec{x}) = \int_{\partial \mathbb{R}^3} d^2 \vec{A} \cdot \vec{j}(t, \vec{x}) = 0. \quad (4.3.93)$$

Dabei sind wir davon ausgegangen, daß die Stromdichte \vec{j} im Unendlichen hinreichen schnell verschwindet, so daß das Flächenintegral über die im Unendlichen zu denkende Randfläche des gesamten Raumes ebenfalls verschwindet. Definieren wir die **Noether-Ladung** zu der durch α_a parametrisierten Symmetrietransformation durch

$$Q_a(t) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} j_a^0(t, \vec{x}), \quad (4.3.94)$$

so folgt wegen (4.3.93) in der Tat der Erhaltungssatz

$$\frac{d}{dt} Q_a(t) = 0. \quad (4.3.95)$$

In vollkommener Analogie zum Noether-Theorem der Punktmechanik ergibt sich also aus jeder Einparametersymmetrie eine Erhaltungsgröße, eben die dazugehörige Noether-Ladung. Der zeitlichen Komponente j_a^0 der Viererstromdichte kommt also die Rolle der entsprechenden **Ladungsdichte** zu.

Wir betrachten nun als Beispiel die Galilei-Symmetrie der Quantentheorie freier Spin-1/2-Teilchen. Die Lagrangedichte ergibt sich, wenn wir in (4.3.44) das äußeren elektromagnetische Feld 0 setzen:

$$\mathcal{L} = i \psi_\sigma^* \partial_t \psi_\sigma - \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} \psi_\sigma^*) \cdot (\vec{\nabla} \psi_\sigma). \quad (4.3.96)$$

Translationen in Raum und Zeit

Die zeitlichen und räumlichen Translationen sind durch

$$x' = x - a, \quad \psi'(x') = \psi(x) \Rightarrow \delta x^\mu = -\delta a^\mu = -\delta^\mu_\nu \delta a^\nu = \text{const}, \quad \delta \psi(x) = 0 \quad (4.3.97)$$

gegeben. Hier ist also

$$T^\mu_\nu = -\delta^\mu_\nu, \quad \Lambda = 0. \quad (4.3.98)$$

Die Bedingung dafür, daß dies eine infinitesimale Symmetrietransformation ist, ist gemäß (4.3.85), daß \mathcal{L} nicht explizit von x^μ abhängt, was für (4.3.96) erfüllt ist. Es ergibt sich dann, daß $\Omega_a^\mu = 0$ gesetzt werden kann, und die dazugehörigen Noether-Ströme sind dann gemäß (4.3.89) durch den Energie-Impulstensor gegeben. Die dazugehörigen Erhaltungsgrößen sind dann (bis auf das Vorzeichen, daß sich

durch die Wahl der Vorzeichen in (2.6.1) bestimmt, wie wir weiter unten noch sehen werden) **Energie und Impuls** der Felder. In unserem Falle also

$$\begin{aligned}
 H &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \Theta^0_0 = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \psi_\sigma^*(x) (i\partial_t) \psi_\sigma(x) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \psi_\sigma^*(x) \left(-\frac{\Delta}{2m} \right) \psi_\sigma(x), \\
 p_j &= - \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \Theta^0_j = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \psi_\sigma^*(x) (-i\partial_j) \psi_\sigma(x).
 \end{aligned} \tag{4.3.99}$$

Drehungen

Für infinitesimale Drehungen um die Drehachse \vec{n} haben wir mit den Pauli-Matrizen $\hat{\sigma}$ gemäß (2.11.8) und (2.11.11)

$$t' = t, \quad \vec{x}' = \vec{x} - \delta\phi \vec{n} \times \vec{x}, \quad \psi'(x') = \left(\mathbb{1} + i\delta\phi \frac{\vec{n} \cdot \hat{\sigma}}{2} \right) \psi(x), \tag{4.3.100}$$

d.h. in der Schreibweise (4.3.69)

$$\delta t = 0, \quad \delta x_j = -\delta\phi \epsilon_{jkl} n_k x_l, \quad \delta\psi = i\delta\phi \frac{\vec{n} \cdot \hat{\sigma}}{2} \psi. \tag{4.3.101}$$

Die Noether-Bedingung (4.3.85) ist wieder mit $\Omega_a^\mu = 0$ erfüllt, und folglich ergibt sich gemäß (4.3.89) für den **Gesamtdrehimpuls**, der die zur Rotationsinvarianz gehörige Erhaltungsgröße ist

$$J_k = - \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \left[\Theta^0_j \epsilon_{jkl} x_l - \psi^\dagger \frac{\hat{\sigma}_k}{2} \psi \right] \Rightarrow \vec{J} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \psi^\dagger \left[\vec{x} \times (-i\vec{\nabla}) + \frac{\hat{\sigma}}{2} \right] \psi. \tag{4.3.102}$$

Boosts

Für die Boosts ist der Phasenfaktor in (2.10.19) zu berücksichtigen, d.h. es gilt

$$t' = t, \quad \vec{x}' = \vec{x} - \delta\vec{w}t, \quad \psi'(x') = [1 - im\delta\vec{w} \cdot \vec{x} + \mathcal{O}(\delta\vec{w}^2)] \psi(x). \tag{4.3.103}$$

Da die Entwicklung nur bis zur ersten Ordnung in der infinitesimalen Boostgeschwindigkeit $\delta\vec{w}$ erfolgen muß, ist also

$$\delta\psi = -im\delta\vec{w} \cdot \vec{x} \psi, \quad \delta t = 0, \quad \delta\vec{x} = -\delta\vec{w}t. \tag{4.3.104}$$

Die Auswertung von (4.3.85) ergibt wieder, daß $\Omega_a^\mu = 0$ gesetzt werden kann, und (4.3.89) liefert als Erhaltungsgröße

$$\vec{K} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \psi^\dagger [m\vec{x} - t(-i\vec{\nabla})] \psi. \tag{4.3.105}$$

Zur Quantisierung im Fock-Raumformalismus schreibt man nun in den Ausdrücken (4.3.99, 4.3.102, 4.3.105) für Erhaltungsgrößen für die Felder Feldoperatoren, und unter Verwendung der Kommutatorregeln (4.2.12), wobei in unserem Fall für Spin-1/2-Teilchen die fermionischen Antikommutatoren zu betrachten sind, läßt sich leicht zeigen (*Übung!*), daß die entsprechenden Operatoren \mathbf{H} , $\vec{\mathbf{p}}$, $\vec{\mathbf{J}}$ und $\vec{\mathbf{K}}$ wieder die Kommutatorregeln der Strahldarstellung der Galilei-Gruppe (2.6.33-2.6.41) erfüllen, wie wir sie im Einteilchenformalismus hergeleitet hatten.

Phaseninvarianz

Wir haben schon oft die Tatsache betont, daß Wellenfunktionen, die sich nur um Phasenfaktoren unterscheiden, denselben Zustand beschreiben. Demnach muß die Transformation

$$\psi'(x) = \exp(-i\alpha)\psi(x) \quad \text{mit} \quad \alpha = \text{const} \quad (4.3.106)$$

eine Symmetrietransformation der Feldgleichungen sein. In der Tat ist die Lagrangedichte (4.3.96) invariant unter dieser Transformation und folglich die Noether-Bedingung (4.3.85) für die entsprechende infinitesimale Transformation

$$\delta x = 0, \quad \delta \psi = -i\delta\alpha\psi \quad (4.3.107)$$

mit $\delta\Omega^\mu = 0$ erfüllt. Der dazugehörige Noether-Strom ist (*Übung!*)

$$j^0 = \psi^\dagger\psi, \quad \vec{j} = \frac{1}{2mi} [\psi^\dagger\vec{\nabla}\psi - (\vec{\nabla}\psi^\dagger)\psi]. \quad (4.3.108)$$

Setzt man wieder die quantisierten Felder ein, ergibt sich als erhaltene Größe der Operator der Gesamtteilchenzahl (vgl. Abschnitt 4.3.1).

$$\mathbf{N} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \psi^\dagger\psi. \quad (4.3.109)$$

Wir weisen zum Abschluß unserer Symmetriebetrachtungen im Feldformalismus nur darauf hin, daß diese Betrachtungen genauso auf den Fall wechselwirkender Teilchen anwendbar sind. Im einfachsten Fall haben wir es nur mit durch ein Zentralpotential beschriebenen Zweiteilchenwechselwirkungen zu tun. Dafür lautet die Lagrangedichte

$$\mathcal{L} = i\psi_\sigma^* \partial_t \psi_\sigma - \frac{1}{2m} (\vec{\nabla}\psi_\sigma^*) \cdot (\vec{\nabla}\psi_\sigma) - \frac{1}{2} \int d\xi_1 \int d\xi_2 V(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|) \psi^\dagger(\xi_1) \psi^\dagger(\xi_2) \psi(\xi_2) \psi(\xi_1), \quad (4.3.110)$$

die wir gleich in quantisierter Form geschrieben haben, um die hier wichtige **Reihenfolge der Operatoren im Wechselwirkungsterm** zu betonen. Der Wechselwirkungsterm ergibt sich dabei aus dem entsprechenden Ausdruck für den Wechselwirkungsanteil des Hamiltonoperators im Fock-Raumformalismus (4.3.25). Auch diese Lagrangedichte erweist sich als invariant (*Übung*) unter Galilei-Transformationen und beschreibt damit ein abgeschlossenes Vielteilchensystem. Da weiter auch diese Lagrangedichte unter der Phasentransformation invariant ist, bleibt auch für diesen Fall die Gesamtteilchenzahl erhalten, und falls man eine Situation beschreibt, die zur Zeit $t = 0$ einem System mit wohlbestimmter Teilchenzahl N entspricht, spielt sich die gesamte Dynamik im Teilraum mit dieser wohlbestimmten Teilchenzahl ab. In diesem Falle ist somit der Fockraumformalismus vollständig äquivalent zum Formalismus mit einer klassischen Wellenfunktion $\psi(t, \xi_1, \dots, \xi_N)$, die entsprechend der bosonischen (fermionischen) Natur der Teilchen vollständig symmetrisch (antisymmetrisch) unter Vertauschen der Orts-Spinargumente ξ_k ist. Daraus wird nochmals ersichtlich, daß für diesen Spezialfall einer die Teilchenzahl erhaltenden Wechselwirkung der Fock-Raumformalismus („zweite Quantisierung“) äquivalent ist zur Beschreibung mit einer bosonischen oder fermionischen Vielteilchenwellenfunktion zur festen Teilchenzahl N („erste Quantisierung“).

Freilich ist die Fock-Raumbeschreibung als Quantenfeldtheorie nicht nur in vielen Fällen rechen-technisch bequemer als die „erste Quantisierung“, sondern sie läßt sich auch auf allgemeinere Situationen anwenden, bei denen die Teilchenzahl nicht erhalten ist. Dies trifft insbesondere auf die relativistische Quantentheorie zu, wo bei Stößen Teilchenerzeugungs- und Vernichtungsprozesse möglich sind. Darauf kommen wir weiter unten noch ausführlich zu sprechen.

4.4 Fockräume freier Bosonen und Fermionen

In diesem Abschnitt beschäftigen wir uns ausführlich mit der Beschreibung von Vielteilchensystemen, die aus nichtwechselwirkenden Teilchen bestehen, die auch keinem äußeren Potential ausgesetzt sind. Dies dient nicht nur der Einübung der oben entwickelten quantenfeldtheoretischen Vielteilchenrechen-technik im Fock-Raumformalismus sondern bildet auch eine wichtige Grundlage für das Studium wechselwirkender Vielteilchensysteme im Rahmen der **Störungstheorie**, womit wir uns im nächsten Kapitel beschäftigen wollen. Dies wird uns auf die ungemein schlagkräftige Methode der **Feynman-Diagramme** führen. Als eine erste Anwendung der Vielteilchenmethoden werden wir aber auch die **Thermodynamik idealer Quantengase** behandeln.

Wir betrachten zunächst wieder Bosonen und Fermionen zusammen. Wir arbeiten von nun an im **Heisenberg-Bild** und lassen im folgenden die Indizes H an den Operatoren und Zuständen weg, ebenso wie die Bezeichnung „Fock“ an den Operatoren. Fettgedruckte Symbole stehen im folgenden stets für Operatoren im Fockraum. Differentialoperatoren im Sinne der „ersten Quantisierung“ kennzeichnen wir mit einem Dach über dem Symbol.

Der Hamiltonoperator für freie Teilchen lautet gemäß (4.3.22)

$$\mathbf{H} = \int d\xi \psi^\dagger(t, \xi) \left(-\frac{\Delta}{2m} \right) \psi(t, \xi), \quad (4.4.1)$$

und die Bewegungsgleichung ist wegen (4.3.37) die Schrödingergleichung für ein freies Teilchen

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \xi) = \left(-\frac{\Delta}{2m} \right) \psi(t, \xi). \quad (4.4.2)$$

Wie wir gleich sehen werden, empfiehlt es sich, die Teilchen zunächst in einem **endlichen Volumen** zu betrachten. Dazu wählen wir einen Würfel der Kantenlänge L . Da wir an Randeffekten nicht interessiert sind und schließlich an geeigneter Stelle unserer Rechnungen zum Limes $L \rightarrow \infty$ übergehen wollen, können wir die Randbedingungen bequem wählen. Besonders einfach sind periodische Randbedingungen

$$\psi(t, \vec{x} + L\vec{n}, \sigma) = \psi(t, \vec{x}) \quad \text{für alle } \vec{n} \in \mathbb{Z}^3. \quad (4.4.3)$$

Die Lösungen der Feldgleichungen (4.4.2) lassen sich nun nach den **ebenen Wellen**

$$u_{\vec{p}, \sigma}(t, \vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}^3} \exp[-i[E(\vec{p})t - \vec{p} \cdot \vec{x}]] \chi_\sigma \quad (4.4.4)$$

entwickeln. Dabei ist χ_σ der Spaltenspinor bzgl. der Eigenbasis zu σ_z zu den Eigenwerten σ mit $\sigma \in \{-s, -s+1, \dots, s-1, s\}$.

Damit die periodische Randbedingung (4.4.3) erfüllt ist, muß offenbar

$$\vec{p} = \frac{2\pi}{L} \vec{n} \quad \text{mit } \vec{n} \in \mathbb{Z}^3 \quad (4.4.5)$$

erfüllt sein. Die Normierung der Moden (4.4.4) ist so gewählt, daß

$$\int_V d^3x \left| u_{\vec{p}, \sigma}(t, \vec{x}) \right|^2 = 1 \quad (4.4.6)$$

ist. Damit die Bewegungsgleichung (4.4.2) erfüllt ist, muß die **Dispersionsrelation**

$$E(\vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (4.4.7)$$

gelten. Damit ergibt sich für die Entwicklung der Feldoperatoren nach Impuls-Spin-Eigenmoden

$$\psi(t, \vec{x}, \sigma) = \sum_{\vec{p}} \sum_{\sigma=-s}^s \mathbf{a}(\vec{p}, \sigma) u_{\vec{p}, \sigma}(t, \vec{x}). \quad (4.4.8)$$

Die Operatoren $\mathbf{a}(\vec{p}, \sigma)$ sind durch die **Fourier-Koeffizienten**

$$\mathbf{a}(\vec{p}, \sigma) = \int_V d^3x u_{\vec{p}, \sigma}^*(t, \vec{x}) \psi(t, \vec{x}, \sigma) \quad (4.4.9)$$

gegeben. Aus den (Anti-)Kommutatorrelationen (4.2.12), die im hier verwendeten **Heisenbergbild** für **gleiche Zeiten** in den Argumenten der (Anti-)Kommulatorklammer gelten, folgen die (Anti-)Kommutatorrelationen (*Übung!*):

$$[\mathbf{a}(\vec{p}, \sigma), \mathbf{a}(\vec{p}', \sigma')]_{\mp} = 0, \quad [\mathbf{a}(\vec{p}, \sigma), \mathbf{a}^\dagger(\vec{p}', \sigma')]_{\mp} = \delta_{\vec{p}, \vec{p}'}^{(3)} \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (4.4.10)$$

Dabei gilt das obere (untere) Vorzeichen wieder für Bosonen (Fermionen).

Wir zeigen nun noch, daß die $\mathbf{a}(\vec{p}, \sigma)$ ($\mathbf{a}^\dagger(\vec{p}, \sigma)$) Vernichter (Erzeuger) für Impuls-Spin-Einteilchenzustände sind. Dies folgt unmittelbar daraus, daß gemäß (4.3.20) bzw. (4.3.23) der Gesamtimpuls- und Gesamtspinoperator durch

$$\vec{\mathbf{P}} = \sum_{\sigma} \int_V d^3x \psi^\dagger(t, \vec{x}, \sigma) (-i\vec{\nabla}) \psi(t, \vec{x}, \sigma) = \sum_{\vec{p}, \sigma} \vec{p} \mathbf{a}^\dagger(\vec{p}, \sigma) \mathbf{a}(\vec{p}, \sigma), \quad (4.4.11)$$

$$\vec{\mathbf{S}} = \sum_{\sigma} \int_V d^3x \psi^\dagger(t, \vec{x}, \sigma) \sum_{\sigma'} \vec{s}_{\sigma\sigma'} \psi(t, \vec{x}, \sigma') = \sum_{\vec{p}, \sigma} \mathbf{a}^\dagger(\vec{p}, \sigma) \sum_{\sigma'} \vec{s}_{\sigma\sigma'} \mathbf{a}(\vec{p}, \sigma') \quad (4.4.12)$$

gegeben sind. Für \mathbf{S}_z folgt wegen $\sigma_{z, \sigma\sigma'} = \sigma \delta_{\sigma\sigma'}$ insbesondere

$$\mathbf{S}_z = \sum_{\vec{p}, \sigma} \sigma \mathbf{a}^\dagger(\vec{p}, \sigma) \mathbf{a}(\vec{p}, \sigma). \quad (4.4.13)$$

Die Einteilchenzustände

$$|\vec{p}, \sigma\rangle = \mathbf{a}^\dagger(\vec{p}, \sigma) |\Omega\rangle \quad (4.4.14)$$

sind demnach simultane Eigenzustände zu $\vec{\mathbf{P}}$ und \mathbf{S}_z zu den Eigenwerten \vec{p} bzw. σ .

Die Gesamtenergie ist gemäß (4.4.1) durch

$$\mathbf{H} = \sum_{\vec{p}, \sigma} E(\vec{p}) \mathbf{a}^\dagger(\vec{p}, \sigma) \mathbf{a}(\vec{p}, \sigma) \quad (4.4.15)$$

gegeben. Der **Gesamtteilchenzahloperator** folgt aus (4.3.4) und Einsetzen von (4.3.1):

$$\mathbf{N} = \sum_{\vec{p}, \sigma} \mathbf{a}^\dagger(\vec{p}, \sigma) \mathbf{a}(\vec{p}, \sigma). \quad (4.4.16)$$

Der Operator, der die Anzahl der Teilchen mit einem bestimmten Spin und einem bestimmten Impuls repräsentiert, ist demnach durch

$$\tilde{\mathbf{N}}(\vec{p}, \sigma) = \mathbf{a}^\dagger(\vec{p}, \sigma) \mathbf{a}(\vec{p}, \sigma) \quad (4.4.17)$$

gegeben.

4.5 Gleichgewichtsthermodynamik idealer Gase

Der **großkanonische Statistische Operator** ist gemäß (3.2.4) durch

$$\mathbf{R} = \frac{1}{Z} \exp(-\Phi \mathbb{1} - \beta \mathbf{H} - \alpha \mathbf{N}) \quad (4.5.1)$$

gegeben. Die **großkanonische Zustandssumme** ist durch

$$Z = \exp \Phi = \text{Tr} \exp(-\beta \mathbf{H} - \alpha \mathbf{N}) \quad (4.5.2)$$

definiert, und die Parameter β und α hängen gemäß (3.3.5)

$$\beta = \frac{1}{k_B T}, \quad \alpha = -\frac{\mu}{k_B T} \quad (4.5.3)$$

mit der Temperatur T und dem chemischen Potential μ zusammen. Das großkanonische Potential Ω liefert wegen (3.4.21) den Druck zu

$$p = \frac{\Phi(\beta, \alpha, V)}{\beta V} \quad (4.5.4)$$

Nun wollen wir die Zustandssumme (4.5.2) für nichtwechselwirkende Teilchen konkret ausrechnen. Dazu benötigen wir nur eine geeignete vollständige Orthonormalbasis im Fockraum, um die Spur bilden zu können. Aufgrund der Gestalt (4.5.1) des statistischen Operators bieten sich dafür die symmetrisierten bzw. antisymmetrisierten Produktzustände aus Einteilchen-Impulseigenvektoren an. Im Unterschied zu der Betrachtung mit Orts-Eigenzuständen in Abschnitt 4.2 haben wir es dabei in unserem endlichen Volumen mit periodischen Randbedingungen mit diskreten Einteilchen-Basisvektoren zu tun, und wir ändern daher die Notation etwas ab. Wir können nämlich nun (im Falle von Bosonen) Produktzustände mit mehr als einem Teilchen im gleichen Einteilchenzustand definieren. Daher verwenden wir nun die simultane Basis zu bestimmten Teilchenzahlen $\tilde{\mathbf{N}}(\vec{p}, \sigma)$, die mit der entsprechenden Basis der (anti-)symmetrisierten Produktzustände übereinstimmt, aber etwas einfacher zu zählen ist³:

$$|\{\tilde{n}(\vec{p}, \sigma)\}\rangle = \prod_{\vec{p}, \sigma} \frac{1}{\sqrt{\tilde{n}(\vec{p}, \sigma)!}} [\mathbf{a}^\dagger(\vec{p}, \sigma)]^{\tilde{n}(\vec{p}, \sigma)} |\Omega\rangle. \quad (4.5.5)$$

Dabei denken wir uns im Falle von Fermionen irgendeine „Standardreihenfolge“ der Argumente \vec{p}, σ im Produkt der Erzeugungsoperatoren definiert, was das Vorzeichen der **Besetzungszustände** (4.5.5) festlegt. Für Bosonen ist die Reihenfolge ohnehin irrelevant, da die \mathbf{a}^\dagger in diesem Falle untereinander vertauschen. Es ist klar, daß diese Zustände simultane Eigenzustände der $\tilde{\mathbf{N}}(\vec{p}, \sigma)$ sind. Sie entsprechen demnach Zuständen mit wohldefinierter Besetzungszahl für die Einteilchenzustände zu wohldefiniertem Impuls- und Spin-z-Komponenten. Die möglichen Eigenwerte sind offenbar

$$\tilde{n}(\vec{p}, \sigma) \in \begin{cases} \mathbb{N}_0 = \{0, 1, 2, \dots\} & \text{für Bosonen,} \\ \{0, 1\} & \text{für Fermionen.} \end{cases} \quad (4.5.6)$$

Wegen (4.4.15) und (4.4.16) sind diese Zustände zugleich Energie- und Gesamtteilchenzahleigenzustände zu den Eigenwerten

$$E[\tilde{n}] = \sum_{\vec{p}, \sigma} E(\vec{p}) \tilde{n}(\vec{p}, \sigma), \quad N[\tilde{n}] = \sum_{\vec{p}, \sigma} \tilde{n}(\vec{p}, \sigma). \quad (4.5.7)$$

³Die $\tilde{\mathbf{N}}(\vec{p}, \sigma)$ sind selbstadjungierte untereinander vertauschbare Operatoren und repräsentieren somit zueinander kompatible Observable.

Jetzt können wir die Zustandssumme (4.5.2) problemlos berechnen. Wie wir gleich sehen werden, empfiehlt es sich aber, statt des konstanten Parameters α eine Funktion $\alpha(\vec{p}, \sigma)$ einzuführen. Dann ist

$$\begin{aligned} & \left\langle \tilde{n}(\vec{p}, \sigma) \left| \exp[-\beta \mathbf{H} - \sum_{\vec{p}, \sigma} \alpha(\vec{p}, \sigma) \tilde{\mathbf{N}}(\vec{p}, \sigma)] \right| \tilde{n}(\vec{p}, \sigma) \right\rangle \\ &= \exp \left[- \sum_{\vec{p}, \sigma} \tilde{n}(\vec{p}, \sigma) [\beta E(\vec{p}) + \alpha(\vec{p}, \sigma)] \right] \\ &= \prod_{\vec{p}, \sigma} \exp[-\tilde{n}(\vec{p}, \sigma) [\beta E(\vec{p}) + \alpha(\vec{p}, \sigma)]] . \end{aligned} \quad (4.5.8)$$

Für jedes (\vec{p}, σ) ist über den dazugehörigen Besetzungszahlenwert gemäß (4.5.6) zu summieren. Für Bosonen ist dies jeweils eine geometrische Reihe, für Fermionen eine endliche Summe:

$$\begin{aligned} Z = \text{Tr} \exp \left[-\beta \mathbf{H} - \sum_{\vec{p}, \sigma} \alpha(\vec{p}, \sigma) \tilde{\mathbf{N}}(\vec{p}, \sigma) \right] &= \prod_{\vec{p}, \sigma} \sum_{\tilde{n}(\vec{p}, \sigma)} \exp[-\tilde{n}(\vec{p}, \sigma) [\beta E(\vec{p}) + \alpha(\vec{p}, \sigma)]] \\ &= \begin{cases} \prod_{\vec{p}, \sigma} \frac{1}{1 - \exp[-\beta E(\vec{p}) - \alpha(\vec{p}, \sigma)]}, \\ \prod_{\vec{p}, \sigma} \{1 + \exp[-\beta E(\vec{p}) - \alpha(\vec{p}, \sigma)]\}. \end{cases} \end{aligned} \quad (4.5.9)$$

Dabei ist zu beachten, daß für Bosonen $\alpha > 0$ (d.h. $\mu < 0$) sein muß, damit die Summe über $n(\vec{p}, \sigma)$ konvergiert. Der vom Einteilchengrundzustand $\vec{p} = 0$ herrührende Beitrag divergiert (für $\alpha \rightarrow 0$). Wir werden unten sehen, daß diese Einschränkung wichtige physikalische Konsequenzen hat. Für das großkanonische Potential haben wir also

$$\Phi = \ln Z = \begin{cases} - \sum_{\vec{p}, \sigma} \ln \{1 - \exp[-\beta E(\vec{p}) - \alpha(\vec{p}, \sigma)]\}, \\ + \sum_{\vec{p}, \sigma} \ln \{1 + \exp[-\beta E(\vec{p}) - \alpha(\vec{p}, \sigma)]\}. \end{cases} \quad (4.5.10)$$

Als nächstes berechnen wir die **mittlere Besetzungszahl** des Einteilchenzustandes im großkanonischen Zustand (4.5.1). Es gilt

$$\begin{aligned} & \left\langle \tilde{n}(\vec{p}', \sigma') \left| \tilde{\mathbf{N}}(\vec{p}, \sigma) \exp \left[-\beta \mathbf{H} - \sum_{\vec{p}, \sigma} \alpha(\vec{p}, \sigma) \tilde{\mathbf{N}}(\vec{p}, \sigma) \right] \right| \tilde{n}(\vec{p}', \sigma') \right\rangle \\ &= \tilde{n}(\vec{p}, \sigma) \\ & \quad \times \prod_{\vec{p}', \sigma'} \exp[-\tilde{n}(\vec{p}', \sigma') [\beta E(\vec{p}') + \alpha(\vec{p}', \sigma')]] . \end{aligned} \quad (4.5.11)$$

Demnach erhalten wir die mittlere Besetzungszahl durch logarithmische Ableitung von (4.5.9) nach $\alpha(\vec{p}, \sigma)$:

$$\tilde{N}(\vec{p}, \sigma) = \langle \mathbf{N} \rangle_{T, \mu} = - \left[\frac{\partial}{\partial \alpha(\vec{p}, \sigma)} \ln Z \right]_{\alpha(\vec{p}, \sigma) = \alpha} = \begin{cases} \frac{1}{\exp[\beta E(\vec{p}) + \alpha] - 1} & \text{für Bosonen,} \\ \frac{1}{\exp[\beta E(\vec{p}) + \alpha] + 1} & \text{für Fermionen.} \end{cases} \quad (4.5.12)$$

Durch logarithmische Ableitung der Zustandssumme (4.5.9) nach β bzw. α ergibt sich die mittlere Energie und Gesamtteilchenzahl

$$U = \langle \mathbf{H} \rangle_{T,\mu} = (2s+1) \sum_{\vec{p}} \frac{E(\vec{p})}{\exp[\beta E(\vec{p}) + \alpha] \mp 1}, \quad (4.5.13)$$

$$N = \langle \mathbf{N} \rangle_{T,\mu} = (2s+1) \sum_{\vec{p}} \frac{1}{\exp[\beta E(\vec{p}) + \alpha] \mp 1}. \quad (4.5.14)$$

Im Limes $V \rightarrow \infty$ (d.h. $L \rightarrow \infty$), werden gemäß (4.4.5) die Abstände zwischen den Energieniveaus (bzw. den diskreten Impulsen) immer kleiner, und wir können die Summen durch Integrale ersetzen. Dazu stellen wir fest, daß wegen (4.4.5) in jeden kleinen Impulsbereich $d^3 p$ gerade $V d^3 p / (2\pi)^3$ Zustände fallen, d.h. wir müssen überall die Ersetzung

$$\sum_{\vec{p},\sigma} \rightarrow (2s+1)V \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \quad (4.5.15)$$

vornehmen. Dann wird die mittlere Besetzungszahl (4.5.12) zu einer **Impulsverteilungsdichte** für

$$n[E(\vec{p}); \beta, \alpha] = \frac{2s+1}{V} \tilde{N}(\vec{p}, \sigma) =: \begin{cases} n_B[E(\vec{p}); \beta, \alpha] \\ n_F[E(\vec{p}); \beta, \alpha] \end{cases} = \frac{1}{\exp[\beta E(\vec{p}) + \alpha] \mp 1}. \quad (4.5.16)$$

Dies ist die **Bose-Einstein-** bzw. **Fermi-Dirac-Verteilung**.

Bei **Bosonen** ist allerdings bei der Ersetzung (4.5.15) die bereits oben erwähnte Einschränkung $\alpha > 0$ (d.h. gemäß (4.5.3) $\mu < 0$) zu berücksichtigen. Haben wir eine **mittlere Gesamtteilchenzahl** (4.5.14) vorgegeben, können wir für endliches Volumen diese Teilchenzahl durch Wahl eines hinreichend kleinen α stets erreichen, denn es ist $E(\vec{p} = 0) = 0$, und folglich divergiert die Besetzungszahl (4.5.12) für Bosonen für den **Einteilchengrundzustand** für $\alpha \rightarrow 0$. Für sehr kleine Temperaturen erwarten wir also, daß im Falle eines Bosegases eine **makroskopische Anzahl** von Teilchen den Einteilchengrundzustand bei $\vec{p} = 0$ besetzen wird bis sich bei $T = 0$ alle Teilchen im Grundzustand befinden. Dies bezeichnet man als **Bose-Einstein-Kondensation**. Es ist dabei zu betonen, daß es sich um eine Kondensation im Impulsraum, nicht im Ortsraum handelt.

Im Limes $V \rightarrow \infty$ geht das Bose-Einstein-Kondensat bei einer sorglosen Anwendung der Ersetzungsregel (4.5.15) bei der Berechnung der **mittleren Teilchendichte** verloren, denn für $\alpha \rightarrow 0$ erhalten wir durch Übergang zu Kugelkoordinaten im Impulsraum

$$d\rho_B = (2s+1)n_B[E(\vec{p}); \beta, 0] \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} = \frac{4\pi P^2}{\exp[\beta E(\vec{p})] - 1} \frac{dP}{(2\pi)^3}. \quad (4.5.17)$$

Dabei haben wir $P = |\vec{p}|$ geschrieben, um Verwechslungen mit der Bezeichnung p für den Druck zu vermeiden. Wegen

$$\exp[\beta E(\vec{p})] \underset{\vec{p} \rightarrow 0}{\cong} 1 + \beta E(\vec{p}) = 1 + \beta \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (4.5.18)$$

liefert der Integrationsbereich für kleine P auch nur einen sehr kleinen Beitrag zur Gesamtdichte ρ_B . Übersteigt also die Gesamtdichte des Gases den kritischen Wert

$$\rho_{B,\text{krit}} = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{2s+1}{\exp[\beta E(\vec{p})] - 1}, \quad (4.5.19)$$

so muß entsprechend *vor dem Grenzübergang* $V \rightarrow \infty$ die Dichte der Teilchen im Kondensat

$$\rho_{B,\text{kond}} = \rho_B - \rho_{B,\text{krit}} \quad (4.5.20)$$

gesetzt werden. Dann ist mit $V \rightarrow \infty$ der Grenzübergang $\alpha \rightarrow 0$ gemäß (4.5.16) so zu führen, daß

$$\rho_{B,\text{kond}} = \frac{N_{B,\text{kond}}}{V} = \frac{2s+1}{V(\exp \alpha - 1)} = \text{const} \quad (4.5.21)$$

bleibt.

Für das Bosegas lautet also der korrekte Grenzübergang für $V \rightarrow \infty$

$$\rho_B = \frac{N_B}{V} = \begin{cases} (2s+1) \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} n_B[E(\vec{p}); \beta, \alpha] & \text{falls } \rho_B < \rho_{B,\text{krit}}, \\ \rho_{B,\text{kond}} + (2s+1) \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} n_B[E(\vec{p}); \beta, \alpha = 0] & \text{falls } \rho_B \geq \rho_{B,\text{krit}}. \end{cases} \quad (4.5.22)$$

Für das Fermigas treten diese Komplikationen nicht auf, denn wir können $\alpha \in \mathbb{R}$ (d.h. auch $\mu \in \mathbb{R}$) wählen und so jede beliebige Teilchenzahl für alle $T \geq 0$ erhalten, d.h. es gilt stets

$$\rho_F = (2s+1) \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} n_F[E(\vec{p}); \beta, \alpha]. \quad (4.5.23)$$

Zur mittleren Energie tragen im Fall des Bosegases die Kondensatteilchen freilich nichts bei, denn es ist $E(\vec{p} = 0) = 0$. Es gilt dann also für die Energie sowohl für Bose- als auch für Fermigase

$$U = (2s+1)V \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} E(\vec{p}) n_{B/F}[E(\vec{p}); \beta, \alpha]. \quad (4.5.24)$$

Schließlich berechnen wir noch die **Entropie** des Gases. Definitionsgemäß ist

$$S = -k_B \text{Tr}(\mathbf{R} \ln \mathbf{R}) = k_B \langle \beta \mathbf{H} + \alpha \mathbf{N} + \Phi \mathbb{1} \rangle_{T,\mu} = k_B (\Phi + \beta U + \alpha N). \quad (4.5.25)$$

Im Falle des Bosegases müssen wir wieder den Fall, daß ein Bose-Einstein-Kondensat vorliegt, besonders berücksichtigen. Gemäß (4.5.9) ist der Beitrag des Kondensats

$$\frac{\Phi_{\text{cond}}}{V} = -\frac{1}{V} \ln[1 - \exp(-\alpha)] = \frac{\alpha}{V} - \frac{1}{V} \ln[\exp(\alpha) - 1]. \quad (4.5.26)$$

Gemäß (4.5.22) ist der Grenzwert $V \rightarrow \infty$ so zu führen, daß $\exp \alpha - 1 \sim 1/V$ ist, und das bedeutet, daß (4.5.26) im Limes verschwindet. Wir können also das großkanonische Potential sowohl für Bose- als auch für Fermigase durch die naive Ersetzung (4.5.15) berechnen, d.h. es gilt

$$\Phi = \mp (2s+1)V \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \ln \left[1 \mp \exp \left(-\beta \frac{\vec{p}^2}{2m} - \alpha \right) \right]. \quad (4.5.27)$$

Diese Form ist allerdings für die folgenden Rechnungen etwas unbequem. Drücken wir aber das Integral in Kugelkoordinaten aus und integrieren einmal partiell, erhalten wir nach einigen Umformungen (*Übung!*)

$$\Phi = \frac{(2s+1)V\beta}{6\pi^2 m} \int_0^\infty dP P^4 n_{B/F}[E(\vec{p}), \beta, \alpha]. \quad (4.5.28)$$

Der Vergleich mit (4.5.24) ergibt die exakte Beziehung

$$\Phi = \frac{2}{3}\beta U \stackrel{(4.5.4)}{\Rightarrow} pV = \frac{2}{3}U. \quad (4.5.29)$$

Daraus folgt für die Entropie

$$S = k_B \left(\frac{5}{3}\beta U + \alpha N \right). \quad (4.5.30)$$

Wir können (4.5.28) noch etwas vereinfachen, indem wir $x = \beta E = \beta P^2/(2m)$ als Integrationsvariable einführen:

$$\begin{aligned} \Phi &= \frac{(2s+1)V}{6\pi^2} \left(\frac{2m}{\beta} \right)^{3/2} \int_0^\infty dx \frac{x^{3/2}}{\exp(x+\alpha) \mp 1} \\ &=: \pm \frac{(2s+1)\sqrt{\pi}V}{8\pi^2} \left(\frac{2m}{\beta} \right)^{3/2} (\pm 1) \text{Li}_{5/2}[\pm \exp(-\alpha)]. \end{aligned} \quad (4.5.31)$$

Dabei ist die **Polylogarithmusfunktion** für $|z| < 1$ und $j \geq 0$ durch die Reihe

$$\text{Li}_j(z) := \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^j} \quad (4.5.32)$$

definiert. Für $z = 1$ haben wir die **Riemannsche Zeta-Funktion**

$$\zeta(j) = \text{Li}_j(1) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^j} \quad (4.5.33)$$

vor uns. Die Reihendarstellungen (4.5.32) und (4.5.33) werden wir im nächsten Abschnitt aus (4.5.31) herleiten.

4.5.1 Der klassische Grenzfall

Ein Blick auf (4.5.9-4.5.11) lehrt, daß sich die **Quantennatur der Teilchen** für die thermodynamischen Größen nur hinsichtlich der Bose- oder Fermistatistik der Teilchen auswirkt. Wir können also erwarten, daß wir den klassischen Grenzfall für das Verhalten des Gases erhalten, wenn wir im Nenner der Bose- bzw. Fermiverteilung den Term ∓ 1 vernachlässigen können. Dies ist der Fall für $\alpha \gg 1$ (also $\beta\mu \ll -1$), d.h. gemäß (4.5.16) für kleine Dichten. Dann gehen in der Tat sowohl die Bose- als auch die Fermiverteilung in die **klassische Boltzmannverteilung**

$$n_{\text{Boltz}}(E(\vec{p}), \beta, \alpha) = (2s+1) \exp[-\alpha - \beta E(\vec{p})] \quad (4.5.34)$$

über. Dann können wir zunächst die innere Energie und mittlere Teilchenzahl berechnen, indem wir in (4.5.13) und (4.5.14) den Term ∓ 1 im Nenner vernachlässigen:

$$U = V \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{\vec{p}^2}{2m} n_{\text{Boltz}}(E(\vec{p}); \beta, \alpha) = (2s+1)V \left(\frac{m}{2\pi\beta} \right)^{3/2} \frac{3\gamma}{2\beta}, \quad (4.5.35)$$

$$N = V \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} n_{\text{Boltz}}[E(\vec{p}); \beta, \alpha] = (2s+1)V \left(\frac{m}{2\pi\beta} \right)^{3/2} \gamma \quad \text{mit} \quad \gamma = \exp(-\alpha). \quad (4.5.36)$$

Daraus folgt unmittelbar die **kalorische Zustandsgleichung**

$$U = \frac{3}{2} N k_B T. \quad (4.5.37)$$

Mit (4.5.28) ergibt sich folglich auch die **Gasgleichung**

$$pV = N k_B T. \quad (4.5.38)$$

Lösen wir (4.5.36) nach μ auf, folgt gemäß (4.5.30) die **Sackur-Tetrode-Formel** für die Entropie

$$\begin{aligned} S &= \frac{5}{2} k_B N - k_B N \ln \gamma = \frac{5}{2} N k_B - k_B N \ln \left[\left(\frac{2\pi\beta}{m} \right)^{3/2} \frac{N}{(2s+1)V} \right] \\ &= \frac{5}{2} k_B N + k_B N \ln \left[\frac{(2s+1)V}{N} \left(\frac{mU}{3\pi N} \right)^{3/2} \right]. \end{aligned} \quad (4.5.39)$$

Die Berechnung der Entropie im Rahmen der klassischen Statistischen Physik erweist sich als problematisch. Es tritt das **Gibbssche Paradoxon** auf, das sich darin äußert, daß die Entropie nicht extensive Terme enthält. Eine Größe heißt dabei **extensiv**, wenn sie sich durch eine Skalierung mit V bei festgehaltener Temperatur und chemischem Potential $\propto V$ verhält. Dies ist gemäß (4.5.36) und (4.5.37) offenbar der Fall für die innere Energie und die mittlere Teilchenzahl. Damit ist aber auch die Entropie aufgrund von (4.5.39) extensiv. Es zeigt sich, daß die entscheidende Eigenschaft der Quantentheorie, die zur Lösung dieses Paradoxons führt, die **Ununterscheidbarkeit der Teilchen** ist (eine ausführliche Diskussion des Gibbsschen Paradoxons findet sich z.B. in [Som78]).

Wir können nun die obigen Resultate mitsamt einer systematischen Entwicklung nach Potenzen der Fugazität $\gamma = \exp(-\alpha) = \exp(\mu\beta)$ auch erhalten, indem wir von (4.5.31) ausgehen.

Der klassische Grenzfall liegt nach unseren obigen Überlegungen vor, wenn $\alpha \gg 1$, also $\gamma \ll 1$ ist. Berechnen wir dazu das Integral

$$I_B(j, \gamma) = \int_0^\infty dx \frac{x^{j-1}}{\exp(x)/\gamma - 1}. \quad (4.5.40)$$

Erweitern wir den Integranden mit $\gamma \exp(-x)$, erhalten wir für $\gamma < 1$ unter Verwendung der Summenformel für die geometrische Reihe

$$\frac{1}{\exp(x)/\gamma - 1} = \frac{\gamma \exp(-x)}{1 - \gamma \exp(-x)} = \sum_{k=1}^{\infty} \gamma^k \exp(-kx). \quad (4.5.41)$$

Setzen wir dies in (4.5.40) ein, können wir Integration und Summation vertauschen und erhalten unter Verwendung der Eulerschen Definition der Γ -Funktion (s. [CH10]) und (4.5.32)

$$I_B(j, \gamma) = \Gamma(j) \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\gamma^k}{k^j} = \Gamma(j) \text{Li}_j(\gamma). \quad (4.5.42)$$

Die Reihe konvergiert offenbar für $j > 0$ im Konvergenzbereich $|\gamma| < 1$. Für $\gamma = 1$ (also $\alpha \rightarrow 0$) konvergiert sie, falls $j > 1$ ist. Den oben auf elementarere Weise behandelten klassischen Grenzfall erhalten wir daraus, indem wir in (4.5.42) nur den führenden Term $k = 1$ mitnehmen und

$$\Gamma\left(\frac{2n+1}{2}\right) = \frac{(2n)!}{2^{2n} n!} \sqrt{\pi} \quad \text{für } n \in \mathbb{N}_0 \quad (4.5.43)$$

berücksichtigen.

Es ist klar, daß wir für die entsprechenden Fermionischen Integrale

$$I_F(j, \gamma) = \int_0^\infty dx \frac{x^{j-1}}{\exp(x)/\gamma + 1} = - \int_0^\infty dx \frac{x^{j-1}}{-\exp(x)/\gamma - 1} = -I_B(j, -\gamma) = -\Gamma(j) \sum_{k=1}^\infty \frac{(-\gamma)^k}{k^j} \quad (4.5.44)$$

schreiben können.

4.5.2 Das entartete Fermi-Gas

Wir behandeln nun den Fall, daß die klassische Näherung als Boltzmann-Gas ungültig wird, also die Quantennatur der Teilchen, d.h. für Fermionen das **Pauli-Prinzip** wichtig werden. Dies ist stets dann der Fall, wenn $\exp(-\alpha) = \exp(\beta\mu)$ nicht mehr klein gegen 1 ist. Dies ist für niedrige Temperaturen, d.h. $\beta \rightarrow \infty$, und nicht zu kleine $\mu > 0$ der Fall. Demnach empfiehlt sich hier eine Entwicklung der thermodynamischen Größen nach Potenzen von $k_B T / \mu = 1/(\beta\mu)$. Es ist daher bequemer statt mit dem großkanonischen Parameter $\alpha = -\beta\mu$ mit dem chemischen Potential μ selbst zu rechnen.

Für $T = 0$ geht die Fermiverteilung in

$$n_{F0}(E; \mu) = \lim_{\beta \rightarrow \infty} n_F(E; \beta, \mu) = (2s + 1)\Theta(\mu - E) \quad (4.5.45)$$

über. Die Gasteilchen füllen also in diesem Fall alle Einteilchenenergiezustände zu Energien $E < \mu$ mit jeweils $(2s + 1)$ Teilchen auf. Im folgenden bezeichnen wir das chemische Potential bei $T = 0$ mit μ_0 . Es ist dabei wie bei endlichen Temperaturen durch die mittlere Gesamtteilchenzahl N bestimmt

$$N = \frac{(2s + 1)V}{(2\pi)^3} \int_{K(\sqrt{2m\mu_0})} d^3 p = \frac{(2s + 1)V}{2\pi^2} \frac{(2m\mu_0)^{3/2}}{3}. \quad (4.5.46)$$

Dabei haben wir verwendet, daß wegen der Dispersionsrelation $E(\vec{p}) = \vec{p}^2/(2m)$, aufgrund der Verteilung (4.5.45) der Integrationsbereich eine Kugel im Impulsraum vom Radius $\sqrt{2m\mu_0}$ ist. Der Fall $T = 0$ entspricht demnach dem **Grundzustand** eines Systems von N Fermionen: Aufgrund des **Pauli-Prinzips** haben in jedem Einteilchenniveau nur $(2s + 1)$ Teilchen (entsprechend der möglichen Spineinstellungen) Platz. Daraus folgt wieder unmittelbar die Verteilung (4.5.45).

Die mittlere Energie bei $T = 0$ ist

$$U_0 = \frac{(2s + 1)V}{(2\pi)^3} \int_{K(\sqrt{2m\mu_0})} d^3 p \frac{p^2}{2m} = \frac{(2s + 1)V}{20m\pi^2} (2m\mu_0)^{5/2} = \frac{3}{5} N \mu_0. \quad (4.5.47)$$

Das großkanonische Potentials ist gemäß (4.5.28)

$$\Phi_0 = \frac{2}{3} \beta U = \frac{2}{5} N \beta \mu_0, \quad (4.5.48)$$

und für die Entropie folgt aus (4.5.30)

$$S_0 = 0, \quad (4.5.49)$$

was wiederum zeigt, daß der Grundzustand des Gases ein reiner Zustand ist.

Zur Berechnung der Korrekturen bei endlichen Temperaturen bemerken wir, daß die thermodynamischen Größen durch Integrale der Form

$$F[f] = \frac{(2s + 1)V}{2\pi^2} \int_0^\infty dP P^2 f(P) n_F[E(\vec{p}); \beta, \mu] \quad (4.5.50)$$

gegeben sind. Substituieren wir $x = \beta[P^2/(2m) - \mu]$, geht dies in die Form

$$F[f] = \frac{(2s+1)V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\beta}\right)^{3/2} \int_{-\beta\mu}^{\infty} dx \sqrt{x + \beta\mu} f\left(\sqrt{\frac{2m(x + \beta\mu)}{\beta}}\right) \frac{1}{1 + \exp x} \quad (4.5.51)$$

über. Durch partielle Integration wird daraus

$$F[f] = \frac{(2s+1)V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\beta}\right)^{3/2} \int_{-\beta\mu}^{\infty} dx \frac{\exp x}{(1 + \exp x)^2} \times \int_{-\beta\mu}^x dx' \left[\sqrt{x' + \beta\mu} f\left(\sqrt{\frac{2m(x' + \beta\mu)}{\beta}}\right) \right]. \quad (4.5.52)$$

Beginnen wir mit der Berechnung der mittleren Teilchenzahl. Gemäß (4.5.14) und der Ersetzungsregel (4.5.15) finden wir durch Einsetzen in (4.5.52)

$$N = \frac{(2s+1)V}{6\pi^2} \left(\frac{2m}{\beta}\right)^{3/2} \int_{-\beta\mu}^{\infty} dx \frac{\exp x}{(1 + \exp x)^2} (x + \mu\beta)^{3/2}. \quad (4.5.53)$$

Der erste Faktor im Integranden ist eine gerade Funktion von x , die für $|x| \rightarrow \infty$ exponentiell gedämpft ist, während der zweite Faktor für große $\beta\mu$ langsam veränderlich ist. Wir können also den zweiten Faktor nach Potenzen von $1/(\beta\mu)$ entwickeln,

$$(x + \beta\mu)^{3/2} = (\beta\mu)^{3/2} \left(1 + \frac{3}{2} \frac{x}{\beta\mu} + \frac{3}{8} \frac{x^2}{\mu^2\beta^2} + \dots\right), \quad (4.5.54)$$

und für das dann entstehende Integral die untere Integrationsgrenze $\beta\mu \rightarrow -\infty$ setzen.

Die Anwendung der Formeln

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\exp x}{(1 + \exp x)^2} = - \frac{1}{1 + \exp x} \Big|_{-\infty}^{\infty} = 1, \quad (4.5.55)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 \frac{\exp x}{(1 + \exp x)^2} = \frac{\pi^2}{3} \quad (4.5.56)$$

in (4.5.53) eingesetzt ergibt schließlich⁴

$$N = \frac{(2s+1)V}{6\pi^2} (2m\mu)^{3/2} \left[1 + \frac{1}{8} \left(\frac{\pi k_B}{\mu}\right)^2 T^2 + \mathcal{O}[(\beta\mu)^{-4}]\right]. \quad (4.5.57)$$

Zur Berechnung der inneren Energie setzen wir in (4.5.52) $f(P) = P^2/(2m) = (x + \beta\mu)/\beta$, erhalten wir das Integral

$$U = \frac{(2s+1)V}{10\pi^2\beta} \left(\frac{2m}{\beta}\right)^{3/2} \int_{-\beta\mu}^{\infty} dx (x + \beta\mu)^{5/2} \frac{\exp x}{(1 + \exp x)^2}. \quad (4.5.58)$$

Das Integral berechnen wir wieder näherungsweise, indem wir die Reihenentwicklung

$$(x + \beta\mu)^{5/2} = (\beta\mu)^{5/2} \left[1 + \frac{5}{2} \frac{x}{\beta\mu} + \frac{15}{8} \frac{x^2}{(\beta\mu)^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{(\beta\mu)^3}\right)\right] \quad (4.5.59)$$

⁴Gl. (4.5.56) wird im Anhang B bewiesen.

einsetzen und die untere Integrationsgrenze nach $-\infty$ ausdehnen. Verwenden wir wieder (4.5.56), erhalten wir

$$U = F \left[\frac{p^2}{2m} \right] = \frac{(2s+1)V}{20m\pi^2} (2m\mu)^{5/2} \left[1 + \frac{5}{8} \left(\frac{\pi k_B}{\mu} \right)^2 T^2 + \mathcal{O}[(\beta\mu)^{-4}] \right]. \quad (4.5.60)$$

Ein wichtiges Resultat für das freie Elektronengasmodell für Metalle ist die spezifische Wärme. Zuzufolge (3.3.6) müssen wir dazu U bei festgehaltenem N und V nach der Temperatur ableiten. Dazu benötigen wir zunächst die entsprechende Ableitung von μ nach T . Aus $N, V = \text{const}$ folgt mit der Kettenregel durch Ableitung von (4.5.57) nach T

$$0 = \frac{3}{2} \sqrt{\mu} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{V,N} + \frac{\pi^2 k_B^2}{4\sqrt{\mu}} T + \mathcal{O}(T^2) \Rightarrow \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{V,N} = -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{6\mu} + \mathcal{O}(T^2). \quad (4.5.61)$$

Wieder mit der Kettenregel erhalten wir für die spezifische Wärme

$$c_{V,N} = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{V,N} = \frac{(2s+1)}{12\pi^2} (2m\mu)^{3/2} \pi^2 \frac{k_B^2 T}{\mu N} + \mathcal{O}(T^2) = \frac{\pi^2 k_B^2 T}{2\mu} + \mathcal{O}(T^2). \quad (4.5.62)$$

Dies ist eine direkte Konsequenz des Quantencharakters der Elektronen, die sich in diesem Falle bei niedrigen Temperaturen dadurch bemerkbar macht, daß die Elektronen zur spezifischen Wärme des Metalls bei niedrigen Temperaturen kaum beitragen.

Wir müssen noch die Güte der obigen Näherung abschätzen. Ableiten von (4.5.31) nach α ergibt für den Fall von Fermionen

$$N = \frac{(2s+1)V}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\beta} \right)^{3/2} \int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}}{1 + \exp(x + \alpha)}, \quad (4.5.63)$$

so daß die Größe

$$Q = \frac{4\pi^2 N}{(2s+1)V} \left(\frac{\beta}{2m} \right)^{3/2} = \int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}}{1 + \exp(x + \alpha)} \quad (4.5.64)$$

ein Maß für das Quantenverhalten des Gases darstellt, denn der klassische Limes ergibt sich für $\alpha \rightarrow \infty$, und dann ist Q klein, während es im Quantenlimes $\alpha \rightarrow -\infty$ groß wird. Für den Fall der Leitungselektronen in Metallen, die sich in erster Näherung als ideales Fermigas behandeln lassen, ergibt sich die Temperatur, wo das Verhalten des Gases klassisch wird (also bei $Q \approx 1$) zu $\Theta \approx 10^5 \text{ K} \approx 8.6 \text{ eV}$. Demnach ist das **Elektronengas**, welches eine grobe Näherung für das Verhalten der **Leitungselektronen in Metallen** darstellt, bei Raumtemperaturen ($T_{\text{Raum}} \simeq 293 \text{ K}$) entartet. Dies erklärt, warum die Leitungselektronen zur spezifischen Wärme von Metallen bei Raumtemperatur kaum beitragen. Die Erklärung dieses Effekts geht auf Sommerfeld zurück: Drude hatte nämlich aus der Idee, daß die Leitungselektronen in Metallen näherungsweise als ideales Boltzmann-Gas behandelt werden können, eine recht gute Erklärung für die Temperaturabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit und der Wärmeleitfähigkeit (Wiedemann-Franz'sches Gesetz) von Metallen gefunden. Allerdings ergab sein Modell einen viel zu hohen Beitrag seines klassischen Elektronengases zur spezifischen Wärme. Wie Sommerfeld dann gezeigt hat, ist dies auf die Gasentartung bei Raumtemperatur zurückzuführen.

4.5.3 Das entartete Bose-Gas

Wir betrachten nun das entartete Bose-Gas genauer. Wir diskutieren wieder die Eigenschaften des Gases bei fester mittlerer Teilchenzahl. Aus (3.2.9) folgt mit (4.5.31) durch gliedweises Differenzieren der

Reihe (4.5.32)

$$N(\beta, \alpha, V) = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \Phi(\beta, \alpha, V) = \frac{(2s+1)\sqrt{\pi}V}{8\pi^2} \left(\frac{2m}{\beta}\right)^{3/2} \text{Li}_{3/2}[\exp(-\alpha)]. \quad (4.5.65)$$

Wie wir oben diskutiert haben, gilt diese Formel allerdings nur für Temperaturen oberhalb des Wertes, bei dem **Bose-Einstein-Kondensation** eintritt. Für das Bosegas muß ja $\alpha \geq 0$ sein, und $\text{Li}_{3/2}(\gamma)$ ist eine monoton wachsende Funktion, nimmt also ihr Maximum für $\gamma = 1$ an. Es ist daher bequem als **kritische Temperatur** $T_c = 1/(k_B\beta_c)$ diejenige Temperatur zu definieren, für die

$$N = V\rho_{B,\text{krit}} = \frac{(2s+1)\sqrt{\pi}V}{8\pi^2} \left(\frac{2m}{\beta_c}\right)^{3/2} \underbrace{\text{Li}_{3/2}(1)}_{\zeta(3/2)} \quad (4.5.66)$$

wird. Für noch tiefere Temperaturen (also $\beta > \beta_c$) muß sich dann eine **makroskopisch relevante Anzahl** von Teilchen im Grundzustand bei $\vec{p} = 0$ aufhalten. Diese Zahl ist demnach

$$N_{\text{BEC}} = \begin{cases} N \left[1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}\right] & \text{für } T < T_c, \\ 0 & \text{für } T > T_c. \end{cases} \quad (4.5.67)$$

Entsprechend ist für $T < T_c$ die Teilchenzahl in angeregten Zuständen

$$N^* = N \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} = \frac{(2s+1)\sqrt{\pi}V}{8\pi^3} \left(\frac{2m}{\beta}\right)^{3/2} \zeta(3/2). \quad (4.5.68)$$

Die innere Energie und damit durch (4.5.29) gegeben, und der Druck ergibt sich dann durch Differentiation von (4.5.31) zu

$$U = \frac{3}{2}pV = -\frac{\partial}{\partial \beta} \Phi(\beta, \alpha, V) = \begin{cases} \frac{3\zeta(5/2)}{2\zeta(3/2)} N^* k_B T = \frac{3\zeta(5/2)}{2\zeta(3/2)T_c^{3/2}} N k_B T^{5/2} & \text{für } T < T_c, \\ \frac{3\text{Li}_{5/2}[\exp(-\alpha)]}{2\text{Li}_{3/2}[\exp(-\alpha)]} N k_B T & \text{für } T \geq T_c. \end{cases} \quad (4.5.69)$$

Der klassische Limes ergibt sich daraus für $\alpha \rightarrow \infty$ also $\mu\beta \rightarrow -\infty$. Die Reihenentwicklung (4.5.32) liefert in der Tat wieder (4.5.37), wie es sein muß.

Die Entropie finden wir dann aus (4.5.30). Für $T < T_c$ ergibt sich

$$S = \frac{5\zeta(5/2)}{2\zeta(3/2)} k_B N \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} \quad \text{für } T < T_c, \quad (4.5.70)$$

und für die spezifische Wärme gemäß (3.3.6)

$$c_V = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{V,N} = \frac{15\zeta(5/2)}{4\zeta(3/2)} k_B \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} \quad \text{für } T < T_c. \quad (4.5.71)$$

Für $T \rightarrow 0$ verschwinden also sowohl die Entropie als auch die spezifische Wärme. Wie wir gesehen haben, liegt das beim Bosegas daran, daß nur der Anteil der Teilchen außerhalb des Bose-Einstein-Kondensats, also diejenigen Teilchen, die „angeregte Zustände“ besetzen, zur inneren Energie, beitragen.

Aus dieser Betrachtung der idealen Gase ergeben sich einige wichtige allgemeine Folgerungen für die Behandlung von Vielteilchensystemen bei niedrigen Temperaturen bzw. im Grenzfall $T = 0$: Die wesentlichen kollektiven Eigenschaften des Vielteilchensystems (wie z.B. die spezifische Wärme) werden durch die dann dünn besetzten **angeregten Einteilchenzustände** bestimmt. Wir können also vermuten, daß wir auch bei wechselwirkenden Systemen mit **effektiven Theorien für nichtwechselwirkende Elementaranregungen** eine gute näherungsweise Beschreibung des Systems erreichen können. Formal verhalten sich diese Elementaranregungen wieder wie freie (oder allenfalls schwach wechselwirkende) Teilchen, die man daher auch als **Quasiteilchen** bezeichnet. Diese Quasiteilchen können durch die Wechselwirkung allerdings evtl. von den eigentlichen Teilchen drastisch verschiedene Eigenschaften besitzen. Die Eigenschaften von **Supraleitern** ergeben sich z.B. daraus, daß eine effektive Anziehung zwischen den Valenzelektronen im Metall besteht. Diese kommt durch die Wechselwirkung mit aus ihrer Gleichgewichtslage gebrachten Metallgitterionen zustande, die aufgrund der Wärmebewegung bei endlichen Temperaturen **kollektive Schwingungen** um diese Gleichgewichtslage ausführen. Diese Gitterschwingungen selbst entsprechen näherungsweise quantenmechanisch harmonischen Oszillatoren, die wiederum im **Quasiteilchenbild** beschrieben werden können. Diese Quasiteilchen heißen **Phononen**, da die Gitterschwingungen Schallwellen im Metall entsprechen. Bei niedrigen Energien vermitteln die Phononen die oben erwähnte anziehende effektive Wechselwirkung zwischen den Valenzelektronen, und dies führt zu einer Instabilität des fermionischen Systems nahe der Fermikante: Die Elektronen nahe der Fermikante neigen dazu, Paare mit entgegengesetztem Impuls und Spin zu bilden, die **Cooper-Paare**. Als gerade Anzahl von Fermionen verhalten sich diese Cooper-Paare wie Bosonen, können also wieder als bosonische (!) Quasiteilchen interpretiert werden. Dieser nach ihren Entdeckern dieses Mechanismus Bardeen, Cooper und Shrieffer als **BCS-Zustand** bezeichnete Zustand des Elektronengases ist nun durch eine **Energielücke** von den niedrigsten Anregungen getrennt. Dies bedeutet, daß kleine Störungen, wie ein nicht zu großes elektrisches Feld, keine Quasiteilchen anregen kann. Das bedeutet aber, daß die Cooperpaare aufgrund des schwachen elektrischen Feldes sich verlustfrei bewegen können. Makroskopisch gesehen ergibt sich also ein **widerstandsfreier Stromfluß**, d.h. der elektrische Widerstand eines Elektronengases im BCS-Zustand verschwindet. Ähnlich induzieren (nicht zu starke) Magnetfelder Ströme, die aufgrund der fehlenden Dissipation ohne weitere äußere Einwirkungen erhalten bleiben. Nach der Lenzschen Regel sind diese Ströme der sie bewirkenden Änderung des Zustandes (also des von außen angelegten Magnetfeldes) entgegengerichtet. Das führt dazu, daß sich im Inneren des Supraleiters kein Magnetfeld befindet. Er ist daher ein idealer **Diamagnet (Meißner-Ochsenfeld-Effekt)**.

Werden die äußeren Störungen (z.B. elektromagnetische Felder oder höhere Temperaturen) größer, kann die Energielücke zwischen dem BCS-Grundzustand überwunden werden. Auch ab einer bestimmten Temperatur lösen sich die Cooper-Paare auf, und das System verhält sich wieder wie ein gewöhnliches Fermionengas. Dies ist ein typisches Beispiel für einen **Phasenübergang**, wie schon das oben besprochene Phänomen der Bose-Einstein-Kondensation in Bosegasen. Auch hier tritt bei einer bestimmten kritischen Temperatur eine Phasenänderung auf. Dies ist mit einem **Ordnungsparameter** verbunden. In dem Fall kann als Ordnungsparameter das chemische Potential dienen. Es ist 0, wenn ein Bose-Einstein-Kondensat vorliegt und wird < 0 , wenn keine Kondensation eintritt.

Kapitel 5

Vielteilchensysteme wechselwirkender Teilchen

In diesem Kapitel wenden wir uns den Vielteilchensystemen wechselwirkender nichtrelativistischer Teilchen zu. In dieser Vorlesung können wir freilich nur die wichtigsten Anfangsgründe dieser sehr vielseitigen Theorie behandeln.

Wir beginnen mit einer Herleitung der perturbativen Streutheorie für elastische Stöße zweier Teilchen im Rahmen des im vorigen Kapitels entwickelten quantenfeldtheoretischen Formalismus. Dies ermöglicht unter anderem die Einführung wichtiger technischer Hilfsmittel wie der **Feynman-Diagrammtechnik**.

Wir betrachten dann die eigentlichen Vielteilchensysteme und die **Methode des selbstkonsistenten Feldes (Hartree-Fock-Näherung)**. Diese Näherung beruht auf der Idee, anstatt der komplizierten Vielteilchenwechselwirkungen die Bewegung eines herausgegriffenen Teilchens in einem mittleren Feld, das durch alle anderen Teilchen erzeugt wird, zu betrachten und selbstkonsistent mit den Einteilchenwellenfunktionen im entsprechenden symmetrisierten bzw. antisymmetrisierten Produktzustand zu bestimmen. Hier werden wir als einfachste Anwendung das **Jellium-Modell** für die Leitungselektronen in Metallen betrachten.

Wir beschließen das Kapitel mit einem kurzen Ausblick auf die **BCS-Theorie** der Supraleitung, benannt nach ihren Entdeckern Bardeen, Cooper und Shrieffer.

5.1 Zweiteilchen-Streuung

Als Einführung in wichtige quantenfeldtheoretische Rechentechniken, insbesondere in die von Feynman entwickelte **Diagrammtechnik** betrachten wir elastische Stöße zweier identischer Teilchen, die aufgrund eines Wechselwirkungspotentials aneinander stoßen. Um einen konkreten Fall vor Augen zu haben, betrachten wir insbesondere Elektronen und sehen einfachheitshalber von den Spin-Bahn- und Spin-Spin-Wechselwirkungen ab, was im hier betrachteten Fall der nichtrelativistischen Behandlung gerechtfertigt ist.

Die Theorie der Streuung von nichtrelativistischen Teilchen wird in fast allen Lehrbüchern der Quantentheorie als stationärer Vorgang im Formalismus der „ersten Quantisierung“ behandelt. Dabei gehen allerdings wichtige Aspekte zum Verständnis des Streuvorgangs verloren, handelt es sich doch seiner Natur nach um einen zeitabhängigen Vorgang, wo zu Beginn ein Teilchenstrahl mit relativ gut bestimmtem Impuls auf ein wohlpräpariertes Target geschossen wird. Sodann werden mit Detektoren die Reaktionsprodukte weit weg vom Wechselwirkungsbereich beobachtet. Wir folgen hier der Darstellung in [Tay72, PS95]. Die Verwendung des quantenfeldtheoretischen Formalismus selbst ist im

hier betrachteten nichtrelativistischen Fall freilich äquivalent zur Rechnung im Rahmen der „ersten Quantisierung“. Die Fock-Raumtechnik ist allenfalls ein wenig bequemer, weil der Symmetrie bzw. Antisymmetrie für Bosonen bzw. Fermionen durch die kanonischen Kommutator- bzw. Antikommutatorregeln für die Feldoperatoren automatisch berücksichtigt wird.

5.1.1 Quantenfeldtheorie im Wechselwirkungsbild

Im folgenden rechnen wir im **Wechselwirkungsbild**, das für die störungstheoretische Formulierung der Streutheorie besonders geeignet ist. Der **Hamiltonoperator für freie Elektronen** lautet (für verschwindende äußere Kraftfelder) gemäß (4.3.22)

$$\mathbf{H}_0 = \int d\xi \psi^\dagger(t, \xi) \left(-\frac{\Delta}{2m} \right) \psi(t, \xi), \quad (5.1.1)$$

und die **Zweiteilchenwechselwirkung** wird durch den **Wechselwirkungsoperator**

$$\mathbf{H}_W(t) = \frac{1}{2} \int d\xi_1 \int d\xi_2 V(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|) \psi^\dagger(t, \xi_1) \psi^\dagger(t, \xi_2) \psi(t, \xi_2) \psi(t, \xi_1) \quad (5.1.2)$$

beschrieben. Dabei ist $V(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|)$ das **Wechselwirkungspotential** für die Kraft zwischen zwei Teilchen. Wir betrachten im folgenden im wesentlichen das **Yukawa-Potential**

$$V(r) = \frac{q^2 \exp(-\Lambda r)}{4\pi r}, \quad (5.1.3)$$

das im Grenzfall $\Lambda \rightarrow 0$ in das **Coulomb-Potential**

$$V(r) = \frac{q^2}{4\pi r} \quad (5.1.4)$$

zweier Punktladungen q übergeht.

Der totale Hamiltonoperator ist demnach

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_W. \quad (5.1.5)$$

Die vollen Bewegungsgleichungen im **Heisenberg-Bild** führen auf nichtlineare partielle Differentialgleichung für die Feldoperatoren, die wir i.a. nicht geschlossen lösen können. Wir arbeiten daher im **Wechselwirkungsbild** (s. Abschnitt 1.13), wobei sich die Operatoren (insbesondere die Feldoperatoren) gemäß dem freien Hamiltonoperator (5.1.1) und demnach die Zustände mit dem Wechselwirkungsanteil (5.1.2) zeitlich entwickeln, d.h. es gilt gemäß (1.13.2) und (1.13.3)

$$\partial_t \psi(t, \xi) = \frac{1}{i} [\psi(t, \xi), \mathbf{H}_0], \quad (5.1.6)$$

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = -i\mathbf{H}_W |\psi(t)\rangle. \quad (5.1.7)$$

Die Bewegungsgleichungen (5.1.6) führen wieder auf dieselben Gleichungen und Lösungen für die Bewegungsgleichungen der Feldoperatoren für freie Teilchen, wie wir sie ausführlich in Abschnitt 4.4. behandelt haben. Hier schreiben wir die Lösungen gleich für den ganzen Raum auf, d.h. wir führen kein „Quantisierungsvolumen“ ein. Es gilt also

$$\psi(t, \vec{x}) = \sum_{\sigma} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{p} \mathbf{a}(\vec{p}, \sigma) u_{\sigma}(t, \vec{x}) \quad (5.1.8)$$

mit

$$u_\sigma(t, \vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp[-i(tE(\vec{p}) - \vec{x} \cdot \vec{p})] \chi_\sigma \quad \text{mit} \quad \chi_{+1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.1.9)$$

Dabei gelten die Energie-Impulsbeziehung freier Teilchen

$$E(\vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (5.1.10)$$

und die Antikommutatorregeln für die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren bzgl. der Impuls-Spin-Eigenbasis

$$\{\mathbf{a}(\vec{p}, \sigma), \mathbf{a}(\vec{p}', \sigma')\} = \{\mathbf{a}^\dagger(\vec{p}, \sigma), \mathbf{a}^\dagger(\vec{p}', \sigma')\} = 0, \quad \{\mathbf{a}(\vec{p}, \sigma), \mathbf{a}^\dagger(\vec{p}', \sigma')\} = \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{p}') \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (5.1.11)$$

Für unser Streuproblem ist ohnehin die Impuls-Spin-Eigenbasis die bequemere Wahl, denn wir betrachten ja zwei Teilchen, die anfangs mit einem wohldefinierten Impuls aufeinander zufliegen und fragen nach der Wahrscheinlichkeit, daß sie nach dem Stoß mit bestimmten Impulsen weiterfliegen.

Im folgenden ist es allerdings bequemer, zunächst in der Ortsdarstellung weiter zu arbeiten und Raum- und Zeitkoordinaten symmetrisch zu behandeln und mit $x = (x^0, \vec{x})$ Vierervektoren einzuführen, wie es auch später in der Relativitätstheorie nützlich ist. Zu dem Zweck definieren wir als vierdimensionales Potential

$$U(x_1 - x_2) = V(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|) \delta(t_1 - t_2). \quad (5.1.12)$$

Dann läßt sich der Wechselwirkungs-Hamilton-Operator (5.1.2) in der Form

$$\mathbf{H}_W(t) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \int_{\mathbb{R}^4} d^4 x_1 \int_{\mathbb{R}^4} d^4 x_2 \delta[t - (x_1^0)] U(x_1 - x_2) \psi^\dagger(x_1, \sigma_1) \psi^\dagger(x_2, \sigma_2) \psi(x_2, \sigma_2) \psi(x_1, \sigma_1) \quad (5.1.13)$$

schreiben. Dabei haben wir

$$\psi(x, \sigma) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} \mathbf{a}(\vec{k}, \sigma) \exp(-ik \cdot \vec{x}) \Big|_{k^0 = E(\vec{k})} \quad (5.1.14)$$

geschrieben, wobei wir uns der relativistischen Schreibweise für das Viererprodukt gemäß

$$k \cdot x = k^0 x^0 - \vec{k} \cdot \vec{x} \quad (5.1.15)$$

bedienen.

Außerdem ist es nützlich, die Fourier-Darstellung des Potentials (5.1.12) einzuführen:

$$U(x_1 - x_2) = \int_{\mathbb{R}^4} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \tilde{U}(k) \exp[-ik \cdot (x_1 - x_2)] = \tilde{V}(\vec{k}). \quad (5.1.16)$$

Dabei ist \tilde{V} das Fourier-transformierte Wechselwirkungspotential

$$\tilde{V}(\vec{p}) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} \exp(-i\vec{p} \cdot \vec{x}) V(|\vec{x}|). \quad (5.1.17)$$

Wegen der Rotationssymmetrie von V ist auch \tilde{V} rotationssymmetrisch und folglich eine Funktion von $|\vec{p}|$. Für das Yukawa-Potential (5.1.3) erhält man durch eine einfache Rechnung in Kugelkoordinaten (*Übung!*) und Verwendung des Residuensatzes für das Radialintegral

$$\tilde{V}(\vec{p}) = \frac{q^2}{\vec{p}^2 + \Lambda^2}. \quad (5.1.18)$$

Im Grenzfall des Coulombintegrals, d.h. $\Lambda \rightarrow 0$, wird \tilde{V} bei $\vec{p} \rightarrow 0$ singulär. Dies entspricht der Langreichweitigkeit des Coulomb-Potentials im Ortsraum und erfordert eigentlich eine Sonderbehandlung dieses Falles (s. z.B. [Mes99]). Wir behandeln daher im folgenden das Yukawa-Potential und betrachten das Coulomb-Potential immer als Grenzfall des Yukawa-Potentials.

Wir müssen nun aber zunächst das Streuproblem präziser formulieren, bevor wir zur störungstheoretischen Berechnung beobachtbarer Größen übergehen können.

5.1.2 Der Wirkungsquerschnitt

Der typische Aufbau eines Streuexperimentes besteht gewöhnlich darin, daß zwei Teilchen weit voneinander entfernt auf recht gut festgelegte Impulse \vec{p}_1 und \vec{p}_2 beschleunigt werden¹, dann aufgrund ihrer gegenseitigen Wechselwirkung aneinander streuen und schließlich die Reaktionsprodukte weit entfernt vom Reaktionspunkt detektiert werden. Ein solcher Streuprozess heißt **elastisch**, wenn im Endzustand genau dieselben beiden Teilchen, freilich mit veränderten Impulsen (und evtl. veränderten Spins) auftreten. Wir beschränken uns in diesem Kapitel auf solche elastischen Streuprozesse. Weiter unterscheidet man „Fixed-Target-Experimente“, wo ein Teilchen zu Beginn ruht (d.h. es gilt $\vec{p}_2 = 0$) und „Collider-Experimente“, wo die beiden Teilchen so aufeinander geschossen werden, daß der Schwerpunkt des Gesamtsystems ruht, d.h. es gilt dann $\vec{p}_1 = -\vec{p}_2$.

Die entscheidende physikalische Größe zur Quantifizierung von Streuprozessen ist der **Wirkungs- oder Streuquerschnitt**. Er soll als ein Maß für die Wahrscheinlichkeit dienen, daß die Kollision zweier Teilchen, die mit recht gut definierten Anfangsimpulsen \vec{p}_1 und \vec{p}_2 (und evtl. Spineinstellungen, falls man polarisierte Projektile und/oder Targets betrachtet) aufeinandergeschossen werden, nach einer Reaktion, wenn sich alle (evtl. bei der Reaktion neu entstandenen Teilchen) weit voneinander entfernt haben, nach dem Stoß ein bestimmter Endzustand vorliegt.

Konkret betrachten wir hier die **elastische Streuung** zweier Elektronen, die mittels eines Yukawa-Potentials der Form (5.1.3) wechselwirken². Bei hinreichend großem Abstand der Elektronen voneinander können wir annehmen, daß sich die Elektronen zunächst wie freie Teilchen bewegen. Wir müssen also die entsprechenden **Wellenpakete**, die wir zu der quantenmechanischen Beschreibung dieser **asymptotisch freien Teilchen** verwenden, so konstruieren, daß sie zu Zeiten $t \simeq 0$, überlappen, d.h. daß bei $t \simeq 0$ der Stoß stattfindet. Zu Zeiten $t \rightarrow -\infty$ sollen hingegen die Wellenpakete an sehr entfernten Stellen im Ortsraum peaken und Teilchen beschreiben, die relativ scharfe Anfangsimpulse besitzen.

Betrachten wir der Einfachheit halber zunächst ein Fixed-Target-Experiment, d.h. wir nehmen an, daß eines der Teilchen mit einem recht gut bestimmten Impuls $\vec{p}_1 = p_1 \vec{e}_z$ auf ein Teilchen, das bei $\vec{x} = 0$

¹Im allgemeinen werden die Teilchen nicht in bestimmten Spinzuständen präpariert. Man spricht dann von „unpolarisierten“ Teilchen. Es gibt freilich auch Experimente mit polarisierten Teilchen, z.B. werden am Relativistic Heavy Ion Collider (RHIC) am Brookhaven National Lab in New York (teilweise) polarisierte Protonen aufeinander geschossen, um mehr über die Struktur der Protonen zu lernen.

²Wir werden gleich sehen, warum wir zunächst ein Yukawa-Potential betrachten müssen, auch wenn wir eigentlich die Streuung aufgrund der elektrischen Coulombabstoßung betrachten wollen.

ruht ($\vec{p}_2 = 0$) geschossen wird. Für den Zustand $|\psi(t)\rangle$ gilt also

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} |\psi(t)\rangle = \left| \phi_{\vec{p}_1, \sigma_1}(\vec{b}), \phi_{\vec{p}_2=0, \sigma_2}(\vec{x}=0) \right\rangle = |\psi_{\text{in}}\rangle. \quad (5.1.19)$$

Der antisymmetrisierte Produktzustand beschreibt dabei genau diese Situation zweier voneinander unabhängiger präparierter ununterscheidbarer Teilchen.

Da man die stoßenden Teilchen nur ungenau im Ort lokalisieren kann, haben wir berücksichtigt, daß sie in transversaler Richtung mit einer gewissen Abweichung von der z -Achse $\vec{b} = b_1 \vec{e}_x + b_2 \vec{e}_y$ losfliegen. Der entsprechende Einteilchenzustand ist demnach durch

$$\left| \phi_{\vec{p}_1, \sigma_1}(\vec{b}) \right\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{p} \exp(-i \vec{p} \cdot \vec{b}) \phi_{\vec{p}_1}(\vec{p}) \left| \vec{p}, \sigma_1 \right\rangle \quad (5.1.20)$$

gegeben, wobei $\phi_{\vec{p}_1}(\vec{p})$ eine irgendwie um $\vec{p} = \vec{p}_1 = p_1 \vec{e}_z$ stark gepeakte Funktion sein soll. Wir können uns z.B. eine **Gaußfunktion** vorstellen. Damit diese Zustände auf 1 normiert sind, muß

$$\left\langle \phi_{\vec{p}_1, \sigma_1}(\vec{x}) \left| \phi_{\vec{p}_1, \sigma_1}(\vec{x}) \right\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{p} \left| \phi_{\vec{p}_1}(\vec{p}) \right|^2 = 1 \quad (5.1.21)$$

gelten. Die physikalische Bedeutung dieses Zustandes wird klarer, wenn wir die entsprechende Ortswellenfunktion betrachten. Nehmen wir zunächst an, es sei gar kein zweites Teilchen vorhanden. Dann bewegt sich das eine Teilchen frei. Im hier betrachteten Wechselwirkungsbild ist dann dieser Zustand zeitunabhängig, und der Orts-Spin-Eigenvektor bewegt sich mit dem freien Hamiltonoperator gemäß

$$\left| \vec{x}', \sigma'; t \right\rangle = \exp(i \mathbf{H}_0 t) \left| \vec{x}', \sigma'; t = 0 \right\rangle; \quad (5.1.22)$$

d.h. es gilt für den Einteilchenzustand

$$\psi_{\sigma'}(t, \vec{x}') = \left\langle \vec{x}', \sigma'; t \left| \phi_{\vec{p}_1, \sigma} \right\rangle. \quad (5.1.23)$$

Nun ist wegen

$$\mathbf{H}_0 \left| \vec{p}, \sigma \right\rangle = \frac{\vec{p}^2}{2m} \left| \vec{p}, \sigma \right\rangle \quad (5.1.24)$$

$$\begin{aligned} \psi_{\sigma'}(t, \vec{x}') &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{p} \exp(-i \vec{p} \cdot \vec{x}) \phi_{\vec{p}_1}(\vec{p}) \left\langle \vec{x}', \sigma' \left| \vec{p}, \sigma_1 \right\rangle \\ &= \delta_{\sigma \sigma'} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \phi_{\vec{p}_1, \sigma}(\vec{p}) \exp \left[i \vec{p} \cdot (\vec{x}' - \vec{x}) - i \frac{t \vec{p}^2}{2m} \right]. \end{aligned} \quad (5.1.25)$$

Da voraussetzungsgemäß $\phi_{\vec{p}_1, \sigma}(\vec{p})$ nur in einer kleinen Umgebung um $\vec{p} = \vec{p}_1$ merklich von 0 verschieden sein soll, können wir das Argument der Exponentialfunktion um $\vec{p} = \vec{p}_1$ entwickeln:

$$\vec{p} \cdot (\vec{x}' - \vec{x}) - \frac{t \vec{p}^2}{2m} = \vec{p}_1 \cdot (\vec{x}' - \vec{x}) - \frac{t \vec{p}_1^2}{2m} + (\vec{p} - \vec{p}_1) \cdot (\vec{x}' - \vec{x}) - \frac{t \vec{p}_1 \cdot (\vec{p} - \vec{p}_1)}{m} + \mathcal{O}[(\vec{p} - \vec{p}_1)^2]. \quad (5.1.26)$$

Setzen wir diese Näherung in (5.1.25) ein, erhalten wir

$$\psi_{\sigma'}(t, \vec{x}') \simeq \phi'_{\sigma'} \left[\vec{x}' - \left(\vec{x} + \frac{\vec{p}_1 t}{m} \right) \right] \exp \left(\frac{i \vec{p}_1^2 t}{2m} \right), \quad (5.1.27)$$

wobei

$$\phi'_{\sigma'}(\vec{x}) = \delta_{\sigma\sigma'} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^{3/2}} \phi_{\vec{p},\sigma}(\vec{p}) \exp(i\vec{p} \cdot \vec{x}). \quad (5.1.28)$$

Wie wir aus (5.1.27) sehen, beschreibt also (5.1.25) ein freies Wellenpaket für ein Teilchen, das sich mit einem mittleren Impuls \vec{p}_1 (also in positiver z-Richtung) fortbewegt. Diese Form wird das exakte Wellenpaket für das wechselwirkende Zweiteilchensystem freilich nur für $t \rightarrow -\infty$ haben, wenn sich die Teilchen weit voneinander entfernt befinden und der Einfluß des Wechselwirkungspotentials vernachlässigt werden kann. Wir können auch leicht nachrechnen, daß der asymptotische Zweiteilchenzustand (5.1.19) auf 1 normiert ist, wie es sein muß (*Übung!*).

Betrachten wir nun die zeitliche Entwicklung des Zustandes im Wechselwirkungsbild. Gemäß (5.1.7) und (1.13.5) gilt

$$|\psi(t)\rangle = \mathbf{C}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad \text{mit} \quad \mathbf{C}(t, t_0) = \mathcal{T}_c \exp\left(-i \int_{t_0}^t dt' \mathbf{H}_w(t')\right), \quad (5.1.29)$$

wobei wir statt des Anfangszeitpunktes $t_0 = 0$ in Abschnitt 1.13 hier einen allgemeinen Anfangszeitpunkt t_0 gewählt haben. Für $t_0 \rightarrow -\infty$ haben wir gemäß (5.1.19)

$$|\psi(t)\rangle = \mathbf{C}(t, -\infty) |\psi_{\text{in}}\rangle. \quad (5.1.30)$$

Für sehr große Zeiten $t \rightarrow \infty$ wird sich $|\psi(t)\rangle$ wieder wie ein System freier Teilchen verhalten, wenn das Wechselwirkungspotential hinreichend schnell abfällt³, und wir betrachten das System in diesem **asymptotisch freien Endzustand**

$$|\psi_{\text{out}}\rangle = \mathbf{C}(\infty, -\infty) |\psi_{\text{in}}\rangle := \mathbf{S} |\psi_{\text{in}}\rangle. \quad (5.1.31)$$

Damit haben wir den für die Streutheorie wichtigen Begriff des **Streuoperators** eingeführt. Offenbar ist der Streuoperator \mathbf{S} ein **unitärer Operator**, der einen vorgebenen asymptotisch freien Anfangszustand $|\psi_{\text{in}}\rangle$ in den durch die quantentheoretische Zeitentwicklung determinierten asymptotisch freien Endzustand $|\psi_{\text{out}}\rangle$ abbildet. Damit enthält der Streuoperator alle quantenmechanisch überhaupt möglichen Informationen über den Streuvorgang. Insbesondere sind die **Übergangswahrscheinlichkeiten** durch die entsprechenden **Streumatrixelemente** gegeben.

Wir interessieren uns hier für die elastische Streuung und die Wahrscheinlichkeit, daß wir ein Paar von Elektronen mit bestimmten Impulsen und Spineinstellungen finden, also

$$d\omega(f \leftarrow i) := d\omega(\vec{p}'_1, \sigma'_1; \vec{p}'_2, \sigma'_2 \leftarrow \psi_{\text{in}}) = d^3\vec{p}'_1 d^3\vec{p}'_2 \left| \langle \vec{p}'_1, \sigma'_1; \vec{p}'_2, \sigma'_2 | \mathbf{S} | \psi_{\text{in}} \rangle \right|^2. \quad (5.1.32)$$

Im realen Experiment läuft nun aber ein Strom von vielen Teilchen mit einem relativ unscharf bestimmten Stoßparameter \vec{b} und einem relativ gut bestimmten Impuls $\vec{p}_1 = p_1 \vec{e}_z$ (sog. „Bunches“) aus einem Beschleuniger auf ein ruhendes Ziel, z.B. eine Metallfolie, in dem sich viele Teilchen befinden. Wir betrachten hier nur den Fall, daß jedes Projektilteilchen an lediglich einem Targetteilchen streut (was ein hinreichend dünnes Target voraussetzt) und keine neuen Teilchen erzeugt werden oder das Target als ganzes in einen angeregten Zustand übergeht (elastische Streuung). Der **differentielle Streuquerschnitt** soll ein Maß für die Wahrscheinlichkeit sein, daß zwei an einer solchen Streuung beteiligten Teilchen weit weg vom Target in einem bestimmten Endzustand $|\psi_f\rangle = |\vec{p}'_1, \sigma'_1; \vec{p}'_2, \sigma'_2\rangle$ gefunden werden. Nun wird diese Wahrscheinlichkeit unter den oben beschriebenen Umständen proportional zur

³Die mathematischen Bedingungen werden z.B. in [Tay72] genauer betrachtet. Es ist nur wichtig zu bemerken, daß diese Forderungen für das Coulombpotential aufgrund seiner Langreichweitigkeit nicht erfüllt sind. Dies ist der Grund, warum wir das Coulomb-Potential in diesem Kapitel, wie oben beschrieben, als Grenzfall des Yukawa-Potential betrachten. Eine genauere Behandlung des Coulombspotentials findet sich in der bereits zitierten Lehrbuchliteratur, insbesondere in [ST93].

5.1 · Zweiteilchen-Streuung

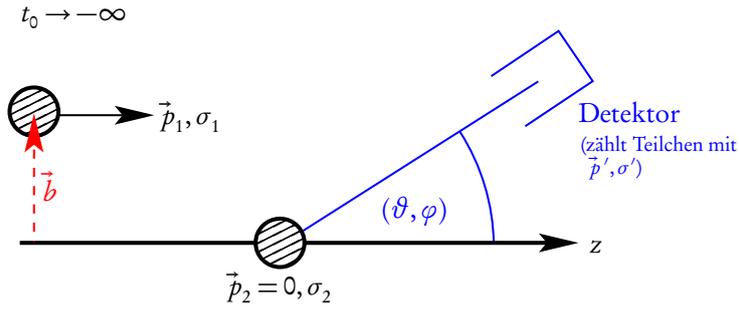


Abbildung 5.1: Schematischer Aufbau für ein (Fixed-Target-) Streuexperiment: Zur Zeit $t_0 \rightarrow -\infty$ wird ein Teilchen mit relativ gut bestimmtem Impuls $\vec{p}_1 = p_1 \vec{e}_z$ und einer Spin-z-Komponente σ_1 auf ein bei $\vec{x} = 0$ in guter Näherung ruhendes Teilchen ($\vec{p}_2 = 0$) mit Spin-z-Komponente σ_2 geschossen, wobei beide Teilchen so weit voneinander entfernt sind, daß anfangs die Wechselwirkung vernachlässigt werden kann. Aufgrund der relativ gut bestimmten Impulse sind die Wellenpakete aufgrund der Heisenbergschen Unschärferelation im Ortsraum relativ breit. Allerdings ist die Ortsunschärfe immer noch klein gegenüber den makroskopischen Abmessungen des Experiments und auch gegenüber der Ortsauflösung des Detektors, der weit entfernt vom Streueignis bei $\vec{x} \simeq 0$ Teilchen erfäßt, die mit einem bestimmten Impuls \vec{p}' und einer bestimmten Spin-z-Komponente bei ihm auftreffen.

Dichte der einfallenden Teilchen und der Teilchen im Target, zur Ausdehnung des Strahlbunches und der Quelle in z-Richtung sowie zur für die Streuung wirksamen Querschnittsfläche sein. Diese trivialen Abhängigkeiten dividiert man aus der Wahrscheinlichkeit heraus, was dann die folgende Definition des Streuquerschnittes ergibt:

$$d\sigma = \frac{N = \text{Anzahl der in den Zustand } |\psi_f\rangle \text{ gestreuten Elektronen}}{\rho_{\text{Projektil}} l_{\text{bunch}} \rho_{\text{target}} l_{\text{target}} A}. \quad (5.1.33)$$

Der Zähler dieses Ausdrucks ist hier offenbar durch

$$N = l_{\text{bunch}} \rho_{\text{Projektil}} \int_{\mathbb{R}^2} d^2 \vec{b} d\omega (f \leftarrow i) \quad (5.1.34)$$

gegeben. Dabei sind wir davon ausgegangen, daß wir die Dichte der Teilchen im Bunch als über den relevanten transversalen Querschnitt des Targets als konstant annehmen können. Dies ist dann der Fall, wenn der Bereich von Stoßparametern \vec{b} groß gegen die transversale Ausdehnung des Targets ist, was in realen Experimenten praktisch immer der Fall ist. Daher dürfen wir auch über alle Stoßparameter \vec{b} integrieren, da die Dichte der Targetteilchen (in unserer Rechnung repräsentiert durch die Ausdehnung des oben konstruierten Wellenpakets) nur über einen endlichen Volumenbereich $l_{\text{target}} A = V_{\text{target}}$ von 0 verschieden ist, und nur dieser Überlappbereich trägt zu dem Integral in (5.1.34) bei. Weiter ist in unserer Rechnung entsprechend der Normierung der Wellenpakete im in-Zustand die Dichte auf ein Teilchen in diesem Volumen normiert, da wir ja unsere Einteilchenzustände auf 1 normiert haben. Schließlich ist also der **Streuquerschnitt** durch

$$d\sigma = \int_{\mathbb{R}^2} d^3 \vec{b} d\omega (f \leftarrow i) \quad (5.1.35)$$

gegeben. Zur Auswertung dieses Ausdrucks müssen wir nun (5.1.19) und (5.1.20) in (5.1.32) einsetzen. Dabei treten die Streumatrixelemente

$$S_{fi} = \langle \vec{p}'_1, \sigma'_1; \vec{p}'_2, \sigma'_2 | \mathbf{S} | \vec{k}_1, \sigma_1; \vec{k}_2, \sigma_2 \rangle \quad (5.1.36)$$

auf. Diese stellen die Übergangswahrscheinlichkeitsamplituden für die Streuung von Elektronen mit scharf bestimmten Impulsen \vec{k}_1 und \vec{k}_2 in einen Zustand mit scharf bestimmten Impulsen \vec{p}_1 und \vec{p}_2 dar. Nun ist aber $|\vec{k}_1, \sigma_1; \vec{k}_2, \sigma_2\rangle^-$ kein auf 1 normierbarer Zustand des Zweiteilchenhilbertraums \mathcal{H}_2^- sondern ein verallgemeinerter Impulseigenzustand. In der Tat sind die entsprechenden Matrixelemente Distributionen. Wie wir im nächsten Abschnitt zeigen werden, ergibt sich erwartungsgemäß, daß zum einen eine bestimmte Wahrscheinlichkeit besteht, daß die Teilchen gar nicht aneinander streuen, d.h. daß sich die Impulse der beiden Elektronen gar nicht ändern und daß, auch im Falle eines Streuvorganges, stets Gesamtenergie und -impuls erhalten bleiben. Die Streumatrix besitzt demnach folgende allgemeine Struktur

$$\mathbf{S} = \mathbb{1}_{\text{Fock}} + i\mathbf{T}, \quad (5.1.37)$$

wobei die T -Matrixelemente wiederum die Form

$$T_{fi} = 2\pi\delta^{(4)}(p'_1 + p'_2 - p_1 - p_2)\mathcal{M}_{fi} \quad (5.1.38)$$

besitzen. Dabei ist die Wahl der Faktoren i in (5.1.37) und 2π in (5.1.38) eine (wie wir später sehen werden, nützliche) Konvention. Wir haben uns der Bequemlichkeit halber einer vierdimensionalen Schreibweise bedient. Dabei ist z.B.

$$p_1 = \begin{pmatrix} E_1 \\ \vec{p}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{p}_1^2/(2m) \\ \vec{p}_1 \end{pmatrix}. \quad (5.1.39)$$

Es ist klar, daß T_{fi} und \mathcal{M}_{fi} wiederum Funktionen der Impulse und Spin- z -Komponenten der ein- und auslaufenden Teilchen sind.

Es ist klar, daß der Einsoperator in (5.1.37) nur für die extreme **Vorwärtsstreuung** relevant ist, d.h. in dem kleinen Bereich in \vec{p} , wo die Einteilchenwellenfunktionen $\phi_{\vec{p}_1, \sigma_1}(\vec{p})$ bzw. $\phi_{\vec{p}_2=0, \sigma_2}(\vec{p})$ von 0 verschieden sind. Betrachten wir also nur den geometrischen Bereich außerhalb dieser Impulsverteilungsbreite um $\vec{p}_1 = p_1\vec{e}_z$ und $\vec{p}_2 = 0$, müssen wir nur den Anteil mit \mathbf{T} berücksichtigen. Wir werden weiter unten noch sehen, daß die Vorwärtsstreuamplitude und dessen Interferenz mit der ungestreuten einlaufenden Welle gleichwohl wichtig ist.

Betrachten wir aber zunächst den Bereich außerhalb der Vorwärtsstreuzone und setzen (5.1.38) in (5.1.32, 5.1.35) ein, erhalten wir

$$\begin{aligned} d\sigma &= d^3\vec{p}'_1 d^3\vec{p}'_2 \int_{\mathbb{R}^2} d^2\vec{b} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k}_1 \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k}_2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k}'_1 \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k}'_2 \\ &\quad \times \phi_{\vec{p}_1, \sigma_1}^*(\vec{k}_1) \phi_{\vec{p}_2, \sigma_2}^*(\vec{k}_2) \phi_{\vec{p}_1, \sigma_1}(\vec{k}'_1) \phi_{\vec{p}_2, \sigma_2}(\vec{k}'_2) \exp[i\vec{b} \cdot (\vec{k}_1 - \vec{k}'_1)] \\ &\quad \times 2\pi \mathcal{M}(\vec{p}'_1, \sigma'_1; \vec{p}'_2, \sigma'_2 \leftarrow \vec{k}'_1, \sigma_1; \vec{k}'_2, \sigma_2) \delta^{(4)}(k'_1 + k'_2 - p'_1 - p'_2) \\ &\quad \times 2\pi \mathcal{M}^*(\vec{p}'_1, \sigma'_1; \vec{p}'_2, \sigma'_2 \leftarrow \vec{k}_1, \sigma_1; \vec{k}_2, \sigma_2) \delta^{(4)}(k_1 + k_2 - p'_1 - p'_2). \end{aligned} \quad (5.1.40)$$

Dabei betrachten wir allgemeiner ein Bezugssystem, in dem beide Teilchen einen einlaufenden Impuls in z -Richtung besitzen, um gleich die beiden üblichen Fälle eines Fixed-Target- und eines Collider-Experiments abdecken zu können.

Die Integration über den Stoßparameter \vec{b} ergibt

$$\int_{\mathbb{R}^2} d^2\vec{b} \exp[i\vec{b} \cdot (\vec{k}_1 - \vec{k}'_1)] = (2\pi)^2 \delta^{(2)}(\vec{k}_{1\perp} - \vec{k}'_{1\perp}). \quad (5.1.41)$$

Dabei ist $\vec{k}_{1\perp} = (k_{1x}, k_{1y})$ der zur Stoßrichtung \vec{e}_z senkrechte Anteil von \vec{k}_1 (und entsprechend für \vec{k}'_1). Wir können nun leicht die δ -Distributionen der Impulse ausnutzen, um die Integration nach $d^3\vec{k}'_2$ und $d^2\vec{k}'_{1\perp}$ auszuführen:

$$\begin{aligned}
 d\sigma = & d^3\vec{p}'_1 d^3\vec{p}'_2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k}_1 \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{k}_2 \int_{\mathbb{R}} dk'_{1z} \\
 & \times \left\{ \phi_{\vec{p}_1, \sigma_1}^*(\vec{k}_1) \phi_{\vec{p}_2, \sigma_2}^*(\vec{k}_2) \phi_{\vec{p}_1, \sigma_1}(\vec{k}'_1) \phi_{\vec{p}_2, \sigma_2}(\vec{k}'_2) \right. \\
 & \quad \times \mathcal{M}(\vec{p}'_1, \sigma'_1; \vec{p}'_2, \sigma'_2 \leftarrow \vec{k}'_1, \sigma_1; \vec{k}'_2, \sigma_2) \\
 & \quad \times \mathcal{M}^*(\vec{p}'_1, \sigma'_1; \vec{p}'_2, \sigma'_2 \leftarrow \vec{k}_1, \sigma_1; \vec{k}_2, \sigma_2) \\
 & \quad \times \delta[E(\vec{k}'_1) + E(\vec{k}'_2) - E(\vec{p}'_1) - E(\vec{p}'_2)] \\
 & \quad \left. \times (2\pi)^4 \delta^{(4)}(k_1 + k_2 - p'_1 - p'_2) \right\}_{\vec{k}'_{1\perp} = \vec{k}_{1\perp}, \vec{k}'_2 = \vec{p}'_1 + \vec{p}'_2 - \vec{k}'_1}.
 \end{aligned} \tag{5.1.42}$$

Die δ -Distribution in der vorletzten Zeile verwenden wir nun bei der Integration nach k'_{1z} . Zunächst gilt (*Übung!*)

$$\delta[E(\vec{k}'_1) + E(\vec{k}'_2) - E(\vec{p}'_1) - E(\vec{p}'_2)] = \frac{m}{|\vec{k}'_1 - \vec{k}'_2|} \delta(k'_{1z} - k_{1z}), \tag{5.1.43}$$

wobei wir die oben angegebenen kinematischen Beziehungen sowie die Energie- und Impulserhaltung $k_1 + k_2 = p'_1 + p'_2$ aufgrund der verbliebenen $\delta^{(4)}$ -Distribution verwendet haben. Dies impliziert, daß auch $k'_{2z} = k_{2z}$ ist. Setzen wir dies in (5.1.42) ein, erhalten wir schließlich

$$\begin{aligned}
 d\sigma = & d^3\vec{p}'_1 d^3\vec{p}'_2 \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k}_1 \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{k}_2 \left\{ \left| \phi_{\vec{p}_1, \sigma_1}(\vec{k}_1) \right|^2 \left| \phi_{\vec{p}_2, \sigma_2}^*(\vec{k}_2) \right|^2 \frac{m}{|\vec{k}'_1 - \vec{k}'_2|} \right. \\
 & \quad \left. \times \left| \mathcal{M}(\vec{p}'_1, \sigma'_1; \vec{p}'_2, \sigma'_2 \leftarrow \vec{k}'_1, \vec{k}'_2) \right|^2 (2\pi)^4 \delta^{(4)}(k_1 + k_2 - p'_1 - p'_2) \right\}.
 \end{aligned} \tag{5.1.44}$$

Gehen wir nun davon aus, daß die Auflösung des Detektors die Impulse der Teilchen im Endzustand nicht genauer erfassen kann als es der Breite der Zustände $\phi_{\vec{p}, \sigma}(\vec{k})$ entspricht, können wir überall $\vec{k}'_1 = \vec{p}'_1$ und $\vec{k}'_2 = \vec{p}'_2$ setzen außer in den Wellenfunktionen selbst. Wegen deren Normierung auf 1 erhalten wir dann schließlich durch Ausführung der entsprechenden verbleibenden Normierungsintegrale für den differentiellen Streuquerschnitt

$$d\sigma = d^3\vec{p}'_1 d^3\vec{p}'_2 \frac{m}{|\vec{p}'_1 - \vec{p}'_2|} \left| \mathcal{M}(\vec{p}'_1, \sigma'_1; \vec{p}'_2, \sigma'_2 \leftarrow \vec{p}'_1, \sigma_1; \vec{p}'_2, \sigma_2) \right|^2 (2\pi)^4 \delta^{(4)}(p_1 + p_2 - p'_1 - p'_2). \tag{5.1.45}$$

Dies werten wir nun für die beiden im Experiment üblichen Fälle weiter aus.

Laborsystem

Beginnen wir mit einem Fixed-Target-Experiment. Man nennt das entsprechende Bezugssystem, in dem das zweite Teilchen ruht, auch **Laborsystem**, da dies in der Frühzeit der Teilchenbeschleuniger die einzig realisierbare Möglichkeit war, d.h. man schoß mit Teilchen aus dem Beschleuniger auf ein ruhendes

Target. Dann ist

$$\vec{p}_1 = \vec{p}_L, \quad \vec{p}_2 = 0. \quad (5.1.46)$$

Aufgrund der Impulserhaltung ist also (mit $\vec{p}'_1 = \vec{p}'_L$)

$$\vec{p}'_2 = \vec{p}_L - \vec{p}'_L. \quad (5.1.47)$$

Der Betrag von \vec{p}'_1 ist weiter noch durch die Energieerhaltung festgelegt:

$$\begin{aligned} \delta(E_1 + E_2 - E'_1 - E'_2) &= \delta\left(\frac{P_1^2 + P_2^2 - P_1'^2 - P_2'^2}{2m}\right) = \delta\left(\frac{P_L'^2 - P_L P_L \cos\vartheta_L}{m}\right) \\ &= \frac{m}{2P_L' - P_L \cos\vartheta_L} \delta(P_L' - P_L \cos\vartheta_L) \Rightarrow P_L' = P_L \cos\vartheta_L \end{aligned} \quad (5.1.48)$$

wobei wir Beträge von Dreierimpulsen mit dem entsprechenden Großbuchstaben bezeichnen, also z.B. $|\vec{p}_1| = P_1$ setzen. Der Winkel ϑ_L zwischen der Richtung des einfallenden Teilchens (in unserer Konvention die z-Richtung) und eines der auslaufenden Teilchen heißt **Streuwinkel im Laborsystem**. Da die Impulsbeträge nicht negativ sein dürfen, ist der kinematisch erlaubte Bereich $\vartheta_L \in [0, \pi/2]$. Weiter gilt $d^3\vec{p}'_1 = dP_L' P_L'^2 d\Omega_L$ mit dem Raumwinkelement $d\Omega_L = d\vartheta_L d\varphi_L \sin\vartheta_L$. Der **differentielle Streuquerschnitt** ergibt sich dann durch Integration über \vec{p}'_2 , wodurch die δ -Distribution für die räumlichen Impulse ausintegriert wird, was (5.1.47) sicherstellt, und schließlich über dP_L' unter Verwendung von (5.1.48):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_L} = (2\pi)^4 |\mathcal{M}|^2 m^2 \cos\vartheta_L. \quad (5.1.49)$$

Man rechnet aufgrund der kinematischen Beziehungen (5.1.46-5.1.47) leicht nach (*Übung*), daß für den Impuls des zweiten Teilchens

$$P_2' = P_L \sin\vartheta_L = P_L \cos(\pi/2 - \vartheta_L) \quad (5.1.50)$$

gilt. Daraus schließt man, daß $\vec{p}'_1 = \vec{p}'_L$ und \vec{p}'_2 stets aufeinander senkrecht stehen. Das rechnet man auch formal aus der oben hergeleiteten Kinematik nach, aus der sofort $\vec{p}'_L \cdot \vec{p}'_2 = 0$ folgt. Die kinematischen Verhältnisse sind in Abb. 5.2 dargestellt.

Bei der Berechnung des **totalen Streuquerschnittes** ist zu beachten, daß bei **ununterscheidbaren Teilchen** über den gesamten kinematischen Bereich, insbesondere also auch über $\vartheta_L \in [0, \pi/2]$, zu integrieren ist. Dies führt aber zur Doppeltzählung eines jeden möglichen Streuereignisses, da sich ja mit der Streuung des einen Teilchens in Richtung von ϑ_L dasselbe Streuereignis durch die Detektion des zweiten Teilchens bei $\pi/2 - \vartheta_L$ erneut erfaßt wird. Es ist also entsprechend der Identität der beiden Teilchen im Endzustand ein zusätzlicher Faktor $1/2$ anzubringen.

Schwerpunktsystem

Betrachten wir nun ein **Colliderexperiment**, bei dem beide Teilchen mit betragsmäßig gleichen einander entgegengesetzten Impulsen aufeinandergeschossen werden, d.h. es ist⁴

$$\vec{p}_1 = \vec{p}_{\text{cm}} = -\vec{p}_2. \quad (5.1.51)$$

⁴Die Bezeichnung „cm“ in den folgenden Formeln stammt von der englischen Bezeichnung „center-mass frame“ oder, was im relativistischen Fall präziser ist „center-momentum frame“ für das Schwerpunktsystem.

5.1 · Zweiteilchen-Streuung

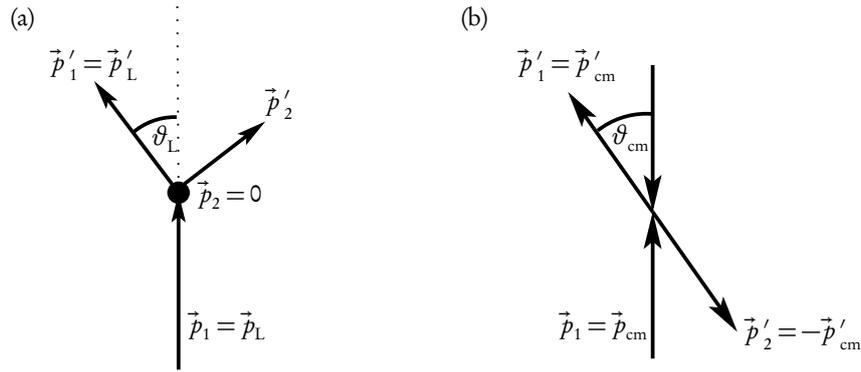


Abbildung 5.2: Kinematik beim elastischen Stoß identischer Teilchen im Laborsystem (a) bzw. Schwerpunktsystem (b).

Aufgrund der Dreierimpulserhaltung gilt dann auch

$$\vec{p}'_1 = \vec{p}'_{cm} = -\vec{p}'_2, \quad (5.1.52)$$

und für die δ -Distribution, die aus der Energieerhaltung folgt, erhalten wir

$$\delta(E_1 + E_2 - E'_1 - E'_2) = \delta\left(\frac{P'^2_{cm} - P^2_{cm}}{m}\right) = \frac{m}{2P_{cm}} \delta(P'_{cm} - P_{cm}). \quad (5.1.53)$$

Dies in (5.1.45) eingesetzt liefert nach Integration über $d^3\vec{p}'_2$ und dP_{cm} unter Berücksichtigung von $|\vec{p}_1 - \vec{p}_2| = 2P_{cm}$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{cm}} = (2\pi)^4 \frac{m^2}{4} |\mathcal{M}|^2. \quad (5.1.54)$$

Es ist klar, daß wir jedes Streueignis durch einen entsprechenden Galilei-Boost sowohl vom Labor als auch im Schwerpunktsystem aus betrachten können. Da der Gesamt-Hamilton-Operator unter der vollen Galilei-Gruppe invariant ist, ist das Matrixelement \mathcal{M} selbst ein **Skalar**, d.h. der Wert für $|\mathcal{M}|^2$ in den Formeln für den differentiellen Streuquerschnitt in (5.1.49) (Laborsystem) und in (5.1.54) (Schwerpunktsystem) ist invariant. Damit gilt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_L} = 4 \cos\vartheta_L \frac{d\sigma}{d\Omega_{cm}}. \quad (5.1.55)$$

Zu diesem Resultat kann man auch durch einfache Variablentransformation gelangen. Für den Zusammenhang zwischen den Streuwinkeln in den beiden Bezugssystemen ergibt sich nach einer kurzen Rechnung (*Übung*)

$$\cos\vartheta_L = \sqrt{\frac{1 + \cos\vartheta_{cm}}{2}}. \quad (5.1.56)$$

Hat man es schließlich mit anfangs unpolarisierten Projektilen und Targets zu tun, ist über die vier Anfangsspinstellungen σ_1, σ_2 zu mitteln (d.h. man summiert über σ_1 und σ_2 und dividiert durch 4). Interessiert man sich weiter für die Polarisation im Endzustand nicht, ist auch noch über σ'_1 und σ'_2 zu summieren.

5.1.3 Das optische Theorem

Aus der Definition des **Streuoperators** gemäß (5.1.31) folgt unmittelbar dessen Unitarität. Daraus ergibt sich eine weitreichende Folgerung über den totalen Streuquerschnitt. Um diese zu finden, setzen wir (5.1.37) in die Unitaritätsbedingung ein und erhalten

$$\mathbb{1}_{\text{Fock}} = \mathbf{S}\mathbf{S}^\dagger = (\mathbb{1}_{\text{Fock}} + i\mathbf{T})(\mathbb{1}_{\text{Fock}} - i\mathbf{T}^\dagger) = \mathbb{1}_{\text{Fock}} + i(\mathbf{T} - \mathbf{T}^\dagger) + \mathbf{T}\mathbf{T}^\dagger \quad (5.1.57)$$

oder

$$\mathbf{T}\mathbf{T}^\dagger = -i(\mathbf{T} - \mathbf{T}^\dagger). \quad (5.1.58)$$

Daraus können wir eine Folgerung über die **Zweiteilchenstreuung** ziehen, indem wir diese Gleichung von links mit $\langle 1'2' |$ und von rechts mit $|12\rangle$ multiplizieren. Dabei haben wir zur Abkürzung $|12\rangle := |\vec{p}_1, \sigma_1; \vec{p}_2, \sigma_2\rangle$ geschrieben. Dann folgt durch Einschleiben eines Identitätsoperators $\mathbb{1}_{\text{Fock}}$ für die linke Seite

$$\langle 1'2' | \mathbf{T}\mathbf{T}^\dagger |12\rangle = \sum_{N=0}^{\infty} \int \mathrm{d}1'' \cdots \mathrm{d}N'' \langle 1'2' | \mathbf{T} |1'2' \dots N'\rangle \langle 1''2'' \dots N'' | \mathbf{T}^\dagger |12\rangle. \quad (5.1.59)$$

Dabei steht das kombinierte Summen-Integralzeichen für die Integration über die Impulse \vec{p}_j'' und die Summation über die Spin-z-Komponenten σ_j'' ($j \in \{1, \dots, N\}$). Setzen wir darin (5.1.38) ein, folgt

$$\begin{aligned} \langle 1'2' | \mathbf{T}\mathbf{T}^\dagger |12\rangle &= \sum_{N=0}^{\infty} \int \mathrm{d}1'' \cdots \mathrm{d}N'' (2\pi)^2 \delta^{(4)}[p'_1 + p'_2 - (p''_1 + \cdots + p''_N)] \\ &\quad \times \delta^{(4)}[p'_1 + p'_2 - (p_1 + p_2)] \mathcal{M}_{1'2' \leftarrow 1''2'' \dots N''}^* \mathcal{M}_{12 \leftarrow 1''2'' \dots N''}. \end{aligned} \quad (5.1.60)$$

Für die rechte Seite von (5.1.58) erhalten wir

$$-i \langle 1'2' | \mathbf{T} - \mathbf{T}^\dagger |12\rangle = -2\pi i \delta^{(4)}[p'_1 + p'_2 - (p_1 + p_2)] (\mathcal{M}_{1'2' \leftarrow 12} - \mathcal{M}_{1'2' \leftarrow 12}^*). \quad (5.1.61)$$

Setzen wir also (5.1.60) und (5.1.61) gleich, können wir die gemeinsame δ -Distribution kürzen und $\langle 1'2' | = |12\rangle$ setzen. Dann folgt aber

$$\sum_{N=0}^{\infty} \int \mathrm{d}1'' \cdots \mathrm{d}N'' (2\pi)^2 \delta^{(4)}[p'_1 + p'_2 - (p''_1 + \cdots + p''_N)] |\mathcal{M}_{12 \leftarrow 1''2'' \dots N''}|^2 = 4\pi \text{Im} \mathcal{M}_{12 \leftarrow 12}. \quad (5.1.62)$$

Auf der linken Seite dieser Gleichung steht nun in naheliegender Verallgemeinerung von (5.1.45) auf beliebige Streuprozesse $12 \rightarrow 1'' \dots N''$ bis auf einen Faktor $v_{\text{rel}}/(2\pi)^2$ der totale Streuquerschnitt für die Streuung zweier Teilchen, wobei alle Prozesse, also elastische und (in allgemeineren Modellen, die Teilchenerzeugung und -vernichtung erlauben) inelastische, berücksichtigt werden. Dies liefert dann das **optische Theorem** in der Form [Fee32]

$$v_{\text{rel}} \sigma_{\text{tot}} = 2(2\pi)^3 \text{Im} \mathcal{M}_{12 \leftarrow 12}. \quad (5.1.63)$$

Auf der rechten Seite kommt dabei der Imaginärteil der **Streuamplitude für elastische Vorwärtsstreuung** zu stehen.

Die Herleitung zeigt, daß der Term auf der rechten Seite von (5.1.63) durch die Interferenzterme beim Ausmultiplizieren von (5.1.57) zwischen der Möglichkeit, daß die Teilchen ungestreut aneinander vorbeilaufen (repräsentiert durch den Einsoperator $\mathbb{1}_{\text{Fock}}$ in der Streumatrix cf. (5.1.37)) und dem Fall,

daß tatsächlich eine Streuung stattfindet (repräsentiert durch die Transfermatrix \mathbf{T} in (5.1.37)) zustandekommt. In der Definition des Streuquerschnitts haben wir andererseits bewußt nur die wirklichen Streuprozesse quantifiziert. Nun bedeutet die Unitarität der Streumatrix aber nichts anderes als die **Erhaltung der Wahrscheinlichkeit**, also die Normierung der Gesamtwahrscheinlichkeit, die sich aus der Wahrscheinlichkeit dafür, daß keine Streuung stattfindet bzw. daß die Teilchen tatsächlich irgendwie aneinander streuen, auf 1. Damit besagt das optische Theorem (5.1.63), daß genau der Anteil von Teilchen, die tatsächlich irgendeine Form von Streuung „erleiden“, in Vorwärtsrichtung fehlt. In einer Analogie mit Licht entspricht dies der **Schattenbildung** bei der Streuung elektromagnetischer Wellen an einem Hindernis, und daher rührt der Name **optisches Theorem**.

5.1.4 Die Born-Reihe

Wie wir im vorigen Abschnitt ausführlich erläutert haben, ist der differentielle Streuquerschnitt für hinreichend weit von der Vorwärtsstreuzone entfernte Beobachtung gemäß (5.1.45) bzw. (5.1.54) durch das entsprechende Matrixelement \mathcal{M} bestimmt. Diese Matrixelemente gilt es also zu berechnen, um aus unserem quantenmechanischen Formalismus beobachtbare Größen zu erhalten. Leider ist dies in praktisch allen Fällen nicht exakt möglich, so daß wir auf Näherungen angewiesen sind. Hier besprechen wir die **Störungstheorie**. Die Idee ist, daß die Wechselwirkung als kleine Störung angesehen werden kann, d.h. daß für die betrachtete Reaktion die potentielle Wechselwirkungsenergie klein gegenüber der gesamten kinetischen Energie der streuenden Teilchen ist. Dann können wir die **S-Matrixelemente** gemäß (5.1.31) in eine formale Reihe nach Potenzen des Wechselwirkungs-Hamilton-Operators \mathbf{H}_W entwickeln. Aus (5.1.29) folgt diese Reihenentwicklung aus

$$\mathbf{S} = \mathbf{C}(t_0 \rightarrow -\infty, t \rightarrow \infty) = \mathcal{T}_c \exp \left[-i \int_{\mathbb{R}} dt \mathbf{H}_W(t) \right]. \quad (5.1.64)$$

Entwickeln wir also die Operatorexponentialfunktion, erhalten wir

$$\mathbf{S} = \mathbb{1}_{\text{Fock}} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-i)^k}{k!} \int_{\mathbb{R}} dt_1 \cdots \int_{\mathbb{R}} dt_k \mathcal{T}_c \mathbf{H}_W(t_1) \cdots \mathbf{H}_W(t_k) = \mathbb{1}_{\text{fock}} + i \sum_{k=1}^{\infty} \mathbf{T}^{(k)}. \quad (5.1.65)$$

Diese Reihe heißt die **Bornsche Reihe**. In niedrigster Ordnung, oft auch kurz als **Bornsche Näherung** genannt, ist also

$$iT_{fi}^{(1)} = -i \int_{\mathbb{R}} dt' \langle \vec{p}'_1, \sigma'_1; \vec{p}'_2, \sigma'_2 | \mathbf{H}_W(t') | \vec{p}_1, \sigma_1; \vec{p}_2, \sigma_2 \rangle^-. \quad (5.1.66)$$

Um dieses Matrixelement zu berechnen, schreiben wir die antisymmetrisierten Zweiteilchen-Impuls-Spin-Eigenzustände mit Hilfe von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren,

$$\begin{aligned} |\vec{p}_1, \sigma_1; \vec{p}_2, \sigma_2 \rangle^- &= \mathbf{a}^\dagger(\vec{p}_1, \sigma_1) \mathbf{a}^\dagger(\vec{p}_2, \sigma_2) |\Omega\rangle_0, \\ \langle \vec{p}'_1, \sigma'_1; \vec{p}'_2, \sigma'_2 |^- &= {}_0 \langle \Omega | \mathbf{a}(\vec{p}'_1, \sigma'_1) \mathbf{a}(\vec{p}'_2, \sigma'_2), \end{aligned} \quad (5.1.67)$$

wobei wir mit dem Index 0 bei $|\Omega\rangle_0$ angedeutet haben, daß es sich um den auf die Felder des Wechselwirkungsbildes bezogenen Vakuumzustand handelt. Setzen wir dies und den Wechselwirkungsoperator in der Form (5.1.13) ein und verwenden die Modenentwicklung (5.1.8) für die Feldoperatoren, sehen wir uns vor die Aufgabe gestellt, **Vakuumerwartungswerte** von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren zu berechnen. Für die führende Ordnung (5.1.66) ist z.B. der folgende Ausdruck zu berechnen:

$${}_0 \langle \Omega | \mathbf{a}(\vec{p}'_1, \sigma'_1) \mathbf{a}(\vec{p}'_2, \sigma'_2) \mathbf{a}^\dagger(\vec{k}'_1, \tilde{\sigma}'_1) \mathbf{a}^\dagger(\vec{k}'_2, \tilde{\sigma}'_2) \mathbf{a}(\vec{k}_2, \tilde{\sigma}_2) \mathbf{a}(\vec{k}_1, \tilde{\sigma}_1) \mathbf{a}^\dagger(\vec{p}_1, \sigma_1) \mathbf{a}(\vec{p}_2, \sigma_2) | \Omega \rangle_0. \quad (5.1.68)$$

Dabei bezeichnen die $\vec{k}_{1,2}$, $\vec{k}'_{1,2}$, $\tilde{\sigma}_{1,2}$ die Impulse und Spin-z-Eigenwerte, über die in dem Integral für \mathbf{H}_W zu integrieren bzw. zu summieren ist. Da die Berechnung solcher Matrixelemente für alle störungstheoretischen Betrachtungen entscheidend ist, hat sich eine ausgefeilte Rechentechnik entwickelt, um diese Arbeit erheblich abzukürzen. Die wichtigste Entwicklung ist dabei die **Feynman-Diagrammtechnik**, die wir im nächsten Abschnitt entwickeln wollen.

5.1.5 Das Wicksche Theorem und Feynman-Diagramme

Um uns der Berechnung von Vakuumerwartungswerten der Art (5.1.68) zu nähern, bemerken wir als erstes, daß für alle Vernichtungsoperatoren

$$\mathbf{a}(\vec{p}, \sigma) |\Omega\rangle_0 = 0 \quad (5.1.69)$$

und damit auch für alle Erzeugungsoperatoren

$${}_0 \langle \Omega | \mathbf{a}^\dagger(\vec{p}, \sigma) = 0 \quad (5.1.70)$$

gilt. Weiter gelten die Antikommutatorregeln (5.1.11)⁵, so daß die Strategie bei der Auswertung der Vakuumerwartungswerte darin besteht, durch fortgesetzte Anwendung der Antikommutatorregeln alle Erzeugungsoperatoren nach links und alle Vernichtungsoperatoren nach rechts zu bringen. Ein solches Produkt von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren nennen wir **normalgeordnet**, und wegen (5.1.69) und (5.1.70) verschwinden die Vakuumerwartungswerte aller normalgeordneten Produkte. Wir führen also die **Normalordnungsvorschrift** für Produkte von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ein, wonach der Ausdruck so umzuordnen ist, daß alle Erzeugungsoperatoren ganz links und alle Vernichtungsoperatoren ganz rechts zu stehen kommen. Dabei wird für fermionische Operatoren das Vorzeichen der Permutation berücksichtigt, die nötig ist, um das Produkt von der ursprünglichen Reihenfolge in Normalordnung zu bringen. Falls ein Produkt entweder nur aus Erzeugungs- oder nur aus Vernichtungsoperatoren besteht, soll die Normalordnungsvorschrift das Produkt unverändert lassen. Solche Produkte haben offensichtlich stets verschwindende Vakuumerwartungswerte, und zwar entweder aufgrund von (5.1.69) (im Fall von Vernichtungsoperatoren) oder (5.1.70) (im Fall von Erzeugungsoperatoren).

Wir werden nun das **Wicksche Theorem** [Wic50] beweisen, das die Berechnung der Vakuumerwartungswerte systematisiert. Dazu betrachten wir zunächst den Fall eines Erzeugungs- und eines Vernichtungsoperators. Zunächst ist

$$\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2^\dagger = \{ \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2^\dagger \} - \mathbf{a}_2^\dagger \mathbf{a}_1 = \delta_{12} + : \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2^\dagger :, \quad (5.1.71)$$

wobei ein in Doppelpunkte eingeschlossenes Operatorprodukt die Normalordnung bezeichnet. Bilden wir also den Vakuumerwartungswert, erhalten wir

$${}_0 \langle \Omega | \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2^\dagger | \Omega \rangle_0 = \delta_{12}. \quad (5.1.72)$$

Im Zusammenhang mit dem Wickschen Theorem bezeichnet man diesen Ausdruck auch als **Kontraktion** eines Paares und bezeichnet es mit hochgestellten Punkten an den zu paarenden Operatoren. Es gilt also

$$\mathbf{a}_1^\bullet \mathbf{a}_2^\bullet = \mathbf{a}_1^\dagger \mathbf{a}_2^\dagger = \mathbf{a}_2^\dagger \mathbf{a}_1^\bullet = 0, \quad \mathbf{a}_1^\bullet \mathbf{a}_2^\dagger = \delta_{12}. \quad (5.1.73)$$

⁵Für Bosonen gelten entsprechende Kommutatorregeln, und die hier entwickelte Diagrammtechnik funktioniert für Bosonen genau analog, nur daß die später auftretenden Vorzeichenregelungen für Fermionen wegfallen.

Das Wicksche Theorem beschreibt nun, wie ein beliebiges Operatorprodukt sich durch Kontraktionen von Operatorpaaren und normalgeordneten Operatorprodukten ausdrücken läßt. Sei also $\mathbf{A}_1 \mathbf{A}_2 \cdots \mathbf{A}_k$ ein beliebiges Produkt von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren \mathbf{A}_j ($j \in \{1, 2, \dots, k\}$). Dann besagt das Wicksche Theorem, daß

$$\begin{aligned}
 \mathbf{A}_1 \mathbf{A}_2 \cdots \mathbf{A}_k &= : \mathbf{A}_1 \mathbf{A}_2 \cdots \mathbf{A}_k : \\
 &+ \mathbf{A}_1^\bullet \mathbf{A}_2^\bullet : \mathbf{A}_3 \cdots \mathbf{A}_k : + \text{Permutationen} \\
 &+ \mathbf{A}_1^\bullet \mathbf{A}_2^\bullet \mathbf{A}_3^\bullet \mathbf{A}_4^\bullet : \mathbf{A}_5 \cdots \mathbf{A}_k : + \text{Permutationen} \\
 &+ \cdots \\
 &+ \begin{cases} \mathbf{A}_1^\bullet \mathbf{A}_2^\bullet \mathbf{A}_3^\bullet \mathbf{A}_4^\bullet \cdots \mathbf{A}_{k-1}^\bullet \mathbf{A}_k^\bullet + \text{Permutationen} & \text{falls } k \text{ gerade,} \\ \mathbf{A}_1^\bullet \mathbf{A}_2^\bullet \mathbf{A}_3^\bullet \mathbf{A}_4^\bullet \cdots \mathbf{A}_{k-2}^\bullet \mathbf{A}_{k-1}^\bullet \mathbf{A}_k + \text{Permutationen} & \text{falls } k \text{ ungerade} \end{cases}
 \end{aligned} \tag{5.1.74}$$

ist. Dabei bedeutet „+Permutationen“ immer die Summation des davorstehenden Ausdrucks über alle möglichen Permutationen der Operatoren in dem davorstehenden Ausdruck, wobei das Vorzeichen der Permutationen zu berücksichtigen ist.

Der Beweis erfolgt durch vollständige Induktion nach k . Für einen Operator ist die Behauptung trivial. Für zwei Operatoren gilt

$$\mathbf{A}_1 \mathbf{A}_2 = \begin{cases} : \mathbf{A}_1 \mathbf{A}_2 : & \text{falls } \mathbf{A}_2 \text{ Vernichter oder beide Operatoren Erzeuger sind,} \\ : \mathbf{A}_1 \mathbf{A}_2 : + \{\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2\} & \text{falls } \mathbf{A}_1 \text{ Vernichter- und } \mathbf{A}_2 \text{ Erzeuger ist.} \end{cases} \tag{5.1.75}$$

In allen Fällen können wir offenbar schreiben

$$\mathbf{A}_1 \mathbf{A}_2 = : \mathbf{A}_1 \mathbf{A}_2 : + {}_0 \langle \Omega | \mathbf{A}_1 \mathbf{A}_2 | \Omega \rangle_0 = : \mathbf{A}_1 \mathbf{A}_2 : + \mathbf{A}_1^\bullet \mathbf{A}_2^\bullet. \tag{5.1.76}$$

Falls nämlich in (5.1.75) der obere Fall eintritt, ist die Kontraktion auf der rechten Seite 0, und im letzteren Fall ist

$$\mathbf{A}_1 \mathbf{A}_2 = \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2^\dagger = -\mathbf{a}_2^\dagger \mathbf{a}_1^\dagger + \{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2^\dagger\} = : \mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2^\dagger : + \mathbf{a}_1^\bullet \mathbf{a}_2^\bullet. \tag{5.1.77}$$

Nehmen wir nun an, das Wicksche Theorem sei korrekt für ein $k = n$. Dann ist

$$\begin{aligned}
 \mathbf{A}_1 \cdots \mathbf{A}_n \mathbf{A}_{n+1} &= : \mathbf{A}_1 \mathbf{A}_2 \cdots \mathbf{A}_n : \mathbf{A}_{n+1} \\
 &+ \mathbf{A}_1^\bullet \mathbf{A}_2^\bullet : \mathbf{A}_3 \cdots \mathbf{A}_n : \mathbf{A}_{n+1} + \text{Perm}_n \\
 &+ \mathbf{A}_1^\bullet \mathbf{A}_2^\bullet \mathbf{A}_3^\bullet \mathbf{A}_4^\bullet : \mathbf{A}_5 \cdots \mathbf{A}_n : \mathbf{A}_{n+1} + \text{Perm}_n \\
 &+ \cdots \\
 &+ \begin{cases} \mathbf{A}_1^\bullet \mathbf{A}_2^\bullet \mathbf{A}_3^\bullet \mathbf{A}_4^\bullet \cdots \mathbf{A}_{n-1}^\bullet \mathbf{A}_n^\bullet \mathbf{A}_{n+1} + \text{Perm}_n & \text{falls } n \text{ gerade,} \\ \mathbf{A}_1^\bullet \mathbf{A}_2^\bullet \mathbf{A}_3^\bullet \mathbf{A}_4^\bullet \cdots \mathbf{A}_{n-2}^\bullet \mathbf{A}_{n-1}^\bullet \mathbf{A}_n \mathbf{A}_{n+1} + \text{Perm}_n & \text{falls } n \text{ ungerade.} \end{cases}
 \end{aligned} \tag{5.1.78}$$

Dabei bedeutet $+\text{Perm}_n$, daß über alle Permutationen der ersten n Operatoren zu summieren ist.

Falls nun \mathbf{A}_{n+1} ein Vernichter ist, ist unmittelbar klar, daß dies identisch ist mit der Aussage des Wickschen Theorems für $k = n + 1$, denn es ist in dem Fall $: \mathbf{A}_j \cdots \mathbf{A}_{j'} : \mathbf{A}_{n+1} = : \mathbf{A}_j \cdots \mathbf{A}_{j'} \mathbf{A}_{n+1} :$. Die zusätzlich im Wicktheorem für $k = n + 1$ gegenüber (5.1.78) auftretenden Kontraktionen mit irgendeinem der Operatoren $\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_n$ verschwinden allesamt, und damit ist das Wicksche Theorem für diesen Fall bewiesen.

Sei also \mathbf{A}_{n+1} ein Erzeuger. Dann ist dieser Operator ggf. mit allen davorstehenden Operatoren in einem Normalprodukt in (5.1.78) zu vertauschen, wobei jedesmal (5.1.76) für Paare zur Anwendung

zu bringen ist. Daraus entstehen aber offensichtlich sämtliche zusätzlichen Kontraktionen über Paare von Operatoren sowie das vollständig normalgeordnete Produkt wie durch das Wicksche Theorem für $k = n + 1$ behauptet, und damit ist die Behauptung vollständig bewiesen.

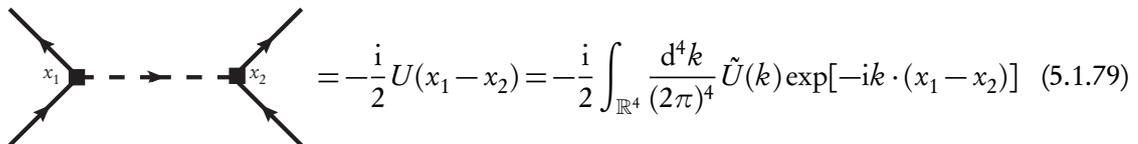
Es ist nun klar, daß gemäß (5.1.74) für Vakuumerwartungswerte von Produkten von Erzeugern und Vernichtern immer nur die vollständig kontrahierten Terme in der letzten Zeile (also stets nur falls k gerade ist) übrigbleiben. Außerdem müssen auch noch gleich viele Erzeuger wie Vernichter in dem betreffenden Term vorhanden sein.

Betrachten wir nun aus (5.1.65) den Beitrag n -ter Ordnung zum T -Matrixoperator, ergibt sich aus dem Wickschen Theorem die folgende Struktur für die störungstheoretischen Matrixelemente, die wir gleich in den folgenden **Raum-Zeit-Feynman-Diagrammregeln** zusammenfassen. Dazu denken wir uns in (5.1.65) jeden Wechselwirkungsoperator in der Form (5.1.13) ausgedrückt. Da über die n Zeitargumente der Wechselwirkungsoperatoren zu integrieren ist, können wir die δ -Distributionen in (5.1.13) weglassen, womit diese Zeitintegrationen allesamt bereits ausgeführt sind.

1. Jeder Beitrag der n -ten Ordnung der Störungsreihe (5.1.65) zum T -Matrixelement

$$iT_{fi}^{(n)} = 2\pi i \mathcal{M}_{ji} \delta^{(4)}(P_i - P_f),$$

wobei P_i (P_f) die Summe der Impulse der einlaufenden (auslaufenden) Teilchen bedeutet, enthält n Wechselwirkungs-Hamiltonoperatoren. Jeden Wechselwirkungsoperator stellen wir durch ein Diagramm der Form



$$= -\frac{i}{2} U(x_1 - x_2) = -\frac{i}{2} \int_{\mathbb{R}^4} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \tilde{U}(k) \exp[-ik \cdot (x_1 - x_2)] \quad (5.1.79)$$

dar, welches die angegebene analytische Bedeutung besitzt. Die gestrichelte Linie steht für ein Wechselwirkungspotential, das zwei eckig gezeichnete Vertexpunkte verbindet. Die Vertexpunkte symbolisieren dabei jeweils einen Raum-Zeitpunkt, wobei das Diagramm überhaupt wie ein Raumzeitdiagramm zu lesen ist, bei dem die Zeit von unten nach oben eingezeichnet ist. Die beiden äußeren einlaufenden Linien symbolisieren die Erzeugungsfeldoperatoren $\psi^\dagger(x_1, \sigma_1)$ und $\psi^\dagger(x_2, \sigma_2)$ und die auslaufenden Linien die Vernichtungsfeldoperatoren $\psi(x_1, \sigma_1)$ und $\psi(x_2, \sigma_2)$ im Wechselwirkungsoperator (5.1.13).

2. Für jedes Teilchen im (asymptotisch freien) Anfangszustand (Endzustand) zeichne man ganz unten (oben) einen runden Vertexpunkt (den Zeitpunkt $t_i \rightarrow -\infty$ (bzw. $t_f \rightarrow +\infty$) repräsentierend) mit einem aus diesem Punkt auslaufenden (in diesen Punkt einlaufenden) Beinchen, das mit Impuls-Spin-Argumenten \vec{p}, σ versehen wird und den Erzeugungsoperator $a^\dagger(\vec{p}, \sigma)$ (bzw. den Vernichtungsoperator $a(\vec{p}, \sigma)$ repräsentiert),



$$\uparrow \vec{p}, \sigma = 1, \quad \downarrow \vec{p}, \sigma = 1. \quad (5.1.80)$$

3. Man füge dem Gesamtausdruck einen Faktor $1/n!$ hinzu.
4. Entsprechend dem Wickschen Theorem entspricht dann der Beitrag zu $T_{fi}^{(n)}$ der Summe über alle Diagramme, die aus den oben beschriebenen Diagrammelementen entstehen, wenn man alle möglichen Verbindungen zwischen Vertexpunkten und/oder äußeren Punkten untereinander

bildet. Diese Linien stehen für die entsprechenden Kontraktionen der Paare von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Dabei können alle Diagramme, in denen ein Paar von eckigen Punkten, die durch eine gestrichelte Linie verbunden sind und zusätzlich noch durch eine innere Teilchenlinie verbunden werden, weggelassen werden, da die Erzeuger und Vernichter innerhalb eines Wechselwirkungs-Hamilton-Operators normalgeordnet sind und daher die entsprechenden Kontraktionen 0 ergeben. Aus demselben Grund kann man Schleifen bildende innere Teilchenlinien, die am gleichen Vertexpunkt beginnen und enden (sog. „Tadpolediagramme“⁶). Weiter braucht man nur Diagramme zu berücksichtigen, die jeweils die Vertexpunkte entsprechend der Pfeilorientierung verbinden, zu berücksichtigen. Die Verbindung zweier Punkte mit Linien, die in entgegengesetzter Pfeilrichtung laufen, entsprechen nämlich entweder der Kontraktion eines Paares mit zwei Vernichtungs- oder mit zwei Erzeugungsoperatoren, die beide verschwinden. Gleichzeitig kann man alle Diagramme, die topologisch identisch sind, zusammengefaßt, weil sie demselben analytischen Ausdruck entsprechen. Dabei ist für jede Topologiekategorie beim Bilden der Kontraktionen die entsprechende Vielfachheit zu bestimmen, die aus den verschiedenen kombinatorischen Möglichkeiten der Kontraktionen hervorgeht, die auf eben diese vorgegebene Topologie führen.

5. Es ist über alle im Diagramm vorhandenen Raum-Zeitpunkte x das Integral $\int_{\mathbb{R}^4} d^4x$ zu nehmen.

Nun müssen wir uns um die analytische Bedeutung der verschiedenen vorkommenden Kontraktionen kümmern. Diese werden der obigen Erklärung wegen durch Linien, die zwei innere und/oder äußere Punkte verbinden, repräsentiert. Wir sprechen der Kürze halber von inneren Linien, wenn sie zwei eckige Wechselwirkungspunkte (mit verschiedenen Raum-Zeit-Koordinaten) verbinden und von äußeren einlaufenden oder auslaufenden Linien, wenn sie einen runden Punkt mit einer aus diesem Punkt auslaufenden (bzw. in diesen Punkt einlaufenden) Linie verbinden. Dabei ist wieder zu unterscheiden, ob der zweite Punkt selbst ein innerer oder äußerer Punkt ist. Wir haben also folgende Fälle:

1. Linien, die einen äußeren Vertexpunkt mit einer einlaufenden und einen äußeren Vertexpunkt mit einer auslaufenden Linie verbinden: Diese stehen für die Kontraktion

$$\begin{array}{c} \bullet \\ \uparrow \\ \downarrow \\ \bullet \end{array} \begin{array}{l} \vec{p}', \sigma' \\ \\ \\ \vec{p}, \sigma \end{array} = \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{p}') \delta_{\sigma\sigma'} \quad (5.1.81)$$

Linien, die irgendwelche zwei äußeren Vertexpunkte (wobei beide Linien entweder ein- oder auslaufen) verbinden, verschwinden, weil dann zwei Erzeuger oder zwei Vernichter kontrahiert werden.

2. Für Linien, die einen inneren mit einem äußeren Punkt verbinden, erhalten wir die folgenden

⁶Tadpole=engl. Kauquappe

beiden Regeln:

$$\begin{array}{c}
 \blacksquare x, \tilde{\sigma} \\
 \uparrow \\
 \bullet \vec{p}, \sigma \\
 \bullet \vec{p}, \sigma \\
 \uparrow \\
 \blacksquare x, \tilde{\sigma}
 \end{array}
 = \psi^\bullet(x, \tilde{\sigma}) \mathbf{a}^{\dagger\bullet}(\vec{p}, \sigma) = \frac{\exp(-i\vec{p} \cdot x)}{(2\pi)^{3/2}} \delta_{\sigma\tilde{\sigma}}$$

$$\begin{array}{c}
 \bullet \vec{p}, \sigma \\
 \bullet \vec{p}, \sigma \\
 \uparrow \\
 \blacksquare x, \tilde{\sigma}
 \end{array}
 = \mathbf{a}^\bullet(\vec{p}, \sigma) \psi^\bullet(x, \tilde{\sigma}) = \frac{\exp(+i\vec{p} \cdot x)}{(2\pi)^{3/2}} \delta_{\sigma', \tilde{\sigma}}.$$
(5.1.82)

3. Es werden zwei innere Vertexpunkte verbunden. Dies steht für die Kontraktion eines zeitgeordneten Produkts von Impulsraumfeldoperatoren:

$$i\Delta(x_1 - x_2) \delta_{\sigma_1 \sigma_2} := \mathcal{T}_c \psi^\bullet(x_1, \sigma_1) \psi^{\dagger\bullet}(x_2, \sigma_2). \quad (5.1.83)$$

Wie wir gleich sehen werden, ist es bequemer, diesen Ausdruck als vierdimensionales Fourier-Integral auszudrücken. Dazu setzen wir wieder die Modenentwicklung (5.1.8) für die Feldoperatoren ein und berechnen die Kontraktion und werten eines der Impulsintegrale aus. Dies liefert zunächst

$$i\Delta(x_1 - x_2) = \Theta(x_1^0 - x_2^0) \int_{R^3} \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \exp[-i\vec{k}_1 \cdot (x_1 - x_2)] \Big|_{k_1^0 = E(\vec{k}_1)}. \quad (5.1.84)$$

Nun gilt aber

$$\Theta(x_1^0 - x_2^0) \exp[-i(x_1^0 - x_2^0)E(\vec{p})] = i \int_{\mathbb{R}} \frac{dk_0}{2\pi} \frac{\exp[-i(x_1^0 - x_2^0)k_0]}{k_0 - E(\vec{p}) + i0^+}. \quad (5.1.85)$$

Diese Formel beweist man, indem man das Integral als Wegintegral in der komplexen p_0 -Ebene betrachtet. Es läßt sich dann mit Hilfe des Residuensatzes auswerten, indem man sich den Integrationsweg durch einen unendlich großen Halbkreis geschlossen denkt, und zwar für $x_1^0 - x_2^0 > 0$ in der unteren bzw. für $x_1^0 - x_2^0 < 0$ in der oberen Halbebene (s. Abb. 5.3). Wegen der Exponentialfunktionen tragen dann nämlich bei dieser in beiden Fällen die Halbkreise nichts zum Integral bei. Beachten wir weiter, daß beim Schließen des Weges in der unteren Halbebene der Integrationsweg im Uhrzeigersinne (also im mathematisch negativen Sinne) durchlaufen wird und der Pol bei $p_0 = E(\vec{p}) - i0^+$ in der unteren Halbebene zu lokalisieren ist, erhält man gerade (5.1.85) (vgl. auch die ausführliche Diskussion in [CH10]). In der oberen Halbebene liegen hingegen keine Pole, so daß das Integral beim Schließen in der oberen Halbebene verschwindet.

Definieren wir also den **Propagator** in der Viererimpulsdarstellung durch

$$\tilde{\Delta}(k) = \frac{1}{k_0 - E(\vec{k}) + i0^+}, \quad (5.1.86)$$

folgt als Diagrammregel für die Kontraktion zweier zeitgeordneter Feldoperatoren schließlich

$$\begin{array}{c}
 \blacksquare x_1, \sigma_1 \\
 \uparrow \\
 \blacksquare x_2, \sigma_2
 \end{array}
 = i\Delta(x_1 - x_2) \delta_{\sigma_1 \sigma_2} = i\delta_{\sigma_1 \sigma_2} \int_{\mathbb{R}^4} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \tilde{\Delta}(k) \exp[-ik \cdot (x_1 - x_2)].$$
(5.1.87)

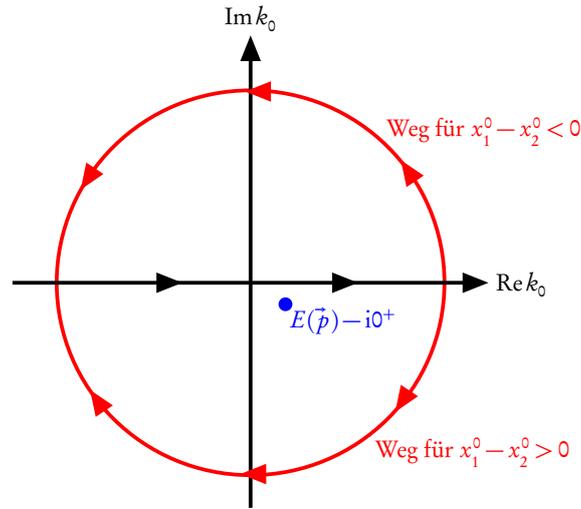


Abbildung 5.3: Integrationswege zur Auswertung des Integrals (5.1.85): Für $x_1^0 - x_2^0 < 0$ muß der Weg in der oberen und für $x_1^0 - x_2^0 > 0$ in der oberen k_0 -Halbebene geschlossen werden, damit aufgrund der Exponentialfunktion im Integranden die hinzugefügten rot gezeichneten Halbkreise nichts zum Integral beitragen. Da der Integrand in (5.1.85) nur einen Pol in der unteren Halbebene bei $k_0 = E(\vec{p}) - i0^+$ besitzt, ergibt sich nach dem Residuensatz nur für $x_1^0 - x_2^0 > 0$ ein von 0 verschiedenes Ergebnis, und zwar der in (5.1.85) angegebene Wert, wobei wir berücksichtigt haben, daß der Integrationsweg in negativer Richtung orientiert ist, was einen Faktor $(-2\pi i)$ im Residuensatz ergibt.

Setzen wir nun in irgendein nicht trivial verschwindendes Diagramm all diese analytischen Ausdrücke ein, so lassen sich sämtliche Raum-Zeit-Integrale geschlossen ausführen, wenn man die Fourierdarstellungen (5.1.87) für die Propagatorlinien einsetzt. Da auch die auftretenden äußeren Linien gemäß (5.1.82) einer Exponentialfunktion entsprechen, ergibt jede dieser Integrationen über ein Raum-Zeit-Argument x an einem Vertex

$$\int_{\mathbb{R}^4} d^4x \exp[i(k + p_1 - p_2) \cdot x] = (2\pi)^4 \delta^{(4)}(k + p_1 - p_2), \quad (5.1.88)$$

wenn p_1 dem Viererimpuls der einlaufenden, p_2 dem der auslaufenden Teilchenlinie und k dem Viererimpuls im Fourierintegral für das Potential entspricht. Dabei kann man den Viererimpulsübertrag entlang der gestrichelten Wechselwirkungslinie beliebig orientieren, da das Potential \tilde{U} nur vom Betrag dieses Impulses abhängt. Integrieren wir schließlich jede dieser δ -Funktion über diesen zur Wechselwirkungslinie gehörigen Viererimpuls k aus, bleibt schließlich eine der Gesamtenergie-Impulserhaltung entsprechende Funktion $(2\pi)^4 \delta^{(4)}(P_{\text{ein}} - P_{\text{aus}})$ übrig, wie wir es bereits oben in (5.1.38) angenommen haben. Diese δ -Funktion können wir also gleich herauskürzen. Über sämtliche Impulse von Propagatorlinien, die durch die Viererimpulserhaltung an den Vertizes und die Gesamtenergie-Impulsbilanz nicht festgelegt sind, ist mit $\int_{\mathbb{R}^4} d^4p / (2\pi)^4$ zu integrieren. Über alle Spin-z-Quantenzahlen σ an inneren Punkten ist zu summieren.

Jetzt können wir die **Feynman-Regeln im Impulsraum** angeben, die direkt für die störungstheoretischen Beiträge zu den Matrixelementen \mathcal{M}_{fi} gelten. Wir brauchen dabei auch nicht mehr zwischen eckigen und runden Vertexpunkten zu unterscheiden. Wir haben aufgrund der obigen Überlegungen folgende **Diagrammregeln für die Berechnung der Matrix-Elemente**:

- Die Diagramme, die den Beitrag n -ter Ordnung der Bornreihe zum Matrixelement $2\pi i \mathcal{M}_{fi}$ re-

präsentieren, enthalten n fundamentale Wechselwirkungsdiagrammelemente mit jeweils zwei Vertices:

$$= -\frac{i}{2} \tilde{U}(k_1 - k'_1). \quad (5.1.89)$$

An jedem der beiden Vertexpunkte gilt die Viererimpulserhaltung, wie angegeben. Weiter erhält jeder Beitrag zu $2\pi i \mathcal{M}_{fi}^{(n)}$ einen Faktor $(2\pi)^4/n!$.

- Die Einteilchenanfangszustände im antisymmetrisierten Vielteilchenproduktzustand $|i\rangle$ werden durch äußere Punkte mit Beinchen symbolisiert, die ganz unten (entsprechend der Anfangszeit $t_i \rightarrow -\infty$ für den asymptotisch freien In-Zustand) in das Diagramm einlaufen. Entsprechend hat man für die entsprechenden Teilchen im Endzustand $|f\rangle$ ganz oben äußere Punkte mit aus dem Diagramm auslaufenden Beinchen anzubringen. Ein äußeres ein- oder auslaufendes Beinchen im Diagramm besitzt dann aufgrund der obigen Betrachtungen jeweils die folgende Bedeutung:

$$p = \frac{\delta_{\sigma\sigma'}}{(2\pi)^{3/2}} \quad (\text{äußere Linie}). \quad (5.1.90)$$

Die Viererimpulse an äußeren Linien sind „on shell“, d.h. es gilt die Energie-Impulsbeziehung $p^0 = E(\vec{p}) = \vec{p}^2/(2m)$ für freie Teilchen.

- Es sind alle topologisch verschiedenen Verbindungen von Paaren von Linien entsprechend der Pfeilrichtung (Kontraktionen) zu bilden, wobei für jede Topologiekategorie die kombinatorische Vielfachheit des Diagramms zu zählen ist. Zusammen mit dem Faktor $1/n!$ bezeichnet man diesen Faktor als **Symmetriefaktor** des Diagramms.

Eine innere Linie steht für einen (zeitgeordneten) Propagator⁷:

$$p = i\delta_{\sigma'\sigma} \tilde{\Delta}(p) \quad (\text{innere Linie}). \quad (5.1.91)$$

- Es ist über alle Viererimpulse p an inneren Linien, die nicht durch die Energie-Impulserhaltung an den Vertices und die Gesamt-Energie-Impuls-Erhaltung festgelegt sind, mit $\int_{\mathbb{R}^4} d^4 p / (2\pi)^4$ zu integrieren. Über alle Spin-z-Indizes an inneren Vertexpunkten ist zu summieren.
- Diagramme, die sich nur durch Vertauschung einer ungeraden Anzahl von Paaren äußerer Linien unterscheiden, einen relativen Faktor (-1) . Diese Regel rührt von den Vorzeichenregeln für die

⁷In der hier betrachteten nichtrelativistischen Theorie für Streuprozesse stimmen dabei, wie oben gesehen, der zeitgeordnete mit dem retardierten Propagator der freien Schrödingergleichung überein

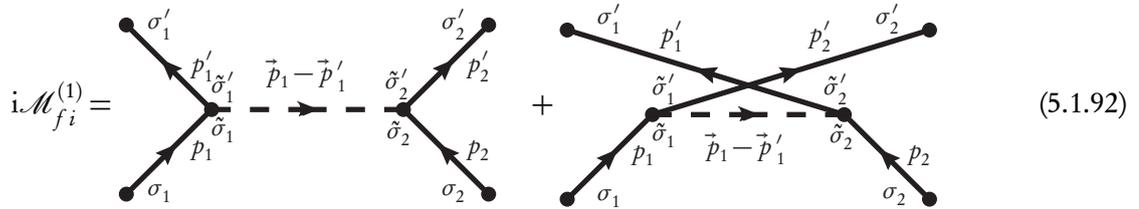
Kontraktionen fermionischer Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren her⁸.

- Diagramme mit Propagatorlinien, die die Vertizes innerhalb eines einzelnen Wechselwirkungsanteils (also zwei Vertizes mit einer sie verbindenden Wechselwirkungslinie) verbinden, oder eine geschlossene Schleife an einem einzelnen Vertex („Tadpole-Diagramm“) können weggelassen werden, weil in diesem Fall die entsprechenden Kontraktionen über normalgeordnete Operatorpaare innerhalb eines Wechselwirkungsoperators erfolgen und daher identisch verschwinden.

Diagramme, die wenigstens eine Schleife enthalten, die sich aus einer zusammenhängenden Folge von Propagatorlinien zusammensetzt, verschwinden ebenfalls.

5.1.6 Anwendung auf das Yukawa- und Coulombpotential

Wir betrachten nun als Beispiel die erste Ordnung der Störungstheorie. Hier liegen aufgrund der Energie-Impulserhaltung an den beiden Vertices alle Energien und Impulse im Diagramm durch die äußeren Impulse fest. Wir brauchen also kein Impulsintegral auszuführen. Es gibt zwei Topologieklassen von Diagrammen, die sich lediglich durch die Vertauschung der auslaufenden Linien voneinander unterscheiden:



$$i\mathcal{M}_{fi}^{(1)} = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} \quad (5.1.92)$$

Bestimmen wir zunächst den Symmetriefaktor im linken Diagramm („direkter Term“). Dazu denken wir uns die äußeren Beinchen zunächst noch abgetrennt und zählen, auf wie viele Arten jedes der beiden Diagramme wir durch die entsprechenden Kontraktionen zusammengesetzt werden kann. Das erste einlaufende Beinchen können wir mit jedem der beiden einlaufenden Beinchen des Wechselwirkungsdiagrammteils verbinden, was einen Faktor 2 liefert. Alle Kontraktionen der anderen äußeren Beinchen sind dann eindeutig durch die Topologie festgelegt. Dieselbe Überlegung gilt auch für das zweite Diagramm („Austauschterm“). Folglich haben wir insgesamt einen Faktor 2. Jetzt brauchen wir nur noch die Diagramme von oben nach unten abzulesen und den einzelnen Diagrammelementen die oben beschriebenen analytischen Ausdrücke zuzuordnen (*Übung!*). Dann erhalten wir schließlich für das linke Diagramm

$$i\mathcal{M}_{fi}^{(1,1)} = -\frac{i}{2} \cdot 2 \cdot \delta_{\sigma'_1 \tilde{\sigma}'_1} \delta_{\tilde{\sigma}'_1 \tilde{\sigma}_1} \delta_{\tilde{\sigma}_1 \sigma_1} \frac{\tilde{V}(\vec{p}_1 - \vec{p}'_1)}{(2\pi)^3} \delta_{\sigma'_2 \tilde{\sigma}'_2} \delta_{\tilde{\sigma}'_2 \tilde{\sigma}_2} \delta_{\tilde{\sigma}_2 \sigma_2} = -i \delta_{\sigma'_1 \sigma_1} \delta_{\sigma'_2 \sigma_2} \frac{\tilde{V}(\vec{p}_1 - \vec{p}'_1)}{(2\pi)^3}. \quad (5.1.93)$$

Dabei haben wir für die Spinindizes die Einsteinsche Summationskonvention verwendet.

Das zweite Diagramm ergibt sich daraus einfach durch Vertauschen von (\vec{p}'_1, σ'_1) mit (\vec{p}'_2, σ'_2) sowie ein umgekehrtes Vorzeichen aufgrund der Vertauschungsregel für äußere Fermionenbeinchen, d.h.

$$i\mathcal{M}_{fi}^{(1,2)} = +i \delta_{\sigma'_2 \sigma_1} \delta_{\sigma'_1 \sigma_2} \frac{\tilde{V}(\vec{p}_1 - \vec{p}'_1)}{(2\pi)^3}. \quad (5.1.94)$$

⁸In der relativistischen Theorie ergibt sich als weitere Vorzeichenregel, daß bei einem Diagramm für jede geschlossene Schleife, die nur aus Fermionenpropagatorlinien besteht, ein Faktor (-1) zu berücksichtigen ist. Man überlegt sich in der betrachteten nichtrelativistischen Vakuumfeldtheorie leicht, indem man die Feynmanregeln im Raumzeitbereich anwendet, daß solche Diagramme stets verschwinden, da hier der zeitgeordnete Propagator mit dem retardierten Propagator übereinstimmt. Da nun in einer Schleife dieser Art wenigstens eine im Zeitargument eines Propagators auftretende Zeitdifferenz stets negativ ist, liefert dieser Propagator einen Faktor 0.

In der ersten Ordnung der Störungstheorie (Bornsche Näherung) ist also aufgrund von (5.1.54)

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega_{\text{cm}}} &= \frac{m^2}{4(2\pi)^2} \left| \delta_{\sigma'_1\sigma_1} \delta_{\sigma'_2\sigma_2} \tilde{V}(\vec{p}_1 - \vec{p}'_1) - \delta_{\sigma'_2\sigma_1} \delta_{\sigma'_1\sigma_2} \tilde{V}(\vec{p}_1 - \vec{p}'_2) \right|^2 \\ &= \frac{m^2}{4(2\pi)^2} \left[\delta_{\sigma'_1\sigma_1} \delta_{\sigma'_2\sigma_2} \tilde{V}^2(\vec{p}_1 - \vec{p}'_1) + \delta_{\sigma'_1\sigma_2} \delta_{\sigma'_2\sigma_1} \tilde{V}^2(\vec{p}_1 - \vec{p}'_2) - \right. \\ &\quad \left. 2\delta_{(\sigma'_1\sigma_1)} \delta_{(\sigma'_2\sigma_2)} \delta_{(\sigma'_2\sigma_1)} \delta_{(\sigma'_1\sigma_2)} \delta_{(\sigma'_2\sigma_1)} \tilde{V}(\vec{p}_1 - \vec{p}'_1) \tilde{V}(\vec{p}_1 - \vec{p}'_2) \right]. \end{aligned} \quad (5.1.95)$$

Dabei haben wir berücksichtigt, daß die hier betrachteten Yukawa- und Coulomb-Potentiale gemäß (5.1.18) reelle Fouriertransformierte besitzen. Die um die Indizes gesetzten Klammern im letzten Ausdruck, dem **Interferenztterm**, deuten an, daß hier nicht gemäß der Einsteinschen Summationskonvention zu summieren ist. Dies ist der Streuquerschnitt für **polarisierte Teilchen**, d.h. die Spineinstellungen werden sowohl im Anfangszustand (σ_1 und σ_2) präzise festgelegt als auch im Endzustand (σ'_1 und σ'_2) exakt gemessen. Solche Experimente sind sehr aufwendig. Daher werden gewöhnlich Streuexperimente mit total unpolarisierten Teilchen durchgeführt, und die Spins der gestreuten Teilchen werden nicht erfaßt.

Dann müssen wir über die Spinstellungen im Anfangszustand mitteln, wobei jede Spinkombination gleichgewichtet wird, und über die Spins im Endzustand summieren. Dann erhalten wir

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega_{\text{cm}}} \right)_{\text{unpol}} = \frac{m^2}{16(2\pi)^2} 4 \left[\tilde{V}^2(\vec{p}_1 - \vec{p}'_1) + \tilde{V}^2(\vec{p}_1 - \vec{p}'_2) - \tilde{V}(\vec{p}_1 - \vec{p}'_1) \tilde{V}(\vec{p}_1 - \vec{p}'_2) \right]. \quad (5.1.96)$$

Betrachten wir nun das Yukawapotential (5.1.18). Dabei beachten wir, daß im Schwerpunktsystem $\vec{p}_1 = -\vec{p}_2 = \vec{p}_{\text{cm}}$, $\vec{p}'_1 = -\vec{p}'_2 = \vec{p}'_{\text{cm}}$ und $\vec{p}_{\text{cm}}^2 = (\vec{p}'_{\text{cm}})^2$ ist und daher

$$\begin{aligned} (\vec{p}_1 - \vec{p}'_1)^2 &= 2mE_{\text{cm}}(1 - \cos\vartheta_{\text{cm}}) = 4mE_{\text{cm}} \sin^2\left(\frac{\vartheta_{\text{cm}}}{2}\right), \\ (\vec{p}_1 - \vec{p}'_1)^2 &= 2mE_{\text{cm}}(1 + \cos\vartheta_{\text{cm}}) = 4mE_{\text{cm}} \cos^2\left(\frac{\vartheta_{\text{cm}}}{2}\right) \end{aligned} \quad (5.1.97)$$

gilt. Dabei ist E_{cm} die **totale Energie im Schwerpunktsystem**, also $E_{\text{cm}} = E(\vec{p}_1) + E(\vec{p}_2) = 2E(\vec{p}_{\text{cm}}) = \vec{p}_{\text{cm}}^2/m$. Setzen wir dies in (5.1.96) ein, erhalten wir schließlich im Limes $\Lambda \rightarrow 0$, d.h. wenn wir den Grenzfall eines Coulomb-Potentials betrachten,

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega_{\text{cm}}} \right)_{\text{unpol}} = \frac{\alpha^2}{(4E_{\text{cm}})^2} \left[\frac{1}{\sin^4(\vartheta_{\text{cm}}/2)} + \frac{1}{\cos^4(\vartheta_{\text{cm}}/2)} - \frac{1}{\sin^2(\vartheta_{\text{cm}}/2) \cos^2(\vartheta_{\text{cm}}/2)} \right]. \quad (5.1.98)$$

Dabei haben wir die vom verwendeten elektromagnetischen Maßsystem unabhängige dimensionslose **Feinstrukturkonstante** α (für Elektronen oder Protonen ist $q = \pm e$ und $\alpha \simeq 1/137$), die im hier verwendeten Heaviside-Lorentzschen Einheitensystem durch $\alpha = q^2/(4\pi)$ gegeben ist. Die Formel (5.1.98) heißt **Mott-Formel** für die Streuung zweier unpolarisierter Spin-1/2-Teilchen.

Hätten wir die Streuung zweier unterscheidbarer Spin-1/2-Teilchen betrachtet, hätten wir (bis auf Vorfaktoren) nur den ersten Term in der Klammer erhalten. Würde man nun in einer naiven klassischen Wahrscheinlichkeitsbetrachtung die Ununterscheidbarkeit der Teilchen lediglich dadurch berücksichtigen, daß wir einfach über **Wahrscheinlichkeiten** der beiden ununterscheidbaren Situationen, die durch

die Diagramme in (5.1.92) veranschaulicht werden, summieren, hätten wir die beiden ersten Terme erhalten (**inkohärente Summe**). Die Quantentheorie besagt aber, daß wir nicht die Wahrscheinlichkeiten sondern die Amplituden zu addieren und *dann* zu quadrieren haben, wie es ja auch in unserem Diagrammformalismus von selbst herausgekommen ist. Dadurch entsteht der **Interferenzterm** in der eckigen Klammer von (5.1.98). Das —Zeichen rührt dabei offensichtlich von der Regel für die Vertauschung der beiden äußeren **Fermionenlinien** her. Durch Messung des differentiellen Streuquerschnittes (5.1.98) können wir also überprüfen, daß z.B. Elektronen tatsächlich Fermionen sind. Wären sie nämlich Bosonen, hätten wir exakt die gleichen Feynmanregeln erhalten, bis auf die Vorzeichenregeln für die Schleifen und die Vertauschung von äußeren Beinchen, da beim Wicktheorem für Bosonen keine Vorzeichenänderungen beim Permutieren von Erzeugern und Vernichtern auftreten. Es stellt sich freilich heraus, daß Elektronen tatsächlich Fermionen sind.

Weiter müssen wir noch betonen, daß bei der Berechnung des totalen Streuquerschnittes nur der Bereich $\vartheta_{\text{cm}} \in [0, \pi/2]$ zu betrachten ist, da wegen der Ununterscheidbarkeit der Teilchen der Rest des Raumwinkels zur selben Konfiguration im Endzustand führt. Freilich kann man aber auch über $\vartheta_{\text{cm}} \in [0, \pi]$ integrieren und dann das Resultat halbieren.

Es ist charakteristisch, daß für das **Coulomb-Potential** gemäß (5.1.98) der totale Streuquerschnitt divergiert. Dies liegt daran, daß ein reines Coulombpotential in zweierlei Hinsicht unrealistisch ist: Zum einen finden sich immer Ladungen in der Umgebung der Teilchen, die zu einer **Abschirmung** des Coulombpotentials führen. Das führt dazu, daß effektiv doch wieder ein Yukawa-Potential wirksam wird. Dieses Phänomen heißt **Debye-Abschirmung** und wird in der Spezialliteratur zur Vielteilchentheorie ausführlich behandelt (s. z.B. [FW71, AGD76]).

Zum anderen ist die elastische Streuung geladener Teilchen insofern unrealistisch als beschleunigte Ladungen immer auch elektromagnetische Wellen abstrahlen. Im Bild der (relativistischen) Quantenfeldtheorie entspricht dies der Erzeugung von Photonen, und selbst bei nichtrelativistischen Elektronen werden stets auch sehr niederenergetische Photonen abgestrahlt. Ein Detektor für Elektronen mißt die Energie derselben immer nur mit einer bestimmten Genauigkeit ΔE , so daß auch Streuvorgänge mitzuzählen sind, wo neben der elastischen Streuung auch alle Prozesse zu betrachten sind, bei der auch niederenergetische Photonen mit einer Gesamtenergie $< \Delta E$ abgestrahlt werden, was aber von den Detektoren wegen deren endlicher Energieauflösung nicht erfaßt wird. Es stellt sich dann heraus, daß bei Berücksichtigung dieses Effekts, ein endlicher totaler Streuquerschnitt resultiert [BN37, PS95]. Wir können darauf in dieser Vorlesung nicht näher eingehen.

Kapitel 6

Einführung in die relativistische Quantentheorie

In diesem Kapitel wollen wir die Anfangsgründe der relativistischen Quantentheorie behandeln. Nachdem wir die wesentlichen Grundlagen zur **relativistischen Raumzeitstruktur** sowie die klassische Elektrodynamik in **relativistisch kovarianter Schreibweise** zusammengefaßt haben, betrachten wir zunächst die freie **Dirac-Gleichung**, die nicht wechselwirkende Spin-1/2-Teilchen beschreibt. Wie wir sehen werden, verlangt die relativistische Theorie die Einführung von **Antiteilchen**, um die grundlegenden Forderungen der **Mikrokausalität und Stabilität des Vakuums** erfüllen zu können.

Dann wenden wir uns der **Quantisierung des freien elektromagnetischen Feldes** zu, wobei wir die charakteristischen Probleme, die aus der Eichinvarianz resultieren, durch die vollständige Eichfixierung in der **Coulomb-Eichung**, beseitigen.

Schließlich gehen wir mit Hilfe des **Prinzips der minimalen Kopplung** zur **Quantenelektrodynamik**, also der Theorie wechselwirkender Elektronen, Positronen (oder Muonen und Antimuonen) und Photonen über. Nach einer Herleitung der Feynmanregeln schließen wir die Vorlesung mit einer Berechnung einiger Streuquerschnitte in niedrigster Ordnung der Störungstheorie (Elektron-Positron-Annihilation zu Muonen, elastische Elektronenstreuung, Compton-Streuung etc.).

6.1 Relativistische Raumzeitstruktur und Lorentzgruppe

Wir setzen voraus, daß der Leser mit den Grundlagen der klassischen relativistischen Mechanik und Elektrodynamik vertraut ist. Dieser erste Abschnitt soll dazu dienen, die wichtigsten Grundbegriffe zu wiederholen und die Notation der Vierervektoren und -tensoren in diesem Teil des Skripts einzuführen. Wir bedienen uns weiterhin des **natürlichen Einheitensystems**, indem wir das (modifizierte) Plancksche Wirkungsquantum und die Lichtgeschwindigkeit zu 1 setzen:

$$\hbar = c = 1. \quad (6.1.1)$$

Üblicherweise ist es bequem, Massen, Energien und Impulse in MeV oder GeV anzugeben und Längen in fm (1 fm = 1 femto-meter = 1 Fermi = 10^{-15} m). Zur Umrechnung von Zeiten und Längen zwischen fm und MeV^{-1} benötigen wir dann lediglich $[N^{+10}]$

$$\hbar c = 197.3269631(49) \text{ MeV fm}. \quad (6.1.2)$$

die in Klammern stehenden Ziffern geben dabei die Unsicherheit der Größe auf die entsprechenden letzten Dezimalstellen an.

Die relativistische Raumzeit ist ein vierdimensionaler reeller Punktraum, auf dem eine Fundamentalform („Pseudometrik“) der Signatur $(1, 3)$ definiert ist, d.h. führt man ein bzgl. dieser Fundamentalform orthonormiertes Basissystem in einem beliebig gewählten Bezugspunkt der Raumzeit ein, können wir jeden Raumzeitpunkt umkehrbar eindeutig durch die vier **kontravarianten Vektorkomponenten** x^μ ($\mu \in \{0, 1, 2, 3\}$) beschreiben, und die Fundamentalform besitzt die **kovarianten Tensorkomponenten**

$$(g_{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (6.1.3)$$

Der \mathbb{R}^4 mit dieser Fundamentalform heißt **Minkowskiraum**. Jedes Bezugssystem, in dem die Fundamentalform diese Komponenten besitzt, ist ein **Inertialsystem**. Im folgenden schreiben wir **kontravariante Vektorkomponenten** auch als Spaltenvektor

$$(x^\mu) = \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^0 \\ \vec{x} \end{pmatrix}. \quad (6.1.4)$$

Die Fundamentalform definiert das **Minkowskiprodukt** zwischen zwei Vierervektoren:

$$x \cdot y := g_{\mu\nu} x^\mu y^\nu = x^0 y^0 - \vec{x} \cdot \vec{y}, \quad (6.1.5)$$

wobei über gegenständige gleichnamige Indizes summiert wird (**Einsteinsche Summationskonvention**) und $\vec{x} \cdot \vec{y} = x^1 y^1 + x^2 y^2 + x^3 y^3$ das übliche Skalarprodukt im Euklidischen \mathbb{R}^3 bezeichnet. Die kovarianten Komponenten eines Vektors, die wir in einem Spaltenvektor anordnen, erhält man durch „Indexziehen“ mit dem Fundamentaltensor,

$$(x_\mu) = (g_{\mu\nu} x^\nu) = (x^0, -x^1, -x^2, -x^3) = (x^0, -\vec{x}^t), \quad (6.1.6)$$

wobei ein hochgestelltes t an einem Vektor oder einer Matrix die Transposition bezeichnet, d.h. \vec{x}^t ist der Zeilenvektor (x^1, x^2, x^3) .

Entsprechend werden mit $g^{\mu\nu}$ die kontravarianten Komponenten der Fundamentalform bezeichnet. Da für jeden Vektor

$$x^\mu = g^{\mu\nu} x_\nu = g^{\mu\nu} g_{\nu\sigma} x_\sigma \quad (6.1.7)$$

gelten soll, muß notwendig

$$g^{\mu\nu} g_{\nu\sigma} = \delta^\mu_\sigma = \begin{cases} 1 & \text{für } \mu = \nu \\ 0 & \text{für } \mu \neq \nu \end{cases} \quad (6.1.8)$$

sein, so daß

$$(g^{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (6.1.9)$$

ist.

Die Vektoren $x \in \mathbb{R}^4$ fallen in drei Klassen:

$$x \cdot x =: x^2 \begin{cases} > 0 & \text{zeitartig,} \\ = 0 & \text{lichtartig,} \\ < 0 & \text{raumartig.} \end{cases} \quad (6.1.10)$$

Eine lineare Transformation des Minkowskiraums, der die Fundamentalform zwischen beliebigen Vektoren invariant läßt, heißt **Lorentztransformation**. Wie jede lineare Abbildung wird eine Lorentztransformation bzgl. einer Basis durch eine Matrix $(\Lambda^\mu{}_\nu)$ repräsentiert, d.h. die kontravarianten Komponenten eines Vektors transformieren sich gemäß

$$x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu. \quad (6.1.11)$$

Damit nun die Minkowskiprodukte zwischen beliebigen Vektoren ungeändert bleiben, muß gelten

$$g_{\mu\nu} x'^\mu y'^\nu = g_{\mu\nu} \Lambda^\mu{}_{\mu'} \Lambda^\nu{}_{\nu'} x^{\mu'} y^{\nu'} = g_{\mu'\nu'} x^{\mu'} y^{\nu'} \quad (6.1.12)$$

gelten. Da wir dies für beliebige $x, y \in \mathbb{R}^4$ verlangen, ist also notwendig

$$g^{\mu\nu} \Lambda^\mu{}_{\mu'} \Lambda^\nu{}_{\nu'} = g_{\mu'\nu'}. \quad (6.1.13)$$

Dafür können wir auch

$$(g_{\mu\nu} \Lambda^\mu{}_{\mu'} g^{\mu'\sigma}) \Lambda^\nu{}_{\nu'} = \Lambda_\nu{}^\sigma \Lambda^\nu{}_{\nu'} = \delta_{\nu'}^\sigma \quad (6.1.14)$$

schreiben. Dies bedeutet, daß eine Lorentztransformation invertierbar ist und

$$(\Lambda^{-1})^\mu{}_\nu = \Lambda_\nu{}^\mu \quad (6.1.15)$$

sein muß. In Matrix-Vektorschreibweise bedeutet dies

$$\Lambda^{-1} = g \Lambda^t g, \quad (6.1.16)$$

Wobei wir Lorentztransformationsmatrizen immer als diejenige Form verstehen, wo der erste Index oben und der zweite Index unten stehen. Offenbar beschreibt umgekehrt auch jede Matrix Λ , die (6.1.16) erfüllt, eine Lorentztransformation.

Daraus folgt auch das Transformationsverhalten für die kovarianten Komponenten eines Vektors. Es gilt nämlich

$$x'_\mu = g_{\mu\nu} x'^\nu = g_{\mu\nu} \Lambda^\nu{}_\rho x^\rho = g_{\mu\nu} \Lambda^\nu{}_\rho g^{\rho\sigma} x_\sigma = (g \Lambda g)_\mu{}^\sigma x_\sigma = x_\sigma (g \Lambda^t g)^\sigma{}_\mu \stackrel{(6.1.16)}{=} x_\sigma (\Lambda^{-1})^\sigma{}_\mu. \quad (6.1.17)$$

Man sagt dazu auch, daß sich die kovarianten Komponenten **kontragredient** zu den kontravarianten Komponenten transformieren.

Entsprechend bezeichnet man Ausdrücke der Art $T^{\mu\nu}{}_{\sigma\rho}$ als Tensoren (3. Stufe). Ihr Transformationsverhalten entspricht dem von kontra- und kovarianten Vektorkomponenten, entsprechend der oberen bzw. unteren Stellung der Indizes. Für den Tensor 3. Stufe gilt also z.B.

$$T'^{\mu'\nu'}{}_{\sigma'\rho'} = \Lambda^{\mu'}{}_\mu (\Lambda^{-1})^\nu{}_{\nu'} \Lambda^{\sigma'}{}_\sigma T^{\mu\nu}{}_{\sigma\rho}. \quad (6.1.18)$$

Die Lorentztransformationen mit der Hintereinanderausführung (entsprechend der Matrixmultiplikation der dazugehörigen Matrizen) bilden eine Gruppe, denn mit zwei Lorentztransformationen Λ_1 und Λ_2 ist auch $\Lambda_1 \Lambda_2$ eine Lorentztransformation, denn wegen $g^2 = \mathbb{1}$ ist

$$g(\Lambda_1 \Lambda_2)^t g = g \Lambda_2^t \Lambda_1^t g = (g \Lambda_2^t g)(g \Lambda_1^t g) = \Lambda_2^{-1} \Lambda_1^{-1} = (\Lambda_1 \Lambda_2)^{-1}, \quad (6.1.19)$$

so daß $\Lambda_1 \Lambda_2$ die Bedingung (6.1.16) erfüllt.

Die **physikalische Bedeutung der Lorentztransformationen** wird unmittelbar einsichtig, wenn man die beiden wichtigsten Spezialfälle betrachtet, nämlich

- (i) **Drehungen** der rein räumlichen Basis eines beliebigen Orthonormalsystems und
- (ii) Gleichförmig geradlinige Bewegung eines solchen Bezugssystems gegen ein anderes („drehungsfreier **Lorentzboost**“).

Ein Beispiel für Drehungen ist eine Drehung um die 3-Achse um den Winkel $\phi \in [0, 2\pi)$:

$$D_3(\phi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ 0 & -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (6.1.20)$$

Ein drehungsfreier Lorentzboost entlang der 3-Achse besitzt die Parametrisierung

$$B_3(\eta) = \begin{pmatrix} \cosh \eta & 0 & 0 & -\sinh \eta \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\sinh \eta & 0 & 0 & \cosh \eta \end{pmatrix}. \quad (6.1.21)$$

Dabei ist $\eta \in \mathbb{R}$. Man weist mit Hilfe der Beziehung $\cosh^2 \eta - \sinh^2 \eta = 1$ leicht nach, daß diese Matrix in der Tat die Bedingung (6.1.16) an eine Lorentztransformation erfüllt (*Übung!*). Um die physikalische Bedeutung der **Rapidität** η zu verstehen, wenden wir (6.1.21) auf die Komponenten eines beliebigen Vierervektors an:

$$x' = B_3(\eta)x = \begin{pmatrix} x^0 \cosh \eta - x^3 \sinh \eta \\ x^1 \\ x^2 \\ -x^0 \sinh \eta + x^3 \cosh \eta \end{pmatrix}. \quad (6.1.22)$$

Betrachten wir insbesondere den räumlichen Ursprung des Systems Σ' , indem wir $x'^1 = x'^2 = x'^3 = 0$ setzen. Aus (6.1.22) ersehen wir, daß dieser Punkt im System Σ die Koordinaten

$$x^1 = x^2 = 0, \quad x^3 = x^0 \tanh \eta = t \tanh \eta \quad (6.1.23)$$

besitzt. Das bedeutet, daß sich Σ' relativ zu Σ mit der Geschwindigkeit $v = \tanh \eta$ entlang der 3-Achse bewegt. Es ist stets $|\tanh \eta| < 1$. Mit Hilfe der folgenden Beziehung läßt sich der Boost (6.1.21) auch mit Hilfe der Geschwindigkeit v ausdrücken:

$$\cosh \eta = \frac{1}{\sqrt{1-v^2}} := \gamma(v), \quad \sinh \eta = \frac{v}{\sqrt{1-v^2}} = v\gamma(v). \quad (6.1.24)$$

In Analogie zu (6.1.20) bzw. (6.1.21) lassen sich Drehungen um eine beliebige räumliche Achse eines Orthonormalsystems bzw. Boosts entlang einer beliebigen räumlichen Richtung dieses Orthonormalsystems angeben. Wir werden später insbesondere Boosts in eine beliebige räumliche Richtung benötigen. Richtung und Geschwindigkeit des Boosts können wir durch einen dreidimensionalen Vektor \vec{v} mit $|\vec{v}| < 1$ charakterisieren. Dann lautet der Boost

$$B(\vec{v}) = \begin{pmatrix} \gamma & -\vec{v}^t \gamma \\ -\vec{v} \gamma & \mathbb{1} + (\gamma - 1) \vec{v} \otimes \vec{v} / \vec{v}^2 \end{pmatrix}. \quad (6.1.25)$$

Dabei bezeichnet $\vec{a} \otimes \vec{b}$, das **dyadische Produkt** zwischen zwei Dreivektoren, d.h. die Matrix mit den Elementen

$$(\vec{a} \otimes \vec{b})_{ij} = a^i b^j, \quad (6.1.26)$$

und die Multiplikation mit einem Spaltenvektor von links bedeutet also

$$(\vec{a} \otimes \vec{b} \cdot \vec{c})_i = a^i b^j c^j = a_i \vec{b} \cdot \vec{c}. \quad (6.1.27)$$

Die Wirkung des Boosts (6.1.25) auf die Komponenten eines beliebigen Vierervektors ist also durch

$$B(\vec{v})x = \begin{pmatrix} \gamma(x^0 - \vec{v} \cdot \vec{x}) \\ \vec{x} + (\gamma - 1)\vec{v}(\vec{v} \cdot \vec{x})/\vec{v}^2 - \gamma\vec{v}x^0 \end{pmatrix} \quad (6.1.28)$$

gegeben. Wir bemerken weiter, daß die Drehungen um eine beliebige feste Achse sowie die Boosts entlang einer beliebigen festen Koordinatenrichtung jeweils **abelsche Einparameteruntergruppen der Lorentzgruppe** bilden, denn mit Hilfe der Additionstheoreme der trigonometrischen bzw. hyperbolischen Funktionen ergibt sich sofort (*Übung!*)

$$D_3(\phi_1)D_3(\phi_2) = D_3(\phi_1 + \phi_2), \quad B_3(\eta_1)B_3(\eta_2) = B_3(\eta_1 + \eta_2). \quad (6.1.29)$$

Es ist wichtig zu bemerken, daß zwar die Drehungen eine Untergruppe der Lorentzgruppe bilden, *nicht aber die Boosts. Die Hintereinanderausführung zweier drehungsfreier Boosts in unterschiedlicher Richtung sind i.a. weder kommutativ noch drehungsfrei!*

Wir machen noch ohne Beweis (der interessierte Leser sei z.B. auf [Hee02] verwiesen) einige allgemeine Bemerkungen zur Struktur der Lorentzgruppe.

Man bezeichnet die volle Lorentzgruppe auch als $O(1,3)$. Dies sind alle Matrizen, die (6.1.16) erfüllen und also das Minkowski-Produkt (6.1.5) invariant lassen. Die Benennung $(1,3)$ rührt daher, daß die Komponentenmatrix der entsprechenden Fundamentalform einen positiven und drei negative Eigenwerte besitzt wie unmittelbar aus (6.1.3), wo eine „pseudoorthogonale“ Basis (physikalisch einem Inertialsystem entsprechend) gewählt wurde. Aus (6.1.16) folgt

$$\frac{1}{\det \Lambda} = \det(\Lambda^{-1}) = \det(g\Lambda^t g) = (\det g)^2 \det \Lambda^t = \det \Lambda \Rightarrow (\det \Lambda)^2 = 1. \quad (6.1.30)$$

Es ist also

$$\det \Lambda = \pm 1. \quad (6.1.31)$$

Die stetig mit der Identität zusammenhängenden Lorentztransformationen müssen also $\det \Lambda = +1$ erfüllen. Offenbar bilden alle Lorentztransformationen mit Determinante 1 eine Untergruppe, die man als **eigentliche Lorentzgruppe** $SO(1,3)$ bezeichnet.

Nun schreiben wir (6.1.16) durch Multiplikation von links mit Λ in der Form

$$\Lambda g \Lambda^t = \mathbb{1}_4 \Rightarrow \Lambda g \Lambda^t = g, \quad (6.1.32)$$

wobei wir im zweiten Schritt die Gleichung noch unter Berücksichtigung von $g^2 = \mathbb{1}_4$ von rechts mit g multipliziert haben. In Komponentenschreibweise lautet diese Gleichung

$$g_{\mu\nu} \Lambda^\mu{}_\rho \Lambda^\nu{}_\sigma = g_{\rho\sigma}. \quad (6.1.33)$$

Setzen wir darin $\rho = \sigma = 0$, folgt, daß für alle Lorentztransformationen

$$(\Lambda^0{}_0)^2 \geq 1 \Rightarrow \Lambda^0{}_0 \geq 1 \quad \text{oder} \quad \Lambda^0{}_0 \leq -1. \quad (6.1.34)$$

Die stetig mit der Identität zusammenhängenden Lorentztransformationen müssen also $\Lambda^0_0 \geq 1$ erfüllen. Wie wir weiter unten noch sehen werden, impliziert dies, daß für zeitartige Vektoren solche Lorentz-Transformationen das Vorzeichen der Zeitkomponente ungeändert lassen. Diese Transformationen bilden daher offenbar wieder eine Untergruppe, die **orthochrone Lorentz-Gruppe** $O(1,3)^\uparrow$. Da offenbar die **Raumspiegelung**

$$(\hat{P}_\nu^\mu) = \text{diag}(1, -1, -1, -1) \quad (6.1.35)$$

offenbar orthochron ist aber offenbar $\det \hat{P} = -1$ gilt, enthält $O(1,3)^\uparrow$ noch Transformationen, die nicht stetig aus der Identität hervorgehen können.

Die stetig mit der Identität zusammenhängenden Lorentztransformationen erweisen sich nun als genau die Lorentztransformationen die zugleich

$$\det \Lambda = +1, \quad \Lambda^0_0 \geq 1 \quad (6.1.36)$$

erfüllen. Dies sind die **eigentlich orthochronen Lorentz-Transformationen**. Als die Schnittmenge $O(1,3)^\uparrow \cap SO(1,3)$ bilden sie ebenfalls eine Untergruppe, die man als **eigentlich orthochrone Lorentz-Gruppe** $SO(1,3)^\uparrow$ bezeichnet.

Die **Lorentz-Invarianz** einer physikalischen Theorie sollte genauer als Invarianz unter der Transformationsgruppe $SO(1,3)^\uparrow$ verstanden werden. In der Tat zeigt sich, daß die schwache Wechselwirkung sowohl die Symmetrie unter Raumspiegelungen als auch (mit großer Wahrscheinlichkeit) der Zeitumkehr verletzt (s. z.B. [Nac86]), so daß nur $SO(1,3)^\uparrow$ eine Symmetriegruppe der Natur ist, nicht aber ganze $O(1,3)$ oder die anderen genannten größeren Untergruppen $SO(1,3)$ bzw. $O(1,3)^\uparrow$.

6.2 Das klassische Teilchenbild

In diesem Abschnitt wollen wir die eben besprochenen mehr mathematischen Begriffsbildungen auf einfachste physikalische Sachverhalte von Teilchen im Rahmen einer klassischen Punktteilchenbehandlung anwenden, indem wir Stoßprozesse betrachten. Dies wird uns als Anschauungsbeispiel bei der Entwicklung der entsprechenden quantentheoretischen Begriffe noch gute Dienste leisten.

6.2.1 Die relativistische Kinematik freier Punktteilchen

Prinzipiell kann die Formulierung der relativistischen Mechanik eines Punktteilchens nach Wahl eines beliebigen Inertialsystems genau wie die Newtonsche Mechanik durch die Beschreibung der Bahnen im dreidimensionalen Euklidischen Raum des durch dieses Inertialsystem definierten Beobachters erfolgen. Dies ist aber insbesondere zur Formulierung grundlegender Naturgesetze nicht besonders bequem. Es empfiehlt sich hingegen, die Kinematik und Dynamik der Punktteilchen im vierdimensionalen Minkowskiraum zu betrachten.

Wir beschreiben also die Bewegung eines Teilchens als Trajektorie im vierdimensionalen Minkowskiraum, d.h. wir führen einen beliebigen Parameter λ für diese **Weltlinie** des Teilchens ein: $x^\mu = x^\mu(\lambda)$. Spezialisieren wir nun diese Beschreibung auf ein bestimmtes Inertialsystem, muß sich dieselbe Trajektorie auch umkehrbar eindeutig mit Hilfe der dazugehörigen Koordinatenzeit $t = x^0$ angeben lassen. Dies ist die schwächste Forderung an ein Kausalgesetz. Das bedeutet, daß die Trajektorie die Bedingung

$$\frac{dx^0(\lambda)}{d\lambda} = \frac{dt}{d\lambda} > 0 \quad (6.2.1)$$

erfüllen muß. Wir verlangen der Bequemlichkeit halber das positive Vorzeichen, damit ein Anwachsen des Parameters λ der positiven Zeitrichtung entspricht.

Weiter ist klar, daß für jede eigentlich orthochrone Lorentztransformation Λ ebenfalls die Bedingung (6.2.1) gelten muß, also

$$\Lambda^0_{\nu} \frac{dx^{\nu}}{d\lambda} > 0. \quad (6.2.2)$$

Wir wollen nun zeigen, daß dies nur dann gewährleistet ist, wenn $dx/d\lambda$ **zeit- oder lichtartig** ist.

Betrachten wir also zunächst einen raumartigen Vierervektor a , von dem wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit verlangen dürfen, daß sein räumlicher Teil in 3-Richtung weist, d.h. $a^1 = a^2 = 0$ und $a^3 > 0$ ist,¹ und wenden einen beliebigen Lorentzboost der Gestalt (6.1.21) an. Dann ist

$$a'^0 = a^0 \cosh \eta - a^3 \sinh \eta \quad (6.2.3)$$

Angenommen $a^0 > 0$. Da nach Voraussetzung der Raumartigkeit $a^2 = (a^0)^2 - (a^3)^2 < 0$, ist $0 > a^3 > a^0$. Verlangen wir also $a'^0 < 0$, müssen wir nur η so wählen, daß

$$a^0 \cosh \eta < a^3 \sinh \eta \Rightarrow \tanh \eta > a^0/a^3. \quad (6.2.4)$$

Da $a^0/a^3 < 1$ und $\tanh \eta \rightarrow 1$ für $\eta \rightarrow \infty$, ist eine solche Wahl von η stets möglich. Das bedeutet aber, daß in der Tat $dx/d\lambda$ für unsere Trajektorie nicht raumartig sein darf, damit stets (6.2.2) erfüllt ist. Genau dieselbe Betrachtung zeigt, daß man für licht- und zeitartige Vektoren a durch einen eigentlich orthochronen Lorentzboost das Vorzeichen der Zeitkomponente nicht ändern kann, da $|\tanh \eta| < 1$ für jedes reelle η , so daß also die Weltlinie eines Teilchens stets so beschaffen sein muß, daß die Tangenten überall zeit- oder lichtartig sind. Wir nennen solche Trajektorien im Minkowskiraum schlechthin einfach zeit- oder lichtartig.

Nehmen wir nun zunächst an, wir hätten eine zeitartige Trajektorie vorliegen. Greifen wir einen beliebigen Punkt, charakterisiert durch $\lambda = \lambda_0$ heraus. Dann kann man stets einen Lorentzboost der Form (6.1.28) finden, so daß $d\vec{x}'/d\lambda|_{\lambda=\lambda_0} = 0$ ist. Dazu braucht man nur mit der Geschwindigkeit

$$\vec{v} = \frac{d\vec{x}}{d\lambda} \left(\frac{dx_0}{d\lambda} \right)^{-1} \quad (6.2.5)$$

zu boosten (*Übung*). Wegen der Zeitartigkeit der Trajektorie ist ja $|\vec{v}| < 1$! Dies ist das Ruhesystem des Teilchens, in dem es momentan (also zu dem durch $\lambda = \lambda_0$ gegebenen Zeitpunkt) ruht.

Wir können uns diese Lorentzboosts nun zu jedem Punkt entlang der Trajektorie ausgeführt denken. Dies definiert mit dem Teilchen mitbewegte Inertialsysteme, und man bezeichnet die in diesen Inertialsystemen gemessenen Zeitelemente $d\tau$ als die **Eigenzeitelemente** des Teilchens. Es wäre nun äußerst mühsam, diese Eigenzeitelemente für eine gegebene Trajektorie zu berechnen, wenn man all diese Lorentztransformationen tatsächlich ausführen müßte. Dies ist aber gar nicht notwendig, denn wir können aufgrund der Lorentzinvarianz $dx' = (d\tau, 0, 0, 0)$ schreiben

$$d\tau^2 = dx' \cdot dx' = dx \cdot dx, \quad (6.2.6)$$

und von einem beliebigen Ereignis λ_0 an gezählt vergeht also die Eigenzeit

$$\tau(\lambda) = \int_{\lambda_0}^{\lambda} d\lambda' \sqrt{\frac{dx}{d\lambda'} \frac{dx}{d\lambda'}}. \quad (6.2.7)$$

Da weiter offenbar $d\tau/d\lambda > 0$ ist, können wir auch die Eigenzeit des Teilchens als Parameter der Weltlinie verwenden.

¹Ist das nicht der Fall, können wir zunächst eine räumliche Drehung anwenden, um dies zu erreichen.

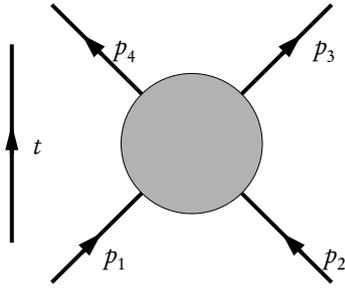


Abbildung 6.1: Raumzeitdiagramm für die Streuung zweier Teilchen in zwei (gleiche oder verschiedene) andere Teilchen. Wir folgen der Konvention, daß die Zeit von unten nach oben aufgetragen wird, was sich später bei der diagrammatischen Formulierung (Feynman-Diagramme) der Störungstheorie noch als nützlich erweisen wird.

Dieses Konzept der **Eigenzeit** ist deshalb wichtig, weil es sich um eine relativistische Invariante handelt, die eine bequeme kovariante Formulierung der Teilchenkinematik und -dynamik erlaubt. Die kovariante Definition der kinematischen Größen **Geschwindigkeit und Beschleunigung** erfolgt daher in Bezug auf diese Eigenzeit des Teilchens:

$$u = \frac{dx}{d\tau}, \quad a = \frac{du}{d\tau} = \frac{d^2x}{d\tau^2}. \quad (6.2.8)$$

In den *nicht kovarianten, also auf ein Inertialsystem bezogenen* dreidimensionalen Größen geschrieben, gilt also

$$u = \frac{dx}{dt} \frac{dt}{d\tau} = \gamma \begin{pmatrix} 1 \\ \vec{v} \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \vec{v} = \frac{d\vec{x}}{dt}, \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\vec{v}^2}}. \quad (6.2.9)$$

Kovariante Bewegungsgleichungen lassen sich am bequemsten aus dem **Hamiltonschen Prinzip** in der Lagrangeformulierung bestimmen. Für freie Teilchen hat man als einzigen Vierervektor zur Verfügung, um eine invariante Wirkung zu formulieren. Der einzige Skalar, der sich aus diesem Vektor bilden läßt, ist $u^2 = 1$, so daß für ein massives Teilchen

$$A_0[x] = -m \int d\tau = -m \int d\lambda \sqrt{\frac{dx^\mu}{d\lambda} \frac{dx_\mu}{d\lambda}} \quad (6.2.10)$$

den geeigneten Ansatz für eine Wirkung darstellt. Wir haben im letzten Schritt die Wirkung wieder bzgl. eines beliebigen Weltparameters λ dargestellt, da die Eigenzeit selbst nicht unabhängig ist. Man kann als Weltparameter selbstverständlich auch die Koordinatenzeit t bzgl. eines beliebigen Inertialsystems wählen, denn die Wirkung ist unabhängig von dieser Parametrisierung der Weltlinie:

$$A_0[x] = -m \int dt \sqrt{1-\dot{\vec{x}}^2}. \quad (6.2.11)$$

Das Noethertheorem für die Invarianz unter zeitlichen und räumlichen Translationen liefert dann **Energie und Impuls** eines freien Teilchens:

$$E = \frac{m}{\sqrt{1-\vec{v}^2}}, \quad \vec{p} = \frac{m\vec{v}}{\sqrt{1-\vec{v}^2}}. \quad (6.2.12)$$

Mit (6.2.8) zeigt sich, daß Energie und Impuls zusammengenommen einen Vierervektor

$$p = mu = m \frac{dx}{d\tau} \quad (6.2.13)$$

bilden. Die kovariante Beziehung zwischen Energie und Impuls lautet demnach

$$p^2 = E^2 - \vec{p}^2 = m^2 \Rightarrow E(\vec{p}) = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2}. \quad (6.2.14)$$

Damit können wir bereits die Kinematik für Stoßprozesse relativistischer Teilchen betrachten, die im folgenden noch wichtig sein wird. Der einfachste Fall ist ein Prozeß, wo zwei Teilchen X_1 und X_2 mit

Viererimpulsen p_1 und p_2 aneinander streuen (Anfangszustand) und zwei Teilchen X_3 und X_4 im Endzustand mit Viererimpulsen p_3 und p_4 resultieren. Dies können die gleichen Teilchen sein (also wieder X_1 und X_2), so daß also ein **elastischer Streuprozeß** betrachtet wird (z.B. die Elektron-Positron Streuung $e_+ + e_- \rightarrow e_+ + e_-$) oder man hat von den Ausgangsteilchen verschiedene Teilchen im Endzustand vorliegen (**inelastischer Streuprozeß**), z.B. Paarvernichtung $e_+ + e_- \rightarrow 2\gamma$. In jedem Falle müssen Energie- und Impulserhaltung in dem Streuprozeß gelten, was sich sogleich vierdimensional kovariant zusammenfassen läßt:

$$p_1 + p_2 = p_3 + p_4. \quad (6.2.15)$$

Weiter müssen die Energie-Impulsbeziehungen für die jeweiligen Teilchen erfüllt sein, wenn man sowohl die einlaufenden als auch die auslaufenden Teilchen weit ab vom Reaktionspunkt („Vertex“) betrachtet, wo die Wechselwirkung vernachlässigt werden kann (**asymptotisch freie Teilchen**):

$$p_1^2 = m_1^2, \quad p_2^2 = m_2^2, \quad p_3^2 = m_3^2, \quad p_4^2 = m_4^2. \quad (6.2.16)$$

Neben diesen invarianten Massen kann man nun noch drei weitere Invarianten aus den Viererimpulsen bilden, die man als **Mandelstamvariablen**² bezeichnet:

$$s = (p_1 + p_2)^2 = (p_3 + p_4)^2, \quad t = (p_1 - p_3)^2 = (p_2 - p_4)^2, \quad u = (p_1 - p_4)^2 = (p_2 - p_3)^2. \quad (6.2.17)$$

Diese drei Invarianten sind jedoch nicht unabhängig voneinander. Vielmehr findet man durch Ausmultiplizieren der Minkowskiquadrate in (6.2.17) sowie Anwendung der Energie-Impulserhaltungsgleichung (6.2.15) und der Energie-Impulsbeziehungen (6.2.16)

$$s + t + u = m_1^2 + m_2^2 + m_3^2 + m_4^2. \quad (6.2.18)$$

6.2.2 Laborsystem

Für die Definition des **invarianten Streuquerschnitts** benötigen wir noch die Relativgeschwindigkeit der Teilchen im Anfangszustand. In der nichtrelativistischen Kinematik ist das einfach die vektorielle Differenz der Dreiergeschwindigkeiten. Dies ist aber im relativistischen Falle keine kovariante, also vom Inertialsystem unabhängige Definition. Wir *definieren* daher die Relativgeschwindigkeit des Teilchens X_2 zum Teilchen X_1 als seine Geschwindigkeit im Ruhssystem des Teilchens X_1 . Dieses Bezugssystem bezeichnet man gemeinhin als **Laborsystem**, d.h. es gilt

$$p_1^{(\text{lab})} = \begin{pmatrix} m_1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad p_2^{(\text{lab})} = \begin{pmatrix} E_2^{(\text{lab})} \\ 0 \\ 0 \\ P_2^{(\text{lab})} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{m_2^2 + (P_2^{(\text{lab})})^2} \\ 0 \\ 0 \\ P_2^{(\text{lab})} \end{pmatrix}, \quad (6.2.19)$$

wobei $P_2^{(\text{lab})}$ den Dreierimpulsbetrag des einlaufenden Teilchens X_2 bezeichnet und die Stoßrichtung in die Richtung der 3-Achse gelegt wurde. Die Relativgeschwindigkeit ist demnach definitionsgemäß

$$v_{\text{rel}} = \frac{P_2^{(\text{lab})}}{E_2^{(\text{lab})}}. \quad (6.2.20)$$

²benannt nach Stanley Mandelstam *1928

Dies läßt sich nun offensichtlich auch mit Hilfe kovarianter Ausdrücke schreiben. Aus p_1 und p_2 läßt sich nämlich die Invariante

$$p_1 \cdot p_2 = m_1 \sqrt{m_2^2 + (P_2^{(\text{lab})})^2} \quad (6.2.21)$$

bilden, und wir können (6.2.20) in der Form

$$v_{\text{rel}} := \frac{\sqrt{(p_1 p_2)^2 - m_1^2 m_2^2}}{E_1 E_2} \quad (6.2.22)$$

angeben. Im Laborsystem stimmt diese Definition mit (6.2.20) überein. Nun stellt zwar (6.2.22) keinen manifest kovarianten Ausdruck dar, wir werden aber sehen, daß mit Hilfe dieser Definition der Wirkungsquerschnitt manifest kovariant definiert werden kann. Außerdem kann man zeigen, daß für **kollineare Lorentzboosts**, also Lorentzboosts in Kollisionsrichtung (in unserer Konvention (6.2.19) also in 3-Richtung) tatsächlich $v_{\text{rel}} = |\vec{v}_1 - \vec{v}_2|$ gilt (*Übung!*). Dies ist aber *nicht korrekt für beliebige Lorentzboosts, wenn also die Teilchen im betrachteten Bezugssystem nicht mehr kollinear aufeinandertreffen!*

Es ist weiter noch nützlich, einige Beziehungen zwischen den Mandelstamvariablen und den Größen im Laborsystem herzuleiten. Aus (6.2.19) und (6.2.17) folgt sofort

$$E_2^{(\text{lab})} = \frac{s - m_1^2 - m_2^2}{2m_1}, \quad (6.2.23)$$

$$P_2^{(\text{lab})} = \sqrt{(E_2^{(\text{lab})})^2 - m_2^2} = \frac{\sqrt{[s - (m_1 + m_2)^2][s - (m_1 - m_2)^2]}}{2m_1}. \quad (6.2.24)$$

Die Beziehung zum Endzustand läßt sich durch die Mandelstamvariablen t und u ausdrücken:

$$E_3^{(\text{lab})} = \frac{m_1^2 + m_3^2 - t}{2m_1}. \quad (6.2.25)$$

Zusammen mit (6.2.18) folgt

$$E_4^{(\text{lab})} = m_1 + E_2^{(\text{lab})} - E_3^{(\text{lab})} = \frac{m_1^2 + m_4^2 - u}{2m_1}. \quad (6.2.26)$$

Entsprechend ergeben sich schließlich die Impulse der auslaufenden Teilchen zu

$$P_3^{(\text{lab})} = \frac{\sqrt{[(m_1 + m_3)^2 - t][(m_1 - m_3)^2 - t]}}{2m_1}, \quad (6.2.27)$$

$$P_4^{(\text{lab})} = \frac{\sqrt{[(m_1 + m_4)^2 - u][(m_1 - m_4)^2 - u]}}{2m_1}.$$

6.2.3 Schwerpunktsystem

Das Schwerpunktsystem ist definiert als dasjenige System, in dem der Gesamtdreierimpuls verschwindet:

$$\vec{p}_1^{(\text{cm})} = \begin{pmatrix} E_1^{(\text{cm})} \\ \vec{p}^{(\text{cm})} \end{pmatrix}, \quad \vec{p}_2^{(\text{cm})} = \begin{pmatrix} E_2^{(\text{cm})} \\ -\vec{p}^{(\text{cm})} \end{pmatrix}, \quad \vec{p}_3^{(\text{cm})} = \begin{pmatrix} E_3^{(\text{cm})} \\ \vec{p}'^{(\text{cm})} \end{pmatrix}, \quad \vec{p}_4^{(\text{cm})} = \begin{pmatrix} E_4^{(\text{cm})} \\ -\vec{p}'^{(\text{cm})} \end{pmatrix}. \quad (6.2.28)$$

Daraus ist sofort ersichtlich, daß die Mandelstamvariable s das Quadrat der Gesamtenergie im Schwerpunktsystem angibt:

$$s = (p_1^{(\text{cm})} + p_2^{(\text{cm})})^2 = (E_1^{(\text{cm})} + E_2^{(\text{cm})})^2 = (p_3^{(\text{cm})} + p_4^{(\text{cm})})^2 = (E_3^{(\text{cm})} + E_4^{(\text{cm})})^2. \quad (6.2.29)$$

Zusammen mit den Energie-Impulsbeziehungen ergibt sich für den Schwerpunktsimpulsbetrag im Eingangs- bzw. Ausgangskanal

$$p^{(\text{cm})} = \frac{\sqrt{[s - (m_1 + m_2)^2][s - (m_1 - m_2)^2]}}{2\sqrt{s}},$$

$$p'^{(\text{cm})} = \frac{\sqrt{[s - (m_3 + m_4)^2][s - (m_3 - m_4)^2]}}{2\sqrt{s}}. \quad (6.2.30)$$

6.2.4 Relativistisches Punktteilchen im äußeren elektromagnetischen Feld

Wie wir im nächsten Abschnitt noch ausführlich besprechen werden, können wir das elektromagnetische Feld mit Hilfe eines Vierervektorpotentials kovariant beschreiben. Dazu bemerken wir nur, daß³

$$\partial_\mu := \frac{\partial}{\partial x^\mu} \quad (6.2.31)$$

ein Vektoroperator ist, d.h. wendet man diesen Operator auf ein beliebiges Tensorfeld an, entsteht ein Tensorfeld einer um 1 höheren Stufe als das ursprüngliche. Der neu entstandene Index ist dabei entsprechend seiner Indexstellung ein kovarianter Index. Zur Abkürzung definiert man daher wie bei beliebigen Tensorindizes

$$\partial^\mu = g^{\mu\nu} \partial_\nu = \frac{\partial}{\partial x_\mu}. \quad (6.2.32)$$

Ist A^ν das Vierervektorpotential des elektromagnetischen Feldes, so sind die Feldstärkekomponenten in dem Vierertensor zweiter Stufe

$$F_\mu{}^\nu(x) = \partial_\mu A^\nu - \partial^\nu A_\mu \quad (6.2.33)$$

zusammengefaßt. Dies erkennt man, wenn man die zeitlichen und räumlichen Komponenten getrennt behandelt. Für $\mu=0$ ist nämlich

$$F_0{}^0 = 0, \quad F_0{}^a = \frac{\partial}{\partial x^0} A^a - \frac{\partial}{\partial x_a} A^0 = \frac{\partial}{\partial x^0} A^a + \frac{\partial}{\partial x^a} A^0 = -E^a,$$

$$F_a{}^b = \frac{\partial}{\partial x^a} A^b - \frac{\partial}{\partial x_b} A^a = \frac{\partial}{\partial x^a} A^b - \frac{\partial}{\partial x^b} A^a = \epsilon^{abc} (\vec{\nabla} \times \vec{A})^c. \quad (6.2.34)$$

Dabei laufen lateinische Indizes stets über die räumlichen Indizes $\{1, 2, 3\}$, und wir verwenden die Summationskonvention für Dreiervektoren und -tensoren wie gehabt auch für gleichständige Indizes; ϵ^{abc} ist das übliche vollständig antisymmetrische Levi-Civita-Symbol im Euklidischen \mathbb{R}^3 . Identifizieren wir nämlich A^0 mit dem skalaren und \vec{A} mit dem üblichen Vektorpotential der dreidimensionalen Elektrodynamik, so folgt (6.2.34) aus den in der Dreierschreibweise geschriebenen Beziehungen

$$\vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t} \vec{A} - \vec{\nabla} A^0, \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}. \quad (6.2.35)$$

³Es ist *sehr* wichtig die Indexstellungen in dieser Gleichung genau zu beachten!

Verhält sich also A^μ unter Lorentztransformationen $x' = \Lambda x$ (bzw. $x = \Lambda^{-1}x'$) wie ein Vektorfeld, d.h. gemäß

$$A'^\mu(x') = \Lambda^\mu{}_\nu A^\nu(x) = \Lambda^\mu{}_\nu A^\nu(\Lambda^{-1}x), \quad (6.2.36)$$

so ist $F_{\mu\nu}$ ein Vierertensor zweiter Stufe. Mittels der vollständig kovarianten Indizes geschrieben gilt

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu = -F_{\nu\mu}, \quad (6.2.37)$$

d.h. wir haben einen **antisymmetrischen Tensor** zweiter Stufe. Dieser besitzt offenbar $(4 \cdot 4 - 4)/2 = 6$ voneinander unabhängige Komponenten, entsprechend den sechs unabhängigen Feldkomponenten des elektrischen und magnetischen Feldes \vec{E} und \vec{B} in der Dreierschreibweise der Elektrodynamik. Der Tensor $F_{\mu\nu}$ heißt **Feldstärke- oder Faraday-Tensor**.

Fragen wir uns nun, wie die **relativistische Bewegungsgleichung** eines Punktteilchens im elektromagnetischen Feld aussieht, können wir vom Hamiltonschen Prinzip ausgehen. Für das freie Teilchen lautet das Wirkungsfunktional im Lagrangeformalismus gemäß (6.2.10) in der manifest kovariante Form geschrieben

$$S_0[x] = -m \int d\lambda \sqrt{\frac{dx^\mu}{d\lambda} \frac{dx_\mu}{d\lambda}}. \quad (6.2.38)$$

Wesentlich ist dabei daß die Wirkung zum einen lorentzinvariant ist und zum anderen unabhängig von der Parametrisierung der Weltlinie. Letzteres ist der Fall, weil die Lagrangefunktion eine homogene Funktion 1. Ordnung bzgl. $dx^\mu/d\lambda$ ist.

Von der nichtrelativistischen Mechanik her wissen wir, daß das elektromagnetische Feld über das skalare und das Vektorpotential in die Lagrangefunktion eingeht. Skalar- und Vektorpotential haben wir oben zu dem Vierervektor $A^\mu = (A^0, \vec{A})$ zusammengefaßt. Es liegt also nahe, die Wechselwirkung durch den Wechselwirkungsanteil der Wirkung

$$S_W[x] = -q \int d\lambda A_\mu(x) \frac{dx^\mu}{d\lambda}. \quad (6.2.39)$$

Dies ist eine Lorentz-invariante Größe, da der Integrand das Minkowskiprodukt zweier Vektoren ist. Außerdem ist es ebenfalls in erster Ordnung bzgl. $dx^\mu/d\lambda$ und damit wieder unabhängig von der gewählten Parametrisierung. Dabei ist q die elektrische Ladung des Punktteilchens. Diese ist also als Viererskalar anzusehen, wenn (6.2.39) Lorentz-invariant sein soll.

Wählen wir nun für λ wieder die Zeitkomponente bzgl. eines festen Inertialsystems folgt für die Wirkung

$$S[x] = -m \int dt L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}), \quad \text{mit} \quad L = -m \sqrt{1 - \dot{\vec{x}}^2} - q A_0(x) + q \vec{A}(x) \cdot \dot{\vec{x}}. \quad (6.2.40)$$

Aus dem **Hamiltonschen Prinzip der kleinsten Wirkung** ergibt sich dann, wie in der nichtrelativistischen Mechanik, die Bewegungsgleichung in Form der **Euler-Lagrange-Gleichung**

$$\frac{\partial L}{\partial \vec{x}} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{x}}} = 0. \quad (6.2.41)$$

Nun folgt aus (6.2.40)

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{x}}} = m \frac{\dot{\vec{x}}}{\sqrt{1 - \dot{\vec{x}}^2}} + q \vec{A}. \quad (6.2.42)$$

Wegen

$$\frac{d}{dt}\vec{A}(x) = \frac{\partial}{\partial t}\vec{A}(x) + (\dot{\vec{x}} \cdot \vec{\nabla})\vec{A} \quad (6.2.43)$$

folgt für die Bewegungsgleichung gemäß (6.2.41)

$$m \frac{d}{dt} \left(\frac{\dot{\vec{x}}}{\sqrt{1-\dot{\vec{x}}^2}} \right) + q \frac{\partial}{\partial t} \vec{A} + q (\dot{\vec{x}} \cdot \vec{\nabla}) \vec{A} + q \left[\frac{\partial}{\partial \vec{x}} A^0 - \frac{\partial}{\partial \vec{x}} (\dot{\vec{x}} \cdot \vec{A}) \right] = 0. \quad (6.2.44)$$

Nun gilt

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial \vec{x}} (\dot{\vec{x}} \cdot \vec{A}) - (\dot{\vec{x}} \cdot \vec{\nabla}) \vec{A} \right]^a &= \dot{x}^b \left(\frac{\partial}{\partial x^a} A^b - \frac{\partial}{\partial x^b} A^a \right) \\ &= \dot{x}^b \epsilon^{abc} (\vec{\nabla} \times \vec{A})^c = [\dot{\vec{x}} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A})]^a = (\dot{\vec{x}} \times \vec{B})^a \end{aligned} \quad (6.2.45)$$

und

$$\vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t} \vec{A} - \vec{\nabla} A^0. \quad (6.2.46)$$

Dies in (6.2.44) eingesetzt liefert schließlich

$$m \frac{d}{dt} \left(\frac{\dot{\vec{x}}}{\sqrt{1-\dot{\vec{x}}^2}} \right) = q (\vec{E} + \dot{\vec{x}} \times \vec{B}). \quad (6.2.47)$$

Die Änderung dieser relativistischen Bewegungsgleichung gegenüber der nichtrelativistischen besteht also lediglich darin, daß man statt des nichtrelativistischen (mechanischen) Impulses $m\vec{x}$ den relativistischen Ausdruck (6.2.12) einzusetzen hat, denn auf der rechten Seite steht die gewohnte **Lorentz-Kraft**, die auf ein Teilchen mit elektrischer Ladung q im elektromagnetischen Feld (\vec{E}, \vec{B}) wirkt.

Man kann diese Gleichung in eine manifest kovariante Form bringen, indem man bedenkt, daß

$$d\tau = \sqrt{1-\dot{\vec{x}}^2} dt, \quad \frac{d}{d\tau} = \frac{dt}{d\tau} \frac{d}{dt} = \frac{1}{\sqrt{1-\dot{\vec{x}}^2}} \frac{d}{dt} \quad (6.2.48)$$

gilt. Daraus folgt

$$\dot{\vec{x}} \frac{d\vec{x}}{d\tau} = \frac{\dot{\vec{x}}}{\sqrt{1-\dot{\vec{x}}^2}} \quad (6.2.49)$$

und somit

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\dot{\vec{x}}}{\sqrt{1-\dot{\vec{x}}^2}} \right) = \frac{d}{dt} \frac{d\vec{x}}{d\tau} = \sqrt{1-\dot{\vec{x}}^2} \frac{d^2\vec{x}}{d\tau^2} \quad (6.2.50)$$

Setzt man dies in (6.2.47) ein und bringt dividiert durch den Wurzelausdruck, so erkennt man, daß die entstehende Gleichung wegen (6.2.34) gerade die räumlichen Komponenten der kovarianten Gleichung

$$m \frac{d^2 x^\mu}{d\tau^2} = q F^\mu{}_\nu(x) \frac{dx^\nu}{d\tau} \quad (6.2.51)$$

bilden. Dabei ist die zeitliche Gleichung redundant, denn multipliziert man (6.2.47) skalar mit $\dot{\vec{x}}$, erhält man (*Übung!*)

$$m \dot{\vec{x}} \cdot \frac{d}{dt} \left(\frac{\dot{\vec{x}}}{\sqrt{1-\dot{\vec{x}}^2}} \right) = \frac{d}{dt} \left(\frac{m}{\sqrt{1-\dot{\vec{x}}^2}} \right) = m \frac{d}{dt} \frac{dt}{d\tau} = q \dot{\vec{x}} \cdot \vec{E}. \quad (6.2.52)$$

Dies mit $1/\sqrt{1-\vec{x}^2}$ multipliziert liefert

$$m \frac{d^2 x^0}{d\tau} = q \frac{d\vec{x}}{d\tau} \cdot \vec{E}. \quad (6.2.53)$$

dies entspricht aber genau (6.2.51).

Die räumlichen Gleichungen von (6.2.51) lauten

$$m \frac{d^2 \vec{x}}{d\tau} = q \left(\vec{E} + \frac{d\vec{x}}{d\tau} \times \vec{B} \right). \quad (6.2.54)$$

Daß (6.2.51) keine vier voneinander unabhängigen Gleichungen sind, folgt auch, wenn man (6.2.51) mit $dx_\mu/d\tau$ überschiebt. Die rechte Seite ergibt wegen der Antisymmetrie des Feldstärketensors 0. Die linke Seite ist proportional zu

$$\frac{d}{d\tau} \left(\frac{dx^\mu}{d\tau} \frac{dx_\mu}{d\tau} \right) = 0. \quad (6.2.55)$$

Da der Ausdruck in der Klammer definitionsgemäß identisch 1 ist, zeigt dies auch, daß die vier Gleichungen (6.2.51) nicht nur redundant sondern auch einander nicht widersprechen. Dies ist allerdings durch unsere manifest kovariante Konstruktion des Wirkungsfunktional bereits im Ansatz gewährleistet.

Zu der Bewegungsgleichung (6.2.51) gelangen wir übrigens auch durch eine Anwendung des Hamiltonschen Prinzips der kleinsten Wirkung auf das manifest kovariant geschriebene Wirkungsfunktional

$$S[x] = S_0[x] + S_W[x] = - \int d\lambda \left(m \sqrt{\frac{dx^\mu}{d\lambda} \frac{dx_\mu}{d\lambda}} + q A_\mu(x) \frac{dx^\mu}{d\lambda} \right), \quad (6.2.56)$$

d.h. die Summe aus (6.2.38) und (6.2.39), wobei $x^0(\lambda)$ als vierte unabhängige Variable betrachtet wird. Verwenden wir dann für den willkürlichen skalaren „Weltparameter“ λ die Eigenzeit τ des Teilchens, erhalten wir tatsächlich (6.2.51) (*Übung!*).

6.3 Das klassische elektromagnetische Feld

In diesem Abschnitt wollen wir in aller Kürze an die Elektrodynamik und ihre manifest kovariante relativistische Formulierung erinnern. Ausgangspunkt unserer Betrachtungen werden die Maxwell'schen Gleichungen im Vakuum sein, wobei wir Ladungen und Ströme für Punktteilchen betrachten wollen. Wir werden alsbald an die Grenzen einer klassischen Theorie von Punktteilchen und Feldern stoßen, die wie wir sehen werden erst in der quantisierten Theorie gelöst werden können, wenngleich nur im Sinne der Störungstheorie.

6.3.1 Die Maxwellgleichungen im Vakuum

Wir schreiben die Maxwellgleichungen für den einfachsten Fall des Vakuums auf, wobei wir uns wieder des **Heaviside-Lorentz'schen Einheitensystems** bedienen wollen. Dabei handelt es sich um ein rationalisiertes **Gauß'sches Einheitensystem**, welches vornehmlich in der theoretischen Hochenergiephysik gebräuchlich ist. Wir verwenden weiterhin auch die nützliche Konvention, Längen und

Zeiten in derselben Einheit zu messen und $c = 1$ zu setzen. Die Maxwellgleichungen in ihrer ursprünglichen Form beschreiben die Dynamik von **elektrischen und magnetischen Feldern** \vec{E} und \vec{B} bei vorgegebenen Ladungsverteilungen ρ und Stromdichteverteilungen \vec{j} . Bzgl. eines kartesischen Bezugssystems lauten sie

$$\operatorname{rot} \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0, \quad \operatorname{div} \vec{B} = 0, \quad (6.3.1)$$

$$\operatorname{rot} \vec{B} - \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \vec{j}, \quad \operatorname{div} \vec{E} = \rho. \quad (6.3.2)$$

Die physikalische Bedeutung des elektrischen und magnetischen Feldes ergibt sich aus der durch sie verursachten Kraftwirkung auf Probeladungen. Auf eine Punktladung q wirkt demnach die **Lorentzkraft**

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}). \quad (6.3.3)$$

Die Maxwellgleichungen zerfallen, ihrer mathematischen Struktur, nach in die in (6.3.1) wiedergegebenen **homogenen Maxwellgleichungen**, welche das **Faradaysche Induktionsgesetz** sowie die Nichtexistenz magnetischer Ladungsdichten beinhalten, und die **inhomogenen Gleichungen** (6.3.2), die die Erregung der Felder aus den elektrischen Ladungs- und Stromverteilungen beschreiben, also das um den **Maxwellschen Verschiebungsstrom** ergänzte **Ampèresche Durchflutungsgesetz** sowie das Gaußsche Gesetz umfassen.

Eine sehr wichtige Folgerung aus den inhomogenen Gleichungen ergibt sich, indem man die Divergenz des Ampère-Maxwellschen Durchflutungsgesetzes und dann in der entstehenden Gleichung die Zeitableitung des Gaußschen Gesetzes verwendet. Ohne Bezugnahme auf die Bewegungsgleichungen für die Ladungen und Ströme, die wir den Maxwellgleichungen hinzuzufügen hätten, wollten wir ein abgeschlossenes physikalisches System beschreiben, ergibt sich dann das Gesetz von der **Erhaltung der elektrischen Ladung**:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0. \quad (6.3.4)$$

Daß diese lokale Gleichung tatsächlich die Erhaltung der Ladung beinhaltet, erkennt man durch Integration dieser **Kontinuitätsgleichung** über ein beliebiges zeitlich unveränderliches Volumen V , dessen Berandungsfläche wir mit ∂V bezeichnen wollen und Anwendung des Gaußschen Integralsatzes:

$$\frac{dQ_V}{dt} = \frac{d}{dt} \int_V d^3\vec{x} \rho(t, \vec{x}) = - \int_{\partial V} d^2\vec{A} \cdot \vec{j}(t, \vec{x}). \quad (6.3.5)$$

Dabei haben wir die Flächennormalenvektoren $d^2\vec{A}$ wie in der Vektoranalysis üblich aus dem betrachteten Volumen V herausgerichtet. Gl. (6.3.5) besagt aber nun, daß die zeitliche Änderung der im Volumen V befindlichen elektrischen Ladung allein durch den Fluß elektrischer Ladungen durch dessen Oberfläche verursacht sein kann. Dehnt man das Volumen auf den ganzen Raum \mathbb{R}^3 aus, ergibt sich auf der rechten Seite 0, da wir annehmen dürfen, daß die Stromdichte im Unendlichen hinreichend schnell verschwindet. Demnach ist also die Gesamtladung erhalten, d.h. $Q_{\mathbb{R}^3} = \text{const.}$

Die homogenen Gleichungen können durch die Einführung der **Elektrodynamischen Potentiale** identisch erfüllt werden. Aus der Divergenzfreiheit des magnetischen Feldes gemäß der zweiten der Gleichungen (6.3.1) folgt die Existenz eines Vektorpotentials, so daß

$$\vec{B} = \operatorname{rot} \vec{A} \quad (6.3.6)$$

gilt. Diese Gleichung ins Faradaysche Induktionsgesetz (6.3.1) (erste Gleichung) eingesetzt liefert dann

$$\operatorname{rot} \left(\vec{E} + \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right) = 0. \quad (6.3.7)$$

Daher muß der Ausdruck in der Klammer durch ein Skalarpotential Φ darstellbar sein. Folglich läßt sich also das elektrische Feld durch

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \operatorname{grad} \Phi \quad (6.3.8)$$

ausdrücken. Umgekehrt ist klar, daß bei beliebig vorgegebenen Potentialen Φ und \vec{A} die durch (6.3.6) und (6.3.8) definierten Felder \vec{B} und \vec{E} die homogenen Maxwellgleichungen identisch erfüllen (6.3.1).

Nun ist es aber auch klar, daß für vorgegebene Felder \vec{E} und \vec{B} die Potentiale Φ und \vec{A} nicht eindeutig bestimmt sind. Gemäß (6.3.6) können wir nämlich den Gradienten eines beliebigen Skalarfeldes χ zu \vec{A} hinzufügen:

$$\vec{A}' = \vec{A} + \operatorname{grad} \chi. \quad (6.3.9)$$

Um auch (6.3.8) bei vorgegebenem Feld \vec{E} zu genügen, müssen wir dann lediglich Φ durch

$$\Phi' = \Phi - \frac{\partial \chi}{\partial t} \quad (6.3.10)$$

ersetzen. Diese Symmetrie der durch die Potentiale ausgedrückten Gleichungen bezeichnet man als **Eichsymmetrie**. Sie wird bei der quantentheoretischen Behandlung der elektromagnetischen Erscheinungen noch eine herausragende Rolle spielen.

Wir wenden uns nun auch den inhomogenen Maxwellgleichungen zu. Setzen wir also (6.3.6) und (6.3.8) in die Gleichungen (6.3.2) ein, so ergibt sich nach Verwendung der in kartesischen Koordinaten gültigen Identität

$$\operatorname{rot} \operatorname{rot} \vec{A} = \operatorname{grad} \operatorname{div} \vec{A} - \Delta \vec{A} \quad (6.3.11)$$

die folgende Form des Maxwell-Ampéreschen Gesetzes:

$$\operatorname{grad} \left(\operatorname{div} \vec{A} + \frac{\partial \Phi}{\partial t} \right) + \square \vec{A} = \vec{j}, \quad (6.3.12)$$

wo wir den **d'Alembert-Operator**

$$\square = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \quad (6.3.13)$$

eingeführt haben.

Offenbar können wir nun (6.3.12) vereinfachen, wenn wir die Nebenbedingung

$$\operatorname{div} \vec{A} + \frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0 \quad (6.3.14)$$

verlangen. Diese Freiheit läßt uns die oben festgestellte Eichinvarianz. Nehmen wir nämlich an, Gl. (6.3.14) sei nicht erfüllt, können wir neue Potentiale gemäß (6.3.9) und (6.3.10) wählen und verlangen, daß für sie (6.3.14) gilt. Dies ergibt für das Eichfeld χ die Forderung

$$\square \chi = -\frac{\partial \Phi}{\partial t} - \operatorname{div} \vec{A}. \quad (6.3.15)$$

Wir werden sogleich sehen, daß wir für diese Gleichung stets eine Lösung angeben können. Freilich ist χ dadurch noch nicht vollständig bestimmt, denn wir können immer noch eine Eichtransformation mit einem Eichfeld $\tilde{\chi}$ zulassen, für das $\square\tilde{\chi} = 0$ erfüllt ist. Die Nebenbedingung (6.3.14) schränkt dann jedoch die Eichinvarianz auf solche Eichfelder ein. Daher nennt man (6.3.14) eine **Eichbedingung**. Diese spezielle Eichbedingung wird als **Lorenz-Eichbedingung** bezeichnet⁴. Wir dürfen also davon ausgehen, daß (6.3.14) erfüllt ist. Dann vereinfacht sich (6.3.12) zu einer einfachen Wellengleichung für jede der drei Komponenten des Vektorpotentials \vec{A} :

$$\square\vec{A} = \vec{j}. \quad (6.3.16)$$

Nunmehr benötigen wir nur noch das Gaußsche Gesetz in seiner Form für die Potentiale. Setzen wir also (6.3.8) in die letzte der Maxwellgleichungen (6.3.2) ein und verwenden wieder die Lorenzeichbedingung (6.3.14), finden wir

$$-\operatorname{div}\left(\frac{\partial\vec{A}}{\partial t} + \operatorname{grad}\Phi\right) = -\frac{\partial(\operatorname{div}\vec{A})}{\partial t} - \Delta\Phi = \rho \Rightarrow \square\Phi = \rho. \quad (6.3.17)$$

Dabei haben wir im letzten Schritt wieder die Lorenz-Eichbedingung (6.3.14) verwendet.

6.3.2 Die relativistisch kovariante Form der Maxwellgleichungen

Betrachten wir (6.3.16) und (6.3.17) stellen wir fest, daß wir sie in relativistisch kovarianter Form schreiben können, denn der d'Alembert-Operator (6.3.13) kann wie folgt durch einen Lorentz-invarianten Operator ausgedrückt werden:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta = g^{\mu\nu} \frac{\partial^2}{\partial x^\mu \partial x^\nu} := g^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu = \partial^\mu \partial_\mu. \quad (6.3.18)$$

Um (6.3.16) und (6.3.17) durch eine manifest Lorentzkovariante Gleichung auszudrücken, müssen wir also nur noch Ladungs- und Stromdichte zu dem Vierervektor $(j^\mu) = (\rho, \vec{j})$ und die Potentiale zum Viererpotential $(A^\mu) = (\Phi, \vec{A})$ zusammenfassen. Damit reduzieren sich die Maxwellgleichungen, geschrieben mit Hilfe der Potentiale, zu der folgenden inhomogenen Wellengleichung für das Viererpotential:

$$\square A^\mu = j^\mu. \quad (6.3.19)$$

Freilich müssen sich nunmehr auch das elektrische und magnetische Feld und die bzgl. dieser physikalischen Größen geschriebenen Maxwellgleichungen relativistisch kovariant ausdrücken lassen. Wir könnten die oben durchgeführten Schritte nunmehr einfach durch die Komponenten des Viererpotentials ausdrücken und die kovariante Form ablesen. Wesentlich einfacher ist es jedoch, die allgemeine Kovarianz und die **Eichinvarianz** zu Hilfe zu nehmen, um die relativistisch kovariante Form der Felder zu ermitteln. Gemäß (6.3.6) und (6.3.8) sind die Felder durch Ableitungen nach den Raumzeitvariablen gegeben. Durch Ableitungen lassen sich aus den Vierervektorkomponenten die Tensorkomponenten $\partial_\mu A_\nu$ gewinnen. Weiter muß nun aber auch die Eichinvarianz der Felder gewährleistet sein. Die Eichtransformation (6.3.9) und (6.3.10) liest sich kovariant geschrieben wie folgt:

$$A'^\mu = A^\mu - \partial^\mu \chi. \quad (6.3.20)$$

⁴Für historischen die Gründe, warum wir hier dem neueren Sprachgebrauch folgen und die Eichbedingung nach dem dänischen Physiker Ludwig Lorenz und nicht nach dem holländischen Physiker Hendrik Antoon Lorentz benennen vgl. [JO01]

Auf den tieferen Grund für die wesentliche Vereinfachung dieser Gleichungen im manifest kovarianten Kalkül werden wir im nächsten Kapitel noch zurückkommen, hängt die Eichinvarianz doch eng mit der Darstellungstheorie der Poincarégruppe zusammen, die wir zum Ausgangspunkt nehmen wollen, um eine manifest kovariante relativistische Quantentheorie zu formulieren.

Aus den og. Tensorcomponenten läßt sich nun aber sofort ein eichinvarianter Ausdruck gewinnen, nämlich der **Faraday-** oder **Feldstärketensor**, dem wir bereits in Abschnitt 6.2.4 bei der Bewegung eines geladenen Teilchens in einem vorgegebenen elektromagnetischen Feld begegnet sind:

$$F_{\mu\nu} := \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu. \quad (6.3.21)$$

Als total antisymmetrischer Tensor zweiter Stufe besitzt dieser Tensor auch gerade sechs unabhängige Komponenten, entsprechend den sechs Feldfreiheitsgraden \vec{E} und \vec{B} im „Dreierformalismus“. Den Zusammenhang zu \vec{E} und \vec{B} können wir durch Zerlegung in zeitliche und räumliche Komponenten ersehen:

$$\begin{aligned} F_0^n &= \partial_0 A^n - \partial^n A_0 = \frac{\partial A^n}{\partial t} + \frac{\partial \Phi}{\partial x^n} = -E_n, \\ F_m^n &= \partial_m A^n - \partial^n A_m = \frac{\partial A^n}{\partial x^m} - \frac{\partial A^m}{\partial x^n} = \epsilon_{mnr} (\text{rot } \vec{A})_r = \epsilon_{mnr} B^r. \end{aligned} \quad (6.3.22)$$

Relativistisch gesehen haben wir es also nicht mit zwei getrennten elektrischen und magnetischen Feldern zu tun, handelt es sich doch lediglich um Komponenten des kovarianten Faraday-Tensors. Wir sprechen daher auch lieber vom elektromagnetischen Feld oder der elektromagnetischen Wechselwirkung. Besonders übersichtlich ergibt sich der Zusammenhang zwischen elektrischem und magnetischem Feld und dem kovarianten Feldstärketensor mittels ko- oder kontravarianten Komponenten, wo er als antisymmetrische Matrix wie folgt geschrieben werden kann:

$$(F^{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} 0 & -E^1 & -E^2 & -E^3 \\ E^1 & 0 & -B^3 & B^2 \\ E^2 & B^3 & 0 & -B^1 \\ E^3 & -B^2 & B^1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.3.23)$$

Das Transformationsverhalten der elektromagnetischen Feldgrößen unter Lorentztransformationen ist nunmehr ebenfalls offensichtlich. Das Viererpotential transformiert sich als Vektorfeld. Ist also der Wechsel von einem Inertialsystem zu einem anderen durch die Lorentztransformation gemäß (6.1.11), d.h. im Matrizenkalkül $x' = \Lambda x$, gegeben, lauten die Komponenten des Viererpotentialfeldes im neuen Bezugssystem

$$A'(x') = \Lambda A(x) = \Lambda A(\Lambda^{-1} x'). \quad (6.3.24)$$

Eine physikalische Größe mit einem solchen Transformationsverhalten bezeichnen wir als **Vierervektorfeld**. Entsprechend transformiert sich der Feldstärketensor gemäß

$$F'^{\mu\nu}(x') = \Lambda^\mu{}_\rho \Lambda^\nu{}_\sigma F^{\rho\sigma}(\Lambda^{-1} x'), \quad (6.3.25)$$

also wie ein **Tensorfeld zweiter Stufe**. Insbesondere ergibt sich daraus für einen drehungsfreien Boost (6.1.25) für die elektrischen und magnetischen Feldkomponenten

$$\begin{aligned} \vec{E}' &= (\vec{n} \cdot \vec{E})\vec{n} + \frac{\vec{n} \times (\vec{E} \times \vec{n}) + \vec{v} \times \vec{B}}{\sqrt{1 - \vec{v}^2}}, \\ \vec{B}' &= (\vec{n} \cdot \vec{B})\vec{n} + \frac{\vec{n} \times (\vec{B} \times \vec{n}) - \vec{v} \times \vec{E}}{\sqrt{1 - \vec{v}^2}}. \end{aligned} \quad (6.3.26)$$

Nun wollen wir noch die Maxwellgleichungen in kovarianter Form mittels des Feldstärketensors schreiben. Dies hat den Vorteil, daß es sich um **eichinvariante Gleichungen** handelt. Die Maxwellgleichungen (6.3.1) müssen sich als Differentialgleichungen 1. Ordnung des Feldstärketensors ausdrücken lassen. Aus dem Faradaytensor läßt sich durch **Hodge-Dualisierung** ein zweiter antisymmetrischer Tensor zweiter Stufe bilden, nämlich

$$(F^\dagger)^{\mu\nu} = \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\rho\sigma}. \quad (6.3.27)$$

Dabei sind die Komponenten des **Levi-Civita-Tensors** dadurch definiert, daß $\epsilon^{0123} = 1$ und das Symbol ansonsten total antisymmetrisch unter Vertauschung seiner vier Indizes sein soll. Der Levi-Civita-Tensor ist übrigens nur ein Tensor bzgl. unimodularer Transformationen, also solchen Transformationen mit Determinante 1, hinsichtlich der Lorentzgruppe also nur bzgl. der $SO(1,3)$, denn offenbar gilt für beliebige Transformationsmatrizen Λ

$$\epsilon'^{\mu\nu\rho\sigma} = \Lambda^\mu_{\mu'} \Lambda^\nu_{\nu'} \Lambda^\rho_{\rho'} \Lambda^\sigma_{\sigma'} \epsilon^{\mu'\nu'\rho'\sigma'} = \det \Lambda \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma}. \quad (6.3.28)$$

Unter allgemeinen linearen Transformationen handelt es sich genau genommen um eine Tensordichte. Für die total kovarianten Komponenten gilt aufgrund derselben Überlegung

$$\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} = \det g \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} = -\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma}. \quad (6.3.29)$$

Es ist wichtig zu betonen, daß die hier festgelegte Konvention nicht einheitlich in der Literatur eingehalten wird, so daß bei Vergleich von Formeln aus verschiedenen Quellen Vorsicht geboten ist. Wir folgen der Konvention in [PS95].

Wir können nun also aus dem Faradaytensor und seinem Dual durch Kontraktion mit dem Vierergradienten ∂_μ zwei Vektorausdrücke bilden. Aufspalten dieser Gleichungen in räumliche und zeitliche Komponenten und Vergleich mit den Maxwellgleichungen (6.3.1-6.3.2) ergibt dann deren relativistisch kovariante Form (*Übung!*)

$$\partial_\mu (F^\dagger)^{\mu\nu} = 0, \quad \partial_\mu F^{\mu\nu} = j^\nu. \quad (6.3.30)$$

Die Kontinuitätsgleichung (6.3.4), die wie oben gezeigt dem Satz von der Erhaltung der elektrischen Ladung entspricht, ergibt sich aus der zweiten Gleichung sofort durch eine weitere Kontraktion mit ∂_ν und der Tatsache, daß der Feldstärketensor antisymmetrisch und die partiellen Ableitungen miteinander kommutieren, $\partial_\mu \partial_\nu = \partial_\nu \partial_\mu$ in der Tat sofort

$$\partial_\nu j^\nu = \partial_\nu \partial_\mu F^{\mu\nu} = 0. \quad (6.3.31)$$

Wir wenden uns nun einigen einfachsten Grundlagen der Lösungstheorie der Maxwellgleichungen, die uns später in der Quantenfeldtheorie noch nützlich sein werden, zu.

6.3.3 Lösung der quellenfreien Maxwellgleichungen

Beginnen wir mit dem Fall des ladungs- und stromfreien Raums, also der Form sich im freien Raume ausbreitender elektromagnetischer Wellen. Betrachten wir dazu die Wellengleichung (6.3.19) für das Viererpotential, wobei allerdings darauf zu achten ist, daß die Lorenzbedingung (6.3.14) als Nebenbedingung erfüllt sein muß. Kovariant geschrieben lautet sie

$$\partial_\mu A^\mu = 0. \quad (6.3.32)$$

Wie im Anschluß an (6.3.15) bemerkt, legt jedoch diese Bedingung das Viererpotential für den quellenfreien Fall noch nicht eindeutig fest. Vielmehr haben wir noch die Freiheit, durch eine Eichtransformation $A_\mu \rightarrow A_\mu + \partial_\mu \chi$ eine Komponente des Viererpotentials zu eliminieren. Um auch dies Lorentzkovariant zu formulieren, verlangen wir

$$n_\mu A^\mu = 0, \quad (6.3.33)$$

wobei n^μ ein von 0 verschiedener Vierervektor ist. Je nach Wahl eines zeit- oder raumartigen Vektors nennt man eine solche Eichbedingung eine zeit- bzw. raumartige Eichbedingung. Wie wir im nächsten Abschnitt sehen werden, ist eine natürliche Wahl $(n^\mu) = (1, 0, 0, 0)$. Dann verlangen wir also $A^0 = \Phi = 0$. Diese Wahl nennt man in der Literatur auch die **Strahlungseichung**. Zusammen mit (6.3.32) folgt daraus, daß in dieser Eichung auch

$$\operatorname{div} \vec{A} = 0 \quad (6.3.34)$$

gilt.

Schreiben wir nun das verbliebene Dreierpotential in Form eines Fourierintegrals

$$\vec{A}(t, \vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{k}}{\sqrt{(2\pi)^3 2\omega(\vec{k})}} \vec{a}(t, \vec{k}) \exp(i\vec{k}\vec{x}) \quad \text{mit} \quad \omega(\vec{k}) = |\vec{k}|, \quad (6.3.35)$$

folgt für die Komponenten⁵

$$(\partial_t^2 + \vec{k}^2) \vec{a} = 0, \quad (6.3.36)$$

also

$$\vec{a}(t, \vec{k}) = \vec{a}_1(\vec{k}) \exp[-i\omega(\vec{k})t] + \vec{a}_2(\vec{k}) \exp[+i\omega(\vec{k})t] \quad \text{mit} \quad \omega(\vec{k}) = |\vec{k}|. \quad (6.3.37)$$

Die Nebenbedingung (6.3.34) verlangt dann nur noch

$$\vec{k} \cdot \vec{a}_j(\vec{k}) = 0. \quad (6.3.38)$$

Seien also $\vec{\epsilon}(\vec{k}, \alpha)$ mit $\alpha \in \{1, 2\}$ zwei zu \vec{k} senkrechte voneinander linear unabhängige reelle **Polarisationsvektoren**, so ist die allgemeine Lösung der quellenfreien Maxwellgleichungen (in **Strahlungseichung**) also durch (6.3.35) mit

$$\vec{a}(t, \vec{k}) = \sum_{\alpha=1}^2 \vec{\epsilon}(\vec{k}, \alpha) \left\{ A_{1,\alpha}(\vec{k}) \exp[-i\omega(\vec{k})t + i\vec{k}\vec{x}] + A_{2,\alpha}(\vec{k}) \exp[+i\omega(\vec{k})t + i\vec{k}\vec{x}] \right\} \quad (6.3.39)$$

gegeben. Für das folgende ist es bequem, diese Vektoren zueinander orthogonal zu wählen, und zwar so, daß für $\alpha \in \{1, 2\}$

$$\vec{\epsilon}(\vec{k}, \alpha) \cdot \vec{\epsilon}(\pm\vec{k}, \alpha') = (\pm 1)^\alpha \delta_{\alpha\alpha'} \quad (6.3.40)$$

und

$$\vec{\epsilon}(\vec{k}, 1) \times \vec{\epsilon}(\vec{k}, 2) = \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} := \hat{k}, \quad \vec{\epsilon}(-\vec{k}, \alpha) = (-1)^\alpha \vec{\epsilon}(\vec{k}, \alpha) \quad (6.3.41)$$

ist. Wählen wir also willkürlich zu vorgegebenem \vec{k} die Vektoren $\vec{\epsilon}(\vec{k}, 2) = \vec{\epsilon}(-\vec{k}, 2) \perp \vec{k}$. Setzen wir dann

$$\vec{\epsilon}(\vec{k}, 1) = \vec{\epsilon}(\vec{k}, 2) \times \hat{k}, \quad (6.3.42)$$

⁵Der Sinn für die spezifische Wahl des Integralmaßes wird sogleich noch deutlich werden.

so erfüllen die so definierten Polarisationsvektoren die Bedingungen (6.3.40) und (6.3.41) (*Übung!*). Jedenfalls zeigt (6.3.39), daß nur zwei der ursprünglich vier Komponenten des Viererpotentials physikalisch sind: nämlich zwei voneinander linear unabhängige **transversal polarisierten Wellen**. Um wenigstens die Exponenten in (6.3.35) kovariant zu machen, können wir dies auch in der Form

$$\vec{A}(t, \vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{k}}{\sqrt{(2\pi)^3 2\omega(\vec{k})}} \sum_{\alpha=1}^2 \vec{\epsilon}(\vec{k}, \alpha) \left\{ A_\alpha(\vec{k}) \exp[-ikx] + B_\alpha(\vec{k}) \exp[+ikx] \right\}_{k^0 = \omega(|\vec{k}|)} \quad (6.3.43)$$

mit $A_\alpha(\vec{k}) = A_{1,\alpha}(\vec{k})$, $B_\alpha(\vec{k}) = A_{2,\alpha}(-\vec{k})$

schreiben.

Dabei sind die beiden linear unabhängigen **Polarisationsvektoren** durch die folgenden linearen Gleichungen bestimmt und ansonsten frei wählbar

$$k_\mu \epsilon_\alpha^\mu(k) = 0, \quad n_\mu \epsilon_\alpha^\mu(k) = 0. \quad (6.3.44)$$

Da die A^μ reelle Felder sind, muß bei reeller Wahl von ϵ^μ noch gelten

$$B_\alpha(\vec{k}) = A_\alpha^*(\vec{k}). \quad (6.3.45)$$

Die endgültige Form der Lösung der freien Maxwellgleichungen lautet somit also

$$A^\mu(x) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{k}}{\sqrt{(2\pi)^3 2\omega(\vec{k})}} \sum_{\alpha=1}^2 \epsilon_\alpha^\mu(k) \left[A_\alpha(\vec{k}) \exp(-ikx) + A_\alpha^*(\vec{k}) \exp(+ikx) \right]_{k^0 = +\omega(\vec{k})}. \quad (6.3.46)$$

Die spezifische Gestalt von $A_\alpha(\vec{k})$ muß durch Anfangsbedingungen festgelegt werden. Wir werden jedoch für die Quantenfeldtheorie lediglich diese allgemeine Lösungsform der freien Maxwellgleichungen benötigen.

6.3.4 Lösung der Maxwellgleichungen bei vorgegebenen Quellen

Wenden wir uns nun der Lösung der Maxwellgleichungen bei vorgegebenen Ladungen und Strömen zu. In Lorenz-Eichung haben wir lediglich die Wellengleichung (6.3.19) zu lösen. Wir gelangen zum Ziel, wenn wir eine **Greensche Funktion des d'Alembert-Operators** finden können, d.h. eine Funktion G , die

$$\square_x G(x - x') = \delta^{(4)}(x - x') \quad (6.3.47)$$

erfüllt. Dann wird (6.3.19) offenbar durch

$$A^\mu(x) = \int d^4 x' G(x - x') j^\mu(x') \quad (6.3.48)$$

gelöst. Daß wir die Greensche Funktion in der spezifischen Gestalt als Funktion von $x - x'$ ansetzen können, ergibt sich daraus, daß die rechte Seite von (6.3.47) lediglich von dieser Koordinatendifferenz abhängt. Wir suchen ohnehin nur eine partikuläre Lösung der Gleichung. Die Greensche Funktion selbst ist freilich nur bis auf eine Funktion, die die quellenfreie Wellengleichung erfüllt, bestimmt.

Hier wollen wir die **retardierte Greensche Funktion** aufsuchen, die der physikalischen Situation entspricht, daß zu einer bestimmten Zeit t_0 irgendwelche Quellen „eingeschaltet“ werden. Die Kausalitätsbedingung der Physik verlangt dann, daß A^μ (genauer gesagt die eichinvarianten Feldkomponenten

$F_{\mu\nu}$!) **retardierte Funktionale der Quellen** sein müssen, d.h. $A^\mu(t, \vec{x})$ kann nur von den Quellen zu früheren Zeiten $t' < t$ abhängen. Dies wird durch den Ansatz

$$G(x - x') = \Theta(t - t')g(x - x') \quad (6.3.49)$$

erreicht. Wie wir gleich sehen werden, bestimmt dies g eindeutig.

Um G zu bestimmen, setzen wir $z = x - x'$ und schreiben

$$G(z) = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \tilde{G}(z^0, \vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{z}). \quad (6.3.50)$$

Aus (6.3.47) folgt dann

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial(z^0)^2} + \vec{k}^2 \right) \tilde{G}(z^0, \vec{k}) = \delta(z^0). \quad (6.3.51)$$

Außer bei $z^0 = 0$ besitzt die Gleichung die Lösung

$$\tilde{G}(z^0, \vec{k}) = A \exp[-i\omega(\vec{k})z^0] + B \exp[+i\omega(\vec{k})z^0], \quad (6.3.52)$$

wobei A und B für $z^0 < 0$ und $z^0 > 0$ jeweils unabhängig zu bestimmende Konstanten sind. Wegen des Ansatzes (6.3.49) ist $A = B = 0$ für $z^0 < 0$. Wir dürfen weiter annehmen, daß $\tilde{G}(z^0, \vec{k})$ als Funktion von z^0 bei $z^0 = 0$ stetig ist. Durch Integration von (6.3.51) bzgl. z^0 über ein sehr kleines Intervall $(-\epsilon, \epsilon)$ ergibt sich daraus die Sprungbedingung für die Ableitung:

$$\frac{\partial}{\partial z^0} \tilde{G}(0^+, \vec{k}) - \frac{\partial}{\partial z^0} \tilde{G}(0^-, \vec{k}) = 1. \quad (6.3.53)$$

Dies in (6.3.52) eingesetzt ergibt

$$A + B = 0, \quad -i(A - B)\omega(\vec{k}) = 1, \quad (6.3.54)$$

d.h.

$$A = -B = \frac{i}{2\omega(\vec{k})}. \quad (6.3.55)$$

Es ist also

$$G(z) = i\Theta(z^0) \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3 2\omega(\vec{k})} \left\{ \exp[i\vec{k} \cdot \vec{z} - i\omega(\vec{k})z^0] - \exp[i\vec{k} \cdot \vec{z} + i\omega(\vec{k})z^0] \right\}. \quad (6.3.56)$$

Dieses Integral existiert freilich nicht im üblichen Sinne und ist als Distribution aufzufassen, wie es für eine Greensche Funktion i.a. auch zu erwarten ist. Die Distribution läßt sich in geschlossener Form ermitteln. Dazu wählen wir für die \vec{k} -Integration ein Kugelkoordinatensystem (K, ϑ, φ) mit der Polarrichtung in Richtung von \vec{z} und führen einen regulierenden Faktor $\exp(-\epsilon K)$ mit $\epsilon > 0$ ein. Dann ist

$$g(z) = \frac{i}{8\pi^2} \int_0^\infty dK K \int_{-1}^1 du \exp(-\epsilon K) [\exp(iKzu - iKz^0) - \exp(iKzu + iKz^0)], \quad (6.3.57)$$

wobei wir $K := |\vec{k}| = \omega(\vec{k})$ benutzt, $u = \cos \vartheta$ gesetzt und die triviale Integration über φ ausgeführt haben. Bei endlichem Regulator $\epsilon > 0$ ist

$$g(z) = \frac{1}{4\pi^2 z} \left[\frac{\epsilon}{\epsilon^2 + (z_0 - z)^2} - \frac{\epsilon}{\epsilon^2 + (z_0 + z)^2} \right]. \quad (6.3.58)$$

Für $\epsilon \rightarrow 0^+$ ergibt sich

$$g(z) = \frac{1}{4\pi z} [\delta(z_0 - z) - \delta(z_0 + z)]. \quad (6.3.59)$$

Es ist also

$$G(z) = \frac{1}{4\pi z} \delta(z_0 - z) \quad (6.3.60)$$

oder kovariant geschrieben

$$G(z) = \frac{1}{2\pi} \Theta(z_0) \delta(z_\mu z^\mu). \quad (6.3.61)$$

Wir bemerken, daß (6.3.61) bzgl. eigentlich orthochroner Lorentztransformationen ein Skalar ist. Dies kann man auch bereits an (6.3.56) sehen, denn wir können diese Gleichung auch in der kovarianten Form

$$G(z) = i\Theta(z^0) = \int_{\mathbb{R}^4} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \Theta(k^0) 2\pi \delta(k \cdot k) [\exp(-ik \cdot z) - \exp(+ik \cdot z)] \quad (6.3.62)$$

schreiben. Dabei haben wir die Identität

$$\Theta(k^0) \delta(k \cdot k) = \delta[(k^0)^2 - \vec{k}^2] = \frac{1}{2k_0} \delta(k^0 - |\vec{k}|) \quad (6.3.63)$$

verwendet.

Setzen wir nun (6.3.60) in (6.3.48) ein, ergibt sich schließlich die gesuchte Lösung der Maxwellgleichungen bei vorgegebenen Ladungs- und Stromverteilungen:

$$A^\mu(t, \vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x}' \frac{j^\mu(t - |\vec{x} - \vec{x}'|, \vec{x}')}{4\pi |\vec{x} - \vec{x}'|}, \quad (6.3.64)$$

wobei charakteristischerweise die Quellen zu dem zum betrachteten Aufpunkt \vec{x} gehörigen **retardierten Zeitpunkt**

$$t_{\text{ret}} = t - |\vec{x} - \vec{x}'| \quad (6.3.65)$$

zu nehmen sind, zeitliche Änderungen des elektromagnetischen Feldes aufgrund sich zeitlich ändernder Quellen also mit Lichtgeschwindigkeit ausbreiten. Daher wird die hier betrachtete Greensche Funktion genauer auch als **retardierte Greensche Funktion** und die Potentiale (6.3.64) als die **retardierten Potentiale** bezeichnet. Wir werden später noch mit andersartigen Greenschen Funktionen zu tun haben, die sich von der retardierten durch eine Lösung der homogenen Wellengleichung unterscheiden.

Wir müssen schließlich noch die innere Konsistenz unserer Herleitung sicherstellen, indem wir nachweisen, daß die Lorenzbedingung (6.3.32) erfüllt ist. Dazu schreiben wir (6.3.64) in der unintegrierten Form

$$\begin{aligned} \partial_\mu A^\mu(x) &= \int d^4 x' \frac{\partial}{\partial x^\mu} G(x - x') j^\mu(x') = - \int d^4 x' j^\mu(x') \frac{\partial}{\partial x'^\mu} G(x - x') \\ &= + \int d^4 x' G(x - x') \frac{\partial j^\mu(x')}{\partial x'^\mu} = 0. \end{aligned} \quad (6.3.66)$$

Im letzten Schritt haben wir die für die Lösbarkeit der Maxwellgleichungen notwendige Kontinuitätsgleichung (6.3.31), die dem Gesetz von der Erhaltung der elektrischen Ladung entspricht, verwendet. Hieraus wird bereits der enge Zusammenhang der Kontinuitätsgleichung für den Strom und der Eichinvarianz deutlich. Wir werden im nächsten Abschnitt diesen Zusammenhang aus Sicht des **Noether'schen Theorems** noch genauer ausarbeiten.

6.3.5 Kanonische Formulierung der Elektrodynamik

Wie jedes dynamische System können auch die elektromagnetischen Felder und ihre Quellen mit Hilfe des Hamiltonschen kanonischen Formalismus behandelt werden (s. Abschnitt 4.3.5). Wir gehen vom Viererpotential als elementarem Feld zur Beschreibung des elektromagnetischen Feldes aus. Das Wirkungsfunktional für die freien Felder sollte ein quadratisches Funktional sein. Setzen wir es als Lorentz-invariante Größe an, können wir zudem sicher sein, daß wir kovariante Gleichungen erhalten. Zudem sollte die Wirkung auch eichinvariant sein. Dies legt es nahe, für das freie Feld den Ansatz

$$\mathcal{L}_0 = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}, \quad F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \quad (6.3.67)$$

zu wählen. In der Tat, variieren wir das Wirkungsfunktional

$$S_0[A_\mu] = \int d^4x \mathcal{L}_0, \quad (6.3.68)$$

erhalten wir

$$\delta S_0 = -\frac{1}{2} \int d^4x F^{\mu\nu} \delta F_{\mu\nu} = -\frac{1}{2} \int d^4x F^{\mu\nu} (\partial_\mu \delta A_\nu - \partial_\nu \delta A_\mu). \quad (6.3.69)$$

Vertauschen wir im letzten Term die Summationsindizes und verwenden die Antisymmetrie des Feldstärketensors $F^{\mu\nu}$, ergibt sich nach einer partiellen Integration

$$\delta S_0 = - \int d^4x F^{\mu\nu} \partial_\mu \delta A_\nu = + \int d^4x \delta A^\nu \partial_\mu F^{\mu\nu}. \quad (6.3.70)$$

Da wir weiter dem Hamiltonschen Prinzip gemäß die A^ν unabhängig voneinander variieren dürfen, wird die Wirkung also stationär, wenn

$$\delta S = 0 \Rightarrow \partial_\mu F^{\mu\nu} = 0 \quad (6.3.71)$$

ist, und das sind in der Tat die Maxwellgleichungen (6.3.30) für den quellenfreien Raum ($j^\mu = 0$), denn der ersten Gleichung ist bereits durch den Ansatz des Feldstärketensors als Viererrotation eines Vektorpotentials Rechnung getragen.

Die Wechselwirkung mit vorgegebenen äußeren Quellen j^μ wird durch Hinzufügen des Terms

$$\mathcal{L}_{\text{int}} = -A_\nu j^\nu \quad (6.3.72)$$

Rechnung getragen. Denn dann ist die Variation der Wirkung durch

$$\delta S = \delta S_0 + \delta S_{\text{int}} = \int d^4x \delta A^\nu (\partial_\mu F^{\mu\nu} - j^\nu) \quad (6.3.73)$$

gegeben, und das Hamiltonsche Prinzip verlangt das Verschwinden der Klammer, also

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = j^\nu, \quad (6.3.74)$$

und das ist in der Tat die kovariant geschriebene Form der inhomogenen Maxwellgleichungen (6.3.30). Wir müssen weiter noch die Eichinvarianz des Wirkungsfunktional überprüfen⁶. Das freie Funktional S_0 ist eichinvariant, denn es hängt nur vom eichinvarianten Feldstärketensor $F_{\mu\nu}$ ab. Der Wechselwirkungsterm (6.3.72) verlangt allerdings eine gesonderte Untersuchung, denn hier tritt das Vektorpotential selbst auf. Führen wir also eine Eichtransformation (6.3.20) durch, wobei die äußeren Quellen ungeändert bleiben. Nun ist

$$S_{\text{int}}[A'_\mu] = - \int d^4x A'_\mu j^\mu = - \int d^4x (A_\mu + \partial_\mu \chi) j^\mu = - \int d^4x (A_\mu j^\mu - \chi \partial_\mu j^\mu). \quad (6.3.75)$$

Dies stimmt für beliebige χ nur dann mit $S_{\text{int}}[A_\mu]$ überein, wenn

$$\partial_\mu j^\mu = 0, \quad (6.3.76)$$

also j^μ ein erhaltener Strom ist. Dies haben wir ja bereits oben mehrfach festgestellt: Die Maxwellgleichungen sind nur konsistent, wenn der elektromagnetische Viererstrom die Kontinuitätsgleichung (6.3.76) erfüllt.

6.3.6 Anwendung des Noether-Theorems auf die Elektrodynamik

Nun können wir die feldtheoretische Version des Noether-Theorems, wie in Abschnitt 4.3.6 dargestellt, auf die Elektrodynamik anwenden.

Definieren wir den **kanonischen Energie-Impuls-Tensor** des freien elektromagnetischen Feldes gemäß (4.3.86), wobei wir hier bei über sämtliche Feldfreiheitsgrade zu summieren haben summieren (in unserem Falle also über die vier Vektorkomponenten A^μ), erhalten wir unter Anwendung der Einsteinschen Summationskonvention

$$\Theta_{\text{can}}^{\mu\nu} = \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial (\partial_\mu A^\rho)} \partial^\nu A^\rho - \mathcal{L}_0 g^{\mu\nu} = F_\rho{}^\mu \partial^\nu A^\rho + \frac{1}{4} g^{\mu\nu} F_{\rho\sigma} F^{\rho\sigma}. \quad (6.3.77)$$

Dieser Ausdruck ist allerdings nicht eichinvariant und besitzt daher a priori keine physikalisch eindeutige Interpretation. Andererseits definiert dieser Tensor wegen der Translationsinvarianz in Raum und Zeit, die aufgrund der Diskussion im Anschluß an Gl. (4.3.98) gewährleistet ist, wenn die Lagrangedichte nicht explizit von den Raum-Zeit-Koordinaten abhängt, die Erhaltungsgrößen **Energie und Impuls**

$$P^\nu(t) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \Theta_{\text{can}}^{0\nu}(x). \quad (6.3.78)$$

Dies ist ein zeitunabhängiger Vektor, weil die lokale Form des Erhaltungssatzes

$$\partial_\mu \Theta_{\text{can}}^{\mu\nu} = 0 \quad (6.3.79)$$

gilt, wie man auch direkt aus der Definition (6.3.77) des kanonischen Energie-Impuls-Tensors unter Berücksichtigung der Maxwellgleichungen (6.3.71) nachweist (*Übung!*). Wegen seiner Eichabhängigkeit können aber die Komponenten $\Theta_{\text{can}}^{0\nu}$ nicht ohne weiteres als Energie- oder Impulsdichte des elektromagnetischen Feldes interpretiert werden.

⁶Um eichinvariante Gleichungen zu erhalten, genügt es streng genommen, daß die Variation der Wirkung eichinvariant ist. Daß das Wirkungsfunktional selbst eichinvariant ist, ist dafür zwar hinreichend aber nicht notwendig.

Nun bleiben aber alle Folgerungen ungeändert, wenn wir einen neuen Energie-Impuls-Tensor der Form

$$\Theta^{\mu\nu} = \Theta_{\text{can}}^{\mu\nu} + \partial_\rho \omega^{\rho\mu\nu} \quad (6.3.80)$$

mit einem beliebigen in den Indizes ρ und μ antisymmetrischen Tensor dritter Stufe $\omega^{\rho\mu\nu}$ definieren, denn dann gilt wegen dieser Antisymmetrie und wegen (6.3.79) auch

$$\partial_\mu \Theta^{\mu\nu} = 0. \quad (6.3.81)$$

Außerdem bleiben Energie und Impuls (6.3.78) ungeändert,

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \partial_\rho \omega^{\rho 0\nu} = 0, \quad (6.3.82)$$

denn wegen $\omega^{00\nu} = 0$ ist der Integrand eine reine Dreierdivergenz und kann daher mit dem Gaußschen Integralsatz in ein Oberflächenintegral über eine im unendlichen gelegene Oberfläche umgeformt werden. Da wir stillschweigend annehmen, daß die Felder im Unendlichen hinreichend schnell verschwinden, folgt daraus (6.3.82). Wir können also statt (6.3.78)

$$P^\nu(t) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \Theta^{0\nu}(x) \quad (6.3.83)$$

schreiben. Wir müssen nun nur noch ein solches $\omega^{\rho\mu\nu}$ mit den vorausgesetzten Eigenschaften finden, so daß (6.3.80) ein eichinvarianter Ausdruck wird. Dies ist für

$$\omega^{\rho\mu\nu} = F^{\mu\rho} A^\nu \quad (6.3.84)$$

der Fall. Für die Lösungen der Feldgleichungen (6.3.71) ist nämlich

$$\partial_\rho \omega^{\mu\nu\rho} = F^{\mu\rho} \partial_\rho A^\nu, \quad (6.3.85)$$

und dies in (6.3.80) eingesetzt liefert unter Berücksichtigung von (6.3.77) den eichinvarianten **symmetrischen Energie-Impuls-Tensor** oder auch **Belinfante-Tensor** [Bel39]

$$\Theta^{\mu\nu} = F^{\mu\rho} F_\rho{}^\nu + \frac{1}{4} F_{\rho\sigma} F^{\rho\sigma} g^{\mu\nu}. \quad (6.3.86)$$

Für die Energie- und Impulsdichte des elektromagnetischen Feldes erhalten wir dann gemäß (6.3.83), im Dreierformalismus ausgedrückt

$$\epsilon = \Theta^{00} = \frac{1}{2}(\vec{E}^2 + \vec{B}^2), \quad S^j = \Theta^{0j} = (\vec{E} \times \vec{B})^j \Rightarrow (P^\mu) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \begin{pmatrix} \epsilon \\ \vec{S} \end{pmatrix}. \quad (6.3.87)$$

Dabei bezeichnet P^μ der **Gesamtenergie-Impulsvierervektor** des freien elektromagnetischen Feldes. Wir erhalten also die aus der Elektrodynamikvorlesung bekannten Ausdrücke für die Energie- und Impulsdichte. Dabei heißt \vec{S} auch Poynting-Vektor⁷.

Die Boosts und Drehungen behandeln wir in der Relativitätstheorie am besten gemeinsam, denn sie bilden zusammen genommen ja die eigentlich orthochrone Lorentzgruppe $SO(1,3)^\uparrow$. Die Drehungen

⁷Es ist klar, daß es sich dabei um einen Dreiervektor, nicht jedoch um die Raumkomponenten eines Vierervektors handelt.

wirken auf die Raum-Zeit-Koordinaten gemäß (4.3.100). Dies schreiben wir aber geschickter in der Form

$$\delta x^\mu = \delta \varphi^\mu{}_\nu x^\nu, \quad (6.3.88)$$

wobei

$$\delta \varphi^0{}_0 = \delta \varphi^a{}_0 = \delta \varphi^0{}_b = 0, \quad \delta \varphi^a{}_b = -\epsilon^{abc} n^c \delta \varphi. \quad (6.3.89)$$

Für einen Boost mit der infinitesimalen Geschwindigkeit $\delta \vec{v}$ erhält man gemäß (6.1.28) unter Beachtung, daß $\gamma = 1 + \mathcal{O}(\delta \vec{v}^2)$

$$(\delta x^\mu) = - \begin{pmatrix} \delta \vec{v} \cdot \vec{x} \\ \delta \vec{v} x^0 \end{pmatrix}. \quad (6.3.90)$$

In Komponenten ergibt dies für $a, b \in \{1, 2, 3\}$.

$$\delta \varphi^0{}_0 = \delta \varphi^a{}_b = 0, \quad \delta \varphi^0{}_a = -\delta v^a, \quad \delta \varphi^a{}_0 = -\delta v^a. \quad (6.3.91)$$

Die sechs Parameter für eine infinitesimale Lorentztransformation lassen sich also in einen antisymmetrischen Tensor $\delta \varphi_{\mu\nu} = -\delta \varphi_{\nu\mu}$ zusammenfassen. Dann ist

$$\delta \varphi^\mu{}_\nu = g^{\mu\mu'} \delta \varphi_{\mu'\nu}. \quad (6.3.92)$$

Es ist auch leicht nachzuweisen, daß $\Lambda^\mu{}_\nu = \delta^\mu{}_\nu + (\delta \varphi^\mu)_{\nu}$ bis auf Größen zweiter Ordnung in den $\delta \varphi^\mu{}_\nu$ die Bedingung (6.1.33) für eine Lorentz-Transformation erfüllt (*Übung*)⁸.

Da das elektromagnetische Viererpotential ein Vektorfeld ist, gilt im Sinne unserer allgemeinen Schreibweise (4.3.69) für infinitesimale Transformationen für Feldtheorien im Lagrangeformalismus

$$\delta x^\mu = \delta \varphi^\mu{}_\nu x^\nu, \quad \delta A^\mu = \delta \varphi^\mu{}_\nu A^\nu. \quad (6.3.93)$$

Da sowohl die Lagrangefunktion (6.3.67) als auch wegen $\det \Lambda = 1$ das Vierervolumenelement d^4x unter Lorentztransformationen invariant sind, liegt tatsächlich Symmetrie unter Lorentztransformationen vor, wobei in (4.3.88) $\delta \Omega^\mu = 0$ gesetzt werden kann. Wegen (4.3.88) bedeutet dies, daß der Ausdruck

$$\frac{1}{2} \delta \varphi_{\nu\rho} J_{\text{can}}^{\mu\nu\rho} \quad (6.3.94)$$

mit dem **kanonischen Boost-Drehimpuls-Vierertensor**

$$J_{\text{can}}^{\mu\nu\rho} = F^{\mu\rho} A^\nu - F^{\mu\nu} A^\rho + \Theta_{\text{can}}^{\mu\rho} x^\nu - \Theta_{\text{can}}^{\mu\nu} x^\rho \quad (6.3.95)$$

ein erhaltener Strom ist, d.h. es gilt für alle Lösungen der Maxwell-Gleichungen

$$\partial_\mu J_{\text{can}}^{\mu\nu\rho} = 0, \quad (6.3.96)$$

was man auch leicht direkt nachrechnet (*Übung*). Nun ist aber, wie oben beim Energie-Impuls-Tensor, (6.3.95) nicht eichinvariant. Verwenden wir allerdings die Bezeichnungen (6.3.84) und ersetzen den kanonischen Energie-Impuls-Tensor gemäß (6.3.80) durch den symmetrischen, folgt nach einigen einfachen Umformungen (*Übung!*)

$$J_{\text{can}}^{\mu\nu\rho} = \Theta^{\mu\rho} x^\nu - \Theta^{\mu\nu} x^\rho + \partial_\sigma (\omega^{\sigma\mu\nu} x^\rho - \omega^{\sigma\mu\rho} x^\nu). \quad (6.3.97)$$

⁸In Wirklichkeit handelt es sich bei den Parametern $\delta \vec{v}$ nicht um infinitesimale Geschwindigkeiten sondern um Rapiditäten. Man sollte also eigentlich $\delta \vec{\eta} = \delta \eta \vec{n}$ schreiben. Wegen $|\vec{v}| = \tanh \eta = \eta + \mathcal{O}(\eta^2)$ stimmen aber für infinitesimale Transformationen wegen $\delta \vec{\eta} = \delta \vec{v} + \mathcal{O}(\delta \vec{\eta}^2)$ die infinitesimale Rapidität und die infinitesimale Geschwindigkeit überein

Die vollständige Divergenz besitzt nun aber genau die Eigenschaften, die wir oben beim kanonischen Energie-Impuls-Tensor verwendet haben, um zum symmetrischen Energie-Impuls-Tensor übergehen zu können. Statt $J_{\text{can}}^{\mu\nu\rho}$ erfüllt also auch der **Belinfante-Boost-Drehimpuls-Tensor**

$$J^{\mu\nu\rho} = \Theta^{\mu\rho} x^\nu - \Theta^{\mu\nu} x^\rho \quad (6.3.98)$$

die Kontinuitätsgleichung $\partial_\mu J^{\mu\nu\rho} = 0$, und da $\Theta^{\mu\nu}$ eichinvariant ist, trifft dies auch für diesen Tensor zu. Für $\mu = 0$ ergeben sich die erhaltenen Größen durch Integration über \vec{x} . Die rein räumlichen Komponenten sind ein antisymmetrischer Dreiertensor zweiter Stufe, der mit Hilfe des dreidimensionalen Levi-Civita-Symbols ϵ^{abc} auf den Drehimpulsvektor abgebildet werden kann, der im Sinne der Hamiltonschen Formulierung der Feldtheorie (und, wie gleich sehen werden, damit auch in der kanonischen quantisierten Version!) die Drehungen erzeugt. Die zeit-räumlichen Komponenten ergeben die entsprechenden drei Erzeugenden für Boosts:

$$J^a = \frac{1}{2} \epsilon^{abc} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} J^{0bc}, \quad (6.3.99)$$

$$K^a = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} J^{0a0}. \quad (6.3.100)$$

In dreidimensionaler Vektorschreibweise gilt dann (*Übung*)

$$\vec{J} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} (\vec{x} \times \vec{S}), \quad (6.3.101)$$

$$\vec{K} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} [\epsilon \vec{x} - t \vec{S}]. \quad (6.3.102)$$

In vierdimensional kovarianter Schreibweise ergibt sich daraus der zeitlich erhaltene antisymmetrische **Boost-Dreh-Tensor**

$$J^{\mu\nu} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} J^{0\mu\nu}. \quad (6.3.103)$$

6.4 Quantisierung des elektromagnetischen Feldes

Bei der kanonischen Quantisierung des elektromagnetischen Feldes gehen wir im Prinzip genauso vor wie in Abschnitt 4.3.5 bei der Quantisierung des Pauli-Spinorfeldes. Allerdings ergeben sich aufgrund der **Eichinvarianz** der Elektrodynamik charakteristische Schwierigkeiten bei der kanonischen Quantisierung. Das wird schon aus der Tatsache verständlich, daß wir ja das elektromagnetische Feld mit den vier Komponenten eines Vektorfeldes beschreiben, wobei aber Felder, die sich nur um den Vierergradienten eines Viererskalarfeldes unterscheiden, dieselbe physikalische Situation beschreiben. Bei der Lösung der ladungs- und stromfreien Maxwell-Gleichungen haben wir gesehen, daß von den vier Feldfreiheitsgraden nur zwei physikalische Bedeutung besitzen. In der oben besprochenen Strahlungseichung sind dies die beiden voneinander unabhängigen Komponenten des Dreiervektors \vec{A} , der die Nebenbedingung $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ (Transversalitätsbedingung) erfüllt.

Formal äußert sich die Überzähligkeit von wenigstens einer Feldkomponente darin, daß der kanonische Feldimpuls zu A^μ

$$\Pi_\mu = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_0 A^\mu)} = F^0_\mu \quad (6.4.1)$$

ergibt. Es ist also $\Pi_0 = 0$, so daß wir $\partial_0 A^0$ in der Hamiltondichte

$$\mathcal{H} = \Pi_\mu A^\mu - \mathcal{L} \quad (6.4.2)$$

nicht durch die kanonischen Impulse ausdrücken können. Der Grund dafür ist, wie oben bereits vermutet, die Eichinvarianz und die Redundanz zweier Feldfreiheitsgrade.

Da die Π_μ gemäß (6.4.1) offensichtlich *keine Vektorfelder* sind, geht in der Hamiltonschen Formulierung des kanonischen Formalismus für Felder die manifeste Lorentz-Invarianz ohnehin verloren. Daher verfolgen wir hier die Strategie, die Eichung vollständig zu fixieren und nur mit den verbleibenden physikalischen Feldfreiheitsgraden zu arbeiten. Wie wir in Abschnitt 6.3.3 gesehen haben, ist eine bequeme Eichfestlegung für das freie Feld die **Strahlungseichung**, d.h.

$$A^0 = 0, \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0. \quad (6.4.3)$$

Damit ist das Problem mit dem fehlenden kanonisch konjugierten Feldimpuls zu A^0 gelöst, denn wir haben diesen Freiheitsgrad durch die Eichfixierung eliminiert. Die zweite Gleichung besagt dann, daß \vec{A} transversal ist, d.h. bei ebenen Wellen ist \vec{A} orthogonal zum Wellenvektor \vec{k} , der die Ausbreitungsrichtung der Welle festlegt.

Da wir nun ohnehin endgültig die manifest kovariante Schreibweise verlassen haben, können wir nun auch in der jetzt bequemeren dreidimensionalen Schreibweise weiterrechnen. Die Lagrangedichte ist eichinvariant, und es gilt

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}(\vec{E}^2 - \vec{B}^2). \quad (6.4.4)$$

Die Felder \vec{E} und \vec{B} haben wir dabei durch \vec{A} auszudrücken. Unter Berücksichtigung der Eichbedingungen (6.4.3) gilt

$$\vec{E} = -\partial_t \vec{A} - \vec{\nabla} A^0 = -\dot{\vec{A}}, \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}. \quad (6.4.5)$$

Zusätzlich muß auch noch die zweite Eichbedingung in (6.4.3) erfüllt werden. Diese fordern wir als Nebenbedingung. Die Lagrange-Dichte für die eichfixierte Theorie lautet also

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left[\dot{\vec{A}}^2 - (\vec{\nabla} \times \vec{A})^2 \right] \quad \text{mit} \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0. \quad (6.4.6)$$

Die kanonischen Feldimpulse sind dann

$$\vec{\Pi} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\vec{A}}} = \dot{\vec{A}} = -\vec{E}, \quad (6.4.7)$$

und die **Hamilton-Dichte** lautet folglich

$$\mathcal{H} = \vec{\Pi} \cdot \dot{\vec{A}} - \mathcal{L} = \frac{1}{2}(\vec{E}^2 + \vec{B}^2) = \frac{1}{2} \left[\vec{\Pi}^2 + (\vec{\nabla} \times \vec{A})^2 \right]. \quad (6.4.8)$$

Diese Hamilton-Dichte stimmt mit der oben aus dem Noether-Theorem bestimmten Energiedichte des elektromagnetischen Feldes (6.3.87) überein, wie es sein muß. Die Hamiltonschen kanonischen Gleichungen lauten gemäß (4.3.57)

$$\dot{\vec{A}} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{\Pi}} - \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\vec{\nabla} \vec{\Pi})} = \vec{\Pi}, \quad (6.4.9)$$

$$\dot{\vec{\Pi}} = - \left[\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{A}} - \vec{\nabla} \cdot \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\vec{\nabla} \vec{A})} \right] = \Delta \vec{A} = -\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}). \quad (6.4.10)$$

Dabei haben wir im letzten Schritt die Nebenbedingung $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ berücksichtigt. Mit (6.4.7) und $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$, erhalten wir daraus in der Tat die quellenfreien Maxwell-Gleichungen, also (6.3.1) und (6.3.2) mit $\rho = 0$ und $\vec{j} = 0$. Es ist also wichtig, daß die Elektrodynamik nur unter Einhaltung *beider* Eichbedingungen (6.4.3) durch die Hamiltondichte (6.4.8) beschrieben wird. Kombiniert man (6.4.9) und (6.4.10), erhält man für das Feld \vec{A} die Wellengleichung. Mit der Nebenbedingung $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ lauten also die Bewegungsgleichungen

$$(\partial_t^2 - \Delta)\vec{A} = \square\vec{A} = 0, \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0. \quad (6.4.11)$$

Nun können wir die **kanonische Quantisierung** problemlos durchführen. Dazu ersetzen wir die Felder $\vec{\Pi}$ und \vec{A} durch Feldoperatoren und verlangen die entsprechenden **kanonischen Kommutatorrelationen** analog zu (4.3.64).

Wir quantisieren das elektromagnetische Feld mit **bosonischen Quantisierungsregeln** also mit Kommutatoren. Wir werden dabei sehen, daß eine Quantisierung mit fermionischen Quantisierungsregeln, also mit Antikommutatoren, zu unphysikalischen Folgerungen führt. Dies ist Ausdruck des sehr grundlegenden **Spin-Statistik-Theorems** der relativistischen Quantenfeldtheorie, demzufolge Teilchen mit ganzzahligem Spin stets als Bosonen und solche mit halbzahligem Spin stets als Fermionen quantisiert werden müssen. Wir können im Rahmen dieser Vorlesung nicht näher auf diesen Sachverhalt eingehen. Ein Standardwerk der Spezialliteratur zu diesem Thema ist [SW64]. Eine sehr gute Behandlung des Theorems im Zusammenhang mit der Theorie der unitären Darstellungen der **eigentlich orthochronen Poincaré-Gruppe** (die durch die Lorentz-Gruppe und die raumzeitlichen Translationen durch Hintereinanderausführung erzeugt wird) ist in [Wei95] zu finden.

Wir schreiben also statt der Felder \vec{A} und der dazugehörigen kanonisch konjugierten Impulse $\vec{\Pi}$ Operatoren, die wir als **Feldoperatoren im Heisenberg-Bild der Zeitentwicklung interpretieren**. Wir müssen aber die Nebenbedingung

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 \quad (6.4.12)$$

berücksichtigen.

Nun ist die naive kanonische Kommutatorregel

$$[\mathbf{A}^a(t, \vec{x}), \mathbf{\Pi}^b(t, \vec{y})] = i\delta^{ab}\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) \quad (\text{inkompatibel zu (6.4.12)!}) \quad (6.4.13)$$

offenbar nicht mit dieser Nebenbedingung verträglich, wie man sofort durch Anwenden des Operators $\vec{\nabla}_{\vec{x}}$ auf beiden Seiten von (6.4.13) erkennt.

Wir verzichten also zunächst auf die Erfüllung der Nebenbedingung und postulieren neben der kanonischen Kommutatorregel (6.4.13) auch noch die anderen beiden Regeln

$$[\mathbf{A}^a(t, \vec{x}), \mathbf{A}^b(t, \vec{y})] = [\mathbf{\Pi}^a(t, \vec{x}), \mathbf{\Pi}^b(t, \vec{y})] = 0. \quad (6.4.14)$$

Definieren wir dann den **Hamilton-Operator** durch naives Einsetzen von Feldoperatoren in die Hamilton-Dichte (6.4.8), erhalten wir⁹

$$\mathbf{H}' = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \frac{1}{2} [\vec{\Pi}^2 + (\vec{\nabla} \times \vec{A})^2]. \quad (6.4.15)$$

⁹Wir haben den Strich an den Hamiltonoperator gesetzt, weil dieser weiter unten noch eine Änderung erfahren wird, die aber nichts an den folgenden Rechnungen mit Kommutatorrelationen ändern wird.

Es ist dann mit Hilfe der Kommutatorrelationen (6.4.13) und (6.4.14) leicht zu zeigen, daß die Heisenberg-Bewegungsgleichungen für die Feldoperatoren mit den klassischen Analoga (6.4.9) übereinstimmen,

$$\dot{\vec{A}} = \frac{1}{i} [\vec{A}, \mathbf{H}'] = \vec{\Pi}, \quad \dot{\vec{\Pi}} = \frac{1}{i} [\vec{\Pi}, \mathbf{H}'] = \Delta \vec{A}. \quad (6.4.16)$$

Kombiniert man beide Gleichungen, gilt auch wieder

$$\square \vec{A} = 0. \quad (6.4.17)$$

Lösen wir nun diese Gleichung *unter Berücksichtigung der Nebenbedingung* (6.4.12), ergibt sich in genauer Analogie zum klassischen Fall (6.3.46) die Modenentwicklung

$$\vec{A}(x) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{k}}{\sqrt{(2\pi)^3 2\omega(\vec{k})}} \sum_{\alpha=1}^2 \vec{\epsilon}_{\alpha}(\vec{k}) \left[\mathbf{a}_{\alpha}(\vec{k}) \exp(-ikx) + \mathbf{a}_{\alpha}^{\dagger}(\vec{k}) \exp(+ikx) \right]_{k^0 = +\omega(\vec{k}) := |\vec{k}|}. \quad (6.4.18)$$

Dabei sind die **Polarisationsvektoren** $\vec{\epsilon}_{\alpha}(\vec{k})$ reell gewählt und erfüllen die Bedingungen (6.3.40-6.3.42). Aus den kanonischen Feldkommutatoren (6.4.13) und (6.4.14) ergeben sich nach einigen Rechnungen die Kommutatorregeln (*Übung*)

$$[\mathbf{a}_{\alpha}(\vec{k}), \mathbf{a}_{\beta}(\vec{p})] = 0, \quad [\mathbf{a}_{\alpha}(\vec{k}), \mathbf{a}_{\beta}^{\dagger}(\vec{p})] = \delta_{\alpha\beta} \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{k}). \quad (6.4.19)$$

Dies sind nun genau die Kommutatorregeln für Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren von **Bose-Teilchen**, die einen zusätzlichen diskreten Freiheitsgrad, die „Polarisation“ $\alpha \in \{1, 2\}$, besitzen. Dieser Polarisationsfreiheitsgrad ist analog zu den Spin-z-Komponenten bei den Weyl-Fermionen. Man nennt die in diesem Sinne dem elektromagnetischen Feld zugeordneten „Teilchen“ **Photonen**. Wir können nun den **Fock-Raum** für Vielteilchenzustände ganz analog wie bei den nichtrelativistischen Weyl-Fermionen aufbauen. Freilich ist die Besetzungszahlbasis hier durch die **vollständig symmetrisierten Produkte von** $N \in \{0, 1, 2, \dots\}$ **Photonen-Impuls-Polarisations-Eigenzustände gegeben**. Mit dem **Vakuumzustand**, der durch

$$\mathbf{a}_{\alpha}(\vec{k}) |\Omega\rangle = 0 \quad (6.4.20)$$

bestimmt ist, sind diese Besetzungszustände durch

$$\left| \vec{k}_1, \alpha_1; \vec{k}_2, \alpha_2; \dots; \vec{k}_N, \alpha_N \right\rangle^{\dagger} = \mathbf{a}^{\dagger}(\vec{k}_1, \alpha_1) \mathbf{a}^{\dagger}(\vec{k}_2, \alpha_2) \dots \mathbf{a}^{\dagger}(\vec{k}_N, \alpha_N) |\Omega\rangle \quad (6.4.21)$$

gegeben.

Beachten wir nun die erste Gleichung von (6.4.16) folgt durch einfache Rechnungen (*Übung!*), daß die Lösungen (6.4.18) zwar die kanonischen Kommutatorregeln (6.4.14) erfüllen, während (6.4.13) durch die mit der Nebenbedingung (6.4.12) verträgliche Kommutatorrelation

$$\begin{aligned} [\mathbf{A}^a(t, \vec{x}), \mathbf{\Pi}^b(t, \vec{y})] &= [\mathbf{A}^a(t, \vec{x}), \dot{\mathbf{A}}^b(t, \vec{y})] \\ &= i \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \left(\delta^{ab} - \frac{k^a k^b}{\vec{k}^2} \right) \exp[i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{y})] := i \delta_{\perp}^{ab}(\vec{x} - \vec{y}) \end{aligned} \quad (6.4.22)$$

ersetzt wird. Dabei haben wir die auch sonst noch nützliche **Polarisationssumme**

$$\sum_{\alpha} \epsilon^a(\vec{k}, \alpha) \epsilon^b(\vec{k}, \alpha) = \delta^{ab} - \frac{k^a k^b}{\vec{k}^2} \quad (6.4.23)$$

verwendet, die sich durch direktes Nachrechnen mit Hilfe von (6.3.40-6.3.42) ergibt.

Der Ausdruck auf der rechten Seite von (6.4.22) bezeichnen wir kurz als

$$\delta_{\perp}^{ab}(\vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \left(\delta^{ab} - \frac{k^a k^b}{\vec{k}^2} \right) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) = \delta^{ab} \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) - \delta_{\parallel}^{ab}(\vec{x}). \quad (6.4.24)$$

Um schließlich noch δ_{\parallel}^{ab} zu berechnen bemerken wir, daß

$$\delta_{\parallel}^{ab}(\vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{k^a k^b}{\vec{k}^2} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}); \Rightarrow \quad (6.4.25)$$

$$\Delta \delta_{\parallel}^{ab}(\vec{x}) = - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} k^a k^b \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) = + \partial_a \partial_b \delta^{(3)}(\vec{x}). \quad (6.4.26)$$

Dies können wir formal als die Gleichung eines elektrostatischen Potentials für eine Ladungsdichte, die durch die rechte Seite von Gl. (6.4.26) gegeben ist, ansehen. Die Lösung kennen wir aus der Elektrodynamikvorlesung (s. auch [CH10]):

$$\delta_{\parallel}^{ab}(\vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}' \frac{1}{4\pi|\vec{x} - \vec{x}'|} \partial'_a \partial'_b \delta^{(3)}(\vec{x}') = \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{x}' \delta^{(3)}(\vec{x}') \partial'_a \partial'_b \frac{1}{4\pi|\vec{x} - \vec{x}'|}. \quad (6.4.27)$$

Offenbar können wir darin die Ableitungen nach \vec{x}' durch Ableitungen nach \vec{x} ersetzen und dann die Integration mit diesen Ableitungen vertauschen. Nach Ausintegration der δ -Distribution erhalten wir dann schließlich

$$\delta_{\parallel}^{ab}(\vec{x}) = \partial_a \partial_b \frac{1}{4\pi|\vec{x}|}. \quad (6.4.28)$$

Wegen (6.4.24) finden wir also schließlich

$$\delta_{\perp}^{ab}(\vec{x} - \vec{y}) = \delta^{ab} \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) - \frac{\partial^2}{\partial x^a \partial x^b} \frac{1}{4\pi|\vec{x} - \vec{y}|} = \delta^{ab} \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) - \frac{\partial^2}{\partial y^a \partial y^b} \frac{1}{4\pi|\vec{x} - \vec{y}|}. \quad (6.4.29)$$

Wie wir nun zeigen wollen, ist dies aber für die Gültigkeit der Bewegungsgleichungen irrelevant. Dazu setzen wir die Modenentwicklung (6.4.18) in (6.4.15) ein. Nach einiger Rechnung (*Übung*) liefert dies

$$\mathbf{H}' = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k} \sum_{\alpha=1,2} \frac{|\vec{k}|}{2} \left[\mathbf{a}_{\alpha}^{\dagger}(\vec{k}) \mathbf{a}_{\alpha}(\vec{k}) + \mathbf{a}_{\alpha}(\vec{k}) \mathbf{a}_{\alpha}^{\dagger}(\vec{k}) \right]. \quad (6.4.30)$$

Dieser Ausdruck erweist sich nun aber als problematisch. Bilden wir nämlich den **Vakuumerwartungswert** dieses Hamiltonoperators, ergibt sich wegen des zweiten Terms der nicht wohldefinierte Ausdruck

$$\langle \Omega | \mathbf{a}_{\alpha}(\vec{k}) \mathbf{a}_{\alpha}^{\dagger}(\vec{k}) | \Omega \rangle = \langle \Omega | \left[\mathbf{a}_{\alpha}(\vec{k}), \mathbf{a}_{\alpha}^{\dagger}(\vec{k}) \right] | \Omega \rangle \sim \delta^{(3)}(0). \quad (6.4.31)$$

Dabei haben wir (6.4.20) verwendet. Im Vakuumerwartungswert ergibt also der zweite Term in (6.4.30) ein **divergentes Ergebnis**. Dies ist nur das erste Beispiel einer ganzen Reihe von in der relativistischen Quantenfeldtheorie auftauchenden divergenten Ausdrücken. Diese resultieren aus dem naiven Übergang von klassischen Feldern zu Feldoperatoren, die in die Hamiltondichte (im Gegensatz zum nichtrelativistischen Fall!) als Operatorprodukte an demselben Raum-Zeit-Punkt eingehen, und diese

Produkte sind aufgrund der Kommutatorregel (6.4.22) bereits nicht wohldefiniert. Die in (6.4.30) enthaltene Divergenz läßt sich allerdings recht einfach beseitigen. Dazu beachten wir, daß wir den zweiten Term in der eckigen Klammer formal in die Form

$$\left[\mathbf{a}_\alpha(\vec{k}), \mathbf{a}_\alpha^\dagger(\vec{k}) \right] + \mathbf{a}_\alpha^\dagger(\vec{k}) \mathbf{a}_\alpha(\vec{k}) \sim \delta^{(3)}(0) + \mathbf{a}_\alpha^\dagger(\vec{k}) \mathbf{a}_\alpha(\vec{k}) \quad (6.4.32)$$

bringen können. Der Kommutator ist zwar nicht wohldefiniert, aber die Singularität, ist proportional zum Einheitsoperator, bildet also in (6.4.31) nur eine additive mit allen Operatoren kommutierende (allerdings unendliche) additive Konstante zur Gesamtenergie. Definieren wir also den **endgültigen Hamilton-Operator** als **normalgeordnetes Produkt** der Feldoperatoren, erhalten wir

$$\mathbf{H} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k} \sum_{\alpha=1,2} |\vec{k}| \mathbf{a}_\alpha^\dagger(\vec{k}) \mathbf{a}_\alpha(\vec{k}). \quad (6.4.33)$$

Dann ist das Vakuum ein Energie-Eigenzustand zum Eigenwert 0,

$$\mathbf{H} |\Omega\rangle = 0, \quad (6.4.34)$$

und die **Energie ist positiv semidefinit**, denn für irgendeinen Fock-Raumzustand gilt

$$\langle \Psi | \mathbf{a}_\alpha^\dagger(\vec{k}) \mathbf{a}_\alpha(\vec{k}) | \Psi \rangle = \langle \mathbf{a}_\alpha(\vec{k}) \Psi | \mathbf{a}_\alpha(\vec{k}) \Psi \rangle \geq 0. \quad (6.4.35)$$

Hätten wir beim Quantisieren statt der Bose-Fermi-Vertauschungsregeln verwendet, hätten wir bei diesem Vorgehen einfach eine identisch verschwindende Energie erhalten. Daher *muß* das elektromagnetische Feld mit Bose-Vertauschungsregeln quantisiert werden, was die Anwendung des oben erwähnten Spin-Statistik-Theorems auf das elektromagnetische Feld (bzw. das Photonenfeld) ist.

Der Einphotonenzustand ist ebenfalls ein Energieeigenzustand (*Übung*):

$$\mathbf{H} |\vec{k}, \alpha\rangle = |\vec{k}| |\vec{k}, \alpha\rangle. \quad (6.4.36)$$

Der Energieeigenwert ist dabei also $|\vec{k}|$, und für freie Photonen gilt die **Energie-Impulsbeziehung für masselose Teilchen**,

$$E(\vec{k}) = |\vec{k}| \Rightarrow k^2 = (k^0)^2 - \vec{k}^2 = 0. \quad (6.4.37)$$

Schließlich betrachten wir noch die übrigen oben aus dem Noether-Theorem resultierenden Erhaltungsgrößen, die gleichzeitig die **infinitesimalen Erzeugenden für Translationen und Lorentztransformationen (d.h. Boosts und Drehungen)** sein müssen. Verwenden wir wieder die naive Quantisierungsregel und führen gleich die Normalordnung durch, was wieder zur Subtraktion der divergierenden Vakuum Erwartungswerte dieser Größen führt, erhalten wir durch Quantisierung von (6.3.87) für den **Gesamtimpulsoperator** (*Übung*)

$$\vec{\mathbf{P}} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} : \vec{\mathbf{E}}(x) \times \mathbf{B}(x) := \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k} \vec{k} \sum_{\alpha=1,2} \mathbf{a}_\alpha^\dagger(\vec{k}) \mathbf{a}_\alpha(\vec{k}). \quad (6.4.38)$$

Für den Drehimpuls- und Boostoperator lautet die quantisierte Fassung von (6.3.102) unter Berücksichtigung der Normalordnung (*Übung*)

$$\vec{\mathbf{J}} = i \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k} \sum_{\alpha=1,2} \left[\mathbf{a}_\alpha^\dagger(\vec{k}) \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \mathbf{a}_\alpha(\vec{k}) \right] \times \vec{k}, \quad (6.4.39)$$

$$\vec{\mathbf{K}} = i \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k} \sum_{\alpha=1,2} |\vec{k}| \left[\mathbf{a}_\alpha^\dagger(\vec{k}) \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \mathbf{a}_\alpha(\vec{k}) \right] - t \vec{\mathbf{P}}. \quad (6.4.40)$$

6.5 Das Verhalten der Felder unter Poincaré-Transformationen

Um die **Lorentz-Invarianz** des Quantisierungsverfahrens zu überprüfen, müssen wir zeigen, daß die so definierten Operatoren \mathbf{H} und $\vec{\mathbf{P}}$ zeitliche bzw. räumliche Verschiebungen und $\vec{\mathbf{J}}$ und $\vec{\mathbf{K}}$ Boosts erzeugen, d.h. daß die Kommutatoren der Feldoperatoren $\mathbf{A}^\mu(x)$ mit diesen die Lie-Algebra der **eigentlichen orthochronen Poincaré-Gruppe** repräsentierenden Operatoren infinitesimalen Transformationen entsprechen, wie sie für das klassische Feld $\vec{A}(x)$ zu erwarten sind.

Es ist einfacher, anstelle mit der Impulsraumformulierung (6.4.33) und (6.4.38-6.4.40) direkt mit den Raum-Zeitformulierungen der Erhaltungsgrößen

$$\mathbf{H} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \frac{1}{2} : [\vec{\mathbf{E}}^2(x) + \vec{\mathbf{B}}^2(x)] :, \quad (6.5.1)$$

$$\vec{\mathbf{P}} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} : \vec{\mathbf{E}} \times \vec{\mathbf{B}} :, \quad (6.5.2)$$

$$\vec{\mathbf{K}} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \frac{1}{2} : [\vec{\mathbf{E}}^2(x) + \vec{\mathbf{B}}^2(x)] : \vec{x} - t\vec{\mathbf{P}}, \quad (6.5.3)$$

$$\vec{\mathbf{J}} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \vec{x} \times : \vec{\mathbf{E}}(x) \times \vec{\mathbf{B}}(x) : \quad (6.5.4)$$

zu arbeiten.

Betrachten wir zunächst die **räumlichen Translationen**. Sie sollten durch den Operator

$$\mathbf{U}_T(\vec{a}) = \exp(-i\vec{a} \cdot \vec{\mathbf{P}}) \quad (6.5.5)$$

gegeben sein. Um zu zeigen, daß sich der Vektorpotentialoperator entsprechend transformiert beachten wir, daß für eine infinitesimale Translation

$$A'^a(\vec{x}') = \mathbf{U}_T(\delta\vec{a}) A^a(\vec{x}') \mathbf{U}_T^\dagger(\delta\vec{a}) = A^a(\vec{x}') + i\delta a^b [A^a(\vec{x}'), \mathbf{P}^b], \quad (6.5.6)$$

wobei $\vec{x}' = \vec{x} - \delta\vec{a}$ ist. Es sollte freilich dieselbe Transformationsregel wie für die klassischen Felder gelten, also

$$A'^a(\vec{x}') = A^a(\vec{x}). \quad (6.5.7)$$

Um den Kommutator zu berechnen, benötigen wir die Kommutatorregeln zwischen $A^a(\vec{x}')$ mit dem elektrischen und magnetischen Feld $\vec{\mathbf{E}}(y)$ und $\vec{\mathbf{B}}(y)$. Da die Größen (6.5.1)-(6.5.4) wegen des Noether-Theorems zeitunabhängig sind, genügt, es, wenn wir die **Kommutatorrelationen der Felder zu gleichen Zeiten** bestimmen. Wegen $\vec{\mathbf{E}} = -\dot{\vec{\mathbf{A}}} = -\vec{\mathbf{\Pi}}$ und $\vec{\mathbf{B}} = \vec{\nabla} \times \vec{\mathbf{A}}$ folgen diese Regeln unmittelbar aus (6.4.14) und (6.4.22),

$$[A^a(t, \vec{x}), \mathbf{E}^b(t, \vec{y})] = -i\delta_{\perp}^{ab}(\vec{x} - \vec{y}), \quad [A^a(t, \vec{x}), \mathbf{B}^b(t, \vec{y})] = 0. \quad (6.5.8)$$

Berechnen wir also unter Verwendung von (6.5.2) zunächst den Kommutator

$$i[A^a(t, \vec{x}), \mathbf{P}^d] = i \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{y} \epsilon^{dabc} [A^a(t, \vec{x}), \mathbf{E}^b(t, \vec{y}) \mathbf{B}^c(t, \vec{y})]. \quad (6.5.9)$$

Dabei konnten wir die Normalordnungsvorschrift in (6.5.2) weglassen, weil diese nur einen um eine reine Zahl verschiedene additive (divergente) Konstante zu \mathbf{P}^d hinzufügt, die im Kommutator keinen

Beitrag liefert. Verwenden wir nun (6.5.8) folgt, nach einigen kleineren Umformungen

$$\begin{aligned}
 i[\mathbf{A}^a(t, \vec{x}), \mathbf{P}^d] &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{y} \epsilon^{dbc} \delta_{\perp}^{ab}(\vec{x} - \vec{y}) \mathbf{B}^c(t, \vec{y}) \\
 &\stackrel{(6.4.29)}{=} \epsilon^{dac} \mathbf{B}^c(t, \vec{x}) - \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{y} \epsilon^{dbc} \mathbf{B}^c(t, \vec{x}) \frac{\partial^2}{\partial y^a \partial y^b} \frac{1}{4\pi|\vec{x} - \vec{y}|}.
 \end{aligned} \tag{6.5.10}$$

Zur Berechnung des verbleibenden Integrals führen wir eine partielle Integration bzgl. $\partial/\partial y^b$ aus und schreiben die Ableitung $\partial/\partial y^a$ als $-\partial/\partial x^a$. Diese Integration können wir zudem noch aus dem Integral herausziehen. Weiter gilt

$$\epsilon^{dbc} \mathbf{B}^c(t, \vec{x}) = \partial_d \mathbf{A}^b(t, \vec{x}) - \partial_b \mathbf{A}^d(t, \vec{x}), \tag{6.5.11}$$

was nach den besagten Umformungen

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{y} \epsilon^{dbc} \mathbf{B}^c(t, \vec{x}) \frac{\partial^2}{\partial y^a \partial y^b} \frac{1}{4\pi|\vec{x} - \vec{y}|} = \frac{\partial}{\partial x^a} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{y} \frac{1}{4\pi|\vec{x} - \vec{y}|} \Delta_{\vec{y}} A^d(t, \vec{y}) = -\partial_a A^d(t, \vec{x}) \tag{6.5.12}$$

liefert. Dabei haben wir wieder beachtet, daß $-1/(4\pi|\vec{x} - \vec{y}|)$ die Greensche Funktion des Laplace-Operators und daß $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ ist. Verwenden wir schließlich nochmals (6.5.11) in (6.5.10) finden wir unter Anwendung von (6.5.12)

$$i[\mathbf{A}^a(t, \vec{x}), \mathbf{P}^d] = \partial_d \mathbf{A}^a(t, \vec{x}). \tag{6.5.13}$$

Dies in (6.5.6) eingesetzt ergibt schließlich

$$\mathbf{A}^a(t, \vec{x}') = \mathbf{A}^a(t, \vec{x}) + \delta a^d \partial_d \mathbf{A}^a(t, \vec{x}') = \mathbf{A}^a(t, \vec{x}' + \delta \vec{a}) = \mathbf{A}^a(t, \vec{x}), \tag{6.5.14}$$

und dies entspricht genau der Behauptung (6.5.7).

Mit exakt denselben Schritten weist man nach, daß auch die zeitlichen Translationen und die Drehungen, dargestellt durch die Operatoren

$$\mathbf{U}_t(t) = \exp(it\mathbf{H}), \quad \mathbf{U}_D(\vec{\varphi}) = \exp(-i\vec{\varphi} \cdot \vec{\mathbf{J}}) \tag{6.5.15}$$

die von der klassischen Theorie her zu erwartenden Transformationsregeln für infinitesimale Transformationen (*Übung!*)

$$t' = t - \delta t, \quad \vec{x}' = \vec{x}, \quad \vec{\mathbf{A}}'(x') = \vec{\mathbf{A}}(x) = \vec{\mathbf{A}}(t' + \delta t, \vec{x}') = \vec{\mathbf{A}}(t', \vec{x}') + \delta t \dot{\vec{\mathbf{A}}}(t', \vec{x}'), \tag{6.5.16}$$

$$\begin{aligned}
 t' = t, \quad \vec{x}' = \vec{x} - \delta \vec{\varphi} \times \vec{x}, \quad \vec{\mathbf{A}}(t', \vec{x}') &= (\mathbb{1}_3 - \delta \vec{\varphi} \times) \vec{\mathbf{A}}(t, \vec{x}) \\
 &= \vec{\mathbf{A}}(t', \vec{x}') - \delta \vec{\varphi} \times \vec{\mathbf{A}}(t', \vec{x}') + [(\delta \vec{\varphi} \times \vec{x}) \cdot \vec{\nabla}' \vec{\mathbf{A}}(t', \vec{x}')].
 \end{aligned} \tag{6.5.17}$$

Für die Boosts ergibt sich aufgrund der Eichfixierung eine Besonderheit.

Dies erkennen wir schon am klassischen Fall. Betrachten wir also zunächst ein klassisches quellenfreies Vierervektorpotential A^μ in der Strahlungseichung. Es gilt voraussetzungsgemäß $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ und $A^0 = 0$. Als Vierervektorfeld verhält es sich unter einem Boost wie folgt

$$A'^\mu(x') = \Lambda^\mu{}_\nu A^\nu(x), \quad x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu. \tag{6.5.18}$$

Für eine infinitesimale Transformation ist also gemäß (6.3.90) und wegen $A^0 = 0$

$$[A'^{\mu}(x')] = \begin{pmatrix} -\delta \vec{v} \cdot \vec{A}(x') \\ \vec{A}(x') + t'(\delta \vec{v} \cdot \vec{\nabla})\vec{A}(x') + (\delta \vec{v} \cdot \vec{x})\partial_{t'}\vec{A}(x') \end{pmatrix}. \quad (6.5.19)$$

Es ist leicht zu sehen, daß die drei räumlichen Komponenten die Transversalitätsbedingung $\vec{\nabla}' \cdot \vec{A}'(x') = 0$ erfüllen, aber die Nebenbedingung $A'^0 = 0$ ist *nicht* erfüllt. Dies ist aber auch gar nicht notwendig, denn es genügt, wenn diese Nebenbedingungen bis auf eine **Eichtransformation** (6.3.20) erfüllt sind. Wir kommen darauf gleich noch zurück.

Führen wir nun den Lorentz-Boost in der quantisierten Theorie aus. Der Boost ist durch

$$\mathbf{U}_B(\vec{\eta}) = \exp(i\vec{\eta} \cdot \vec{\mathbf{K}}) \quad (6.5.20)$$

gegeben, wobei $\vec{\mathbf{K}}$ in (6.5.3) angegeben ist. Nach einiger nicht ganz einfacher Rechnung (*Übung*) ergibt sich für den relevanten Kommutator

$$i[\delta \vec{v} \cdot \vec{\mathbf{K}}, \vec{\mathbf{A}}(x')] = (\delta \vec{v} \cdot \vec{x})\partial_{t'}\vec{\mathbf{A}}(x') + t(\delta \vec{v} \cdot \vec{\nabla}')\vec{\mathbf{A}}(x') - \vec{\nabla}' \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{y} \dot{A}^a(t', \vec{y}) \frac{1}{4\pi|\vec{x}' - \vec{y}|}. \quad (6.5.21)$$

Dies stimmt mit dem aus der klassischen Theorie zu erwartenden Transformationsgesetz nur bis auf eine (infinitesimale) Eichtransformation mit dem Eichfeld

$$\delta \eta(x') = \delta \vec{v} \cdot \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{y} \dot{\vec{\mathbf{A}}}(t', \vec{y}) \frac{1}{4\pi|\vec{x}' - \vec{y}|} \quad (6.5.22)$$

überein. Im geboosteten Bezugssystem ergibt sich demnach die nichtverschwindende 0-Komponente

$$\mathbf{A}'^0(x') = \partial_{t'} \delta \eta(x') = \delta \vec{v} \cdot \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{y} \ddot{\vec{\mathbf{A}}}(t', \vec{y}) \frac{1}{4\pi|\vec{x}' - \vec{y}|}. \quad (6.5.23)$$

Nun erfüllt aber das Vektorfeld aufgrund der Bewegungsgleichungen die Wellengleichung, und folglich ist $\ddot{\vec{\mathbf{A}}}(t', \vec{y}) = \Delta_y \vec{\mathbf{A}}(t', \vec{y})$. Da weiter $1/[4\pi|\vec{x}' - \vec{y}|]$ bis auf das Vorzeichen die Green-Funktion des Laplaceoperators ist, ergibt sich schließlich

$$\mathbf{A}'^0(x') = -\delta \vec{v} \cdot \vec{\mathbf{A}}(x'), \quad (6.5.24)$$

und das entspricht gerade dem klassischen Resultat (6.5.19).

Bis auf eine Eichtransformation verhält sich also das in der Strahlungseichung quantisierte elektromagnetische Feld unter Boosts analog zum klassischen Vektorpotential in der Strahlungseichung. Wie wir später sehen werden, hängt für eine Quantenelektrodynamik geladener Teilchen die **S-Matrix** nicht von einer Eichtransformation der entsprechenden Quantenfelder ab, sofern die Theorie **eichinvariant** formuliert wird. Die formale **Darstellungstheorie der Poincaré-Gruppe** (s. z.B. [Wei95]) zeigt, daß eine Quantenfeldtheorie für masselose Vektorteilchen, die mit einem Vierervektorfeld repräsentiert werden, sich unter Lorentz-Transformationen notwendig stets nur modulo von Eichtransformationen wie ein Vektorfeld transformiert. Theorien mit masselosen Vektorteilchen *müssen* also notwendig eine lokale Eichsymmetrie wie die Elektrodynamik aufweisen.

6.6 Das freie Dirac-Feld

Mit dem Ziel, eine in sich konsistente relativistische Wellenmechanik zu konstruieren, stellte Dirac nach dem Vorbild der nichtrelativistischen Schrödinger-Gleichung eine relativistische Wellengleichung auf, die die Zeitableitung nur in erster Ordnung enthält. Aus Gründen der Lorentzsymmetrie mußten auch die Ortsableitungen in erster Ordnung in die Gleichung eingehen. Außerdem mußte aus der Gleichung auch die Massenschalenbedingung $-(\square + m^2)\psi(x) = 0$ folgen. Es zeigte sich, daß dieses Programm nur mit einem **vierkomponentigen Dirac-Spinorfeld** ψ mit der Hilfe von vier **Dirac-Matrizen** γ^μ möglich war:

$$(i\partial_\mu\gamma^\mu - m\mathbb{1}_4)\psi = 0. \quad (6.6.1)$$

Zur Abkürzung hat Feynman seine „Slash-Notation“ eingeführt: $\not{\partial} := \gamma^\mu\partial_\mu$. Multiplizieren wir nun die Dirac-Gleichung (6.6.1) mit $i\not{\partial} + m\mathbb{1}_4$, erhalten wir

$$(-\not{\partial}^2 - m^2\mathbb{1}_4)\psi = 0. \quad (6.6.2)$$

Damit dies der Massenschalenbedingung entspricht, verlangen wir

$$\not{\partial}^2 = \square \quad (6.6.3)$$

bzw. noch allgemeiner

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}\mathbb{1}_4. \quad (6.6.4)$$

Es ist klar, daß aus (6.6.4) tatsächlich (6.6.3) folgt:

$$\not{\partial}^2 = \gamma^\mu\gamma^\nu\partial_\mu\partial_\nu = \frac{1}{2}\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\}\partial_\mu\partial_\nu = g^{\mu\nu}\partial_\mu\partial_\nu\mathbb{1}_4 = \square\mathbb{1}_4. \quad (6.6.5)$$

In einer 2×2 -Blocknotation lautet eine für unsere Zwecke besonders bequeme Realisierung¹⁰ der Dirac-Matrizen

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1}_2 \\ \mathbb{1}_2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^j \\ -\sigma^j & 0 \end{pmatrix} \quad (6.6.6)$$

mit den bekannten Paulimatrizen

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (6.6.7)$$

Die Antikommutatorrelationen (6.6.4) folgen sofort aus den Antikommutatorrelationen für die Paulimatrizen (*Übung!*)

$$\{\sigma^j, \sigma^k\} = 2\delta^{jk}\mathbb{1}_2. \quad (6.6.8)$$

Wir notieren weiter noch die **Pseudohermitizität der Diracmatrizen**

$$\gamma^0\gamma^{\mu\dagger}\gamma^0 = \gamma^\mu \Leftrightarrow \gamma^{\mu\dagger} = \gamma^0\gamma^\mu\gamma^0. \quad (6.6.9)$$

Das Verhalten unter **Lorentztransformationen** können wir herleiten, indem wir fordern, daß die Dirac-Gleichung forminvariant unter Lorentztransformationen ist. Dabei soll sich das Feld linear transformieren:

$$x' = \Lambda x, \quad \psi'(x') = S(\Lambda)\psi(x). \quad (6.6.10)$$

¹⁰Dies ist die chirale oder Weyl-Darstellung.

Um $S(\Lambda)$ zu finden, bemerken wir, daß

$$\partial'_\mu = \frac{\partial}{\partial x'^\mu} = \frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu} \partial_\nu = (\Lambda^{-1})^\nu{}_\mu \partial_\nu \quad (6.6.11)$$

gilt. Setzen wir dies in die Diracgleichung für das transformierte Feld ein, erhalten wir

$$(i\not{\partial}' - m)\psi'(x') = [i(\Lambda^{-1})^\nu{}_\mu \gamma^\mu \partial'_\nu - m] S(\Lambda)\psi(x). \quad (6.6.12)$$

Multiplizieren wir diese Gleichung von links mit $S^{-1}(\Lambda)$ folgt die Diracgleichung für das transformierte Feld, wenn

$$(\Lambda^{-1})^\nu{}_\mu S^{-1}(\Lambda)\gamma^\mu S(\Lambda) = \gamma^\nu \Rightarrow S^{-1}(\Lambda)\gamma^\mu S(\Lambda) = \Lambda^\mu{}_\nu \gamma^\nu. \quad (6.6.13)$$

Wir berechnen zunächst $S(\Lambda)$ für eine infinitesimale Lorentztransformation

$$\Lambda = \mathbb{1} + \delta\omega, \quad \Lambda^\mu{}_\nu = \delta^\mu{}_\nu + \delta\omega^\mu{}_\nu. \quad (6.6.14)$$

Aus der Eigenschaft der Lorentztransformation, daß es Minkowskiprodukte zwischen beliebigen Vierervektoren invariant läßt, folgt

$$g_{\mu\nu} \Lambda^\mu{}_\rho \Lambda^\nu{}_\sigma = g_{\rho\sigma}. \quad (6.6.15)$$

Setzen wir darin (6.6.14) ein, ergibt sich aus dieser Bedingung, daß

$$\delta\omega_{\mu\nu} = -\delta\omega_{\nu\mu} \quad (6.6.16)$$

ist. Wir setzen nun

$$S(\Lambda) = \mathbb{1}_4 + \frac{1}{8} \delta\omega_{\mu\nu} \gamma^{\mu\nu}, \quad S^{-1}(\Lambda) = \mathbb{1}_4 - \frac{1}{8} \delta\omega_{\mu\nu} \gamma^{\mu\nu}, \quad (6.6.17)$$

wobei $\gamma^{\mu\nu} = -\gamma^{\nu\mu}$ eine geeignete 4×4 -Matrix bezeichnen soll, die im Diracspinorraum wirkt. Bei der Matrixinversion haben wir nur die erste Ordnung in $\delta\omega$ berücksichtigt. Um nun $\gamma^{\mu\nu}$ zu bestimmen, wenden wir diesen Ansatz auf (6.6.13) an, wobei wir wieder bis zur ersten Ordnung in $\delta\omega$ entwickeln. Nach kurzer Rechnung (*Übung!*) folgt

$$\begin{aligned} [\gamma^\mu, \gamma^{\rho\sigma}] &= 4(g^{\mu\rho} \gamma^\sigma - g^{\mu\sigma} \gamma^\rho) = 2(\{\gamma^\mu, \gamma^\rho\} \gamma^\sigma - \gamma^\rho \{\gamma^\mu, \gamma^\sigma\}) \\ &= 2[\gamma^\mu, \gamma^\rho \gamma^\sigma] = [\gamma^\mu, [\gamma^\rho, \gamma^\sigma]] \end{aligned} \quad (6.6.18)$$

Dabei haben wir im letzten Schritt benutzt, daß $\gamma^{\rho\sigma} = -\gamma^{\sigma\rho}$ ist. Wir können also

$$\gamma^{\rho\sigma} = [\gamma^\rho, \gamma^\sigma] \quad (6.6.19)$$

setzen. Für endliche Lorentztransformationen folgt durch Anwenden der Matrix-Exponentialfunktion

$$S(\Lambda) = \exp\left(\frac{1}{8} \omega_{\mu\nu} \gamma^{\mu\nu}\right). \quad (6.6.20)$$

Aus der Pseudohermitizität (6.6.9) und $(\gamma^0)^2 = 1$ folgt

$$\gamma^0 (\gamma^{\rho\sigma})^\dagger \gamma^0 = \gamma^{\sigma\rho} = -\gamma^{\rho\sigma} \quad (6.6.21)$$

und damit

$$S^{-1}(\Lambda) = \gamma^0 S^\dagger(\Lambda) \gamma^0, \quad (6.6.22)$$

d.h. $S(\Lambda)$ ist pseudounitär. Es ist wichtig zu bemerken, daß $S(\Lambda)$ nicht wirklich unitär ist. Dies weist schon darauf hin, daß eine Einteilchenquantentheorie auf der Basis der Diracgleichung widersprüchlich in sich selbst ist, denn in einer solchen Quantentheorie sollten *alle* eigentlich orthochronen Lorentztransformationen unitär dargestellt werden. Dies ist aber nicht der Fall, wie wir nun zeigen wollen.

Betrachten wir zunächst einen **Boost** in der Richtung \vec{n} ($\vec{n}^2 = 1$). Die entsprechende Matrix besitzt die Form

$$\Lambda(\vec{n}) = \begin{pmatrix} \cosh \eta & -\vec{n}^t \sinh \eta \\ -\vec{n} \sinh \eta & \cosh \eta P_{\parallel}(\vec{n}) + P_{\perp}(\vec{n}) \end{pmatrix} \quad (6.6.23)$$

mit den Projektionsoperatoren (reelle 3×3 -Matrizen)

$$P_{\parallel}(\vec{n}) = \vec{n} \otimes \vec{n}, \quad P_{\perp} = \mathbb{1}_3 - \vec{n} \otimes \vec{n}. \quad (6.6.24)$$

Die Boostgeschwindigkeit ist $v = \sinh \eta / \cosh \eta = \tanh \eta$. Entwickeln wir für ein infinitesimales $\delta \eta$ (6.6.23) bis zur ersten Ordnung, finden wir die Exponentialdarstellung

$$\Lambda_B(\vec{\eta}) = \exp(i\vec{\eta} \cdot \vec{K}) \quad \text{mit} \quad \vec{\eta} = \eta \vec{n}, \quad (6.6.25)$$

wobei

$$K^j = i \begin{pmatrix} 0 & \vec{e}_j^t \\ \vec{e}_j & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.6.26)$$

Für die infinitesimale Transformation ist

$$\delta x^0 = -\delta \vec{\eta} \cdot \vec{x}, \quad \delta x^j = -\delta \eta^j x^0 \Rightarrow \omega_{\rho 0} = -\omega_{0\rho} = \begin{cases} 0 & \text{für } \rho = 0, \\ \eta^\rho & \text{für } \rho \in \{1, 2, 3\}, \end{cases} \quad (6.6.27)$$

$$\omega_{00} = \omega_{jk} = 0 \quad \text{für } j, k \in \{1, 2, 3\}.$$

Um die Darstellungsmatrix $S(\Lambda_B)$ zu finden, benötigen wir für die Boosts also

$$\gamma^{0\mu} = \gamma^0 \gamma^\mu - \gamma^\mu \gamma^0 = \begin{cases} 0 & \text{für } \mu = 0, \\ 2\gamma^0 \gamma^\mu & \text{für } \mu \in \{1, 2, 3\}. \end{cases} \quad (6.6.28)$$

Damit wird

$$\frac{1}{8} \omega_{\mu\nu} \gamma^{\mu\nu} = \frac{1}{4} \omega_{0\rho} \gamma^{0\rho} = -\frac{1}{2} \gamma^0 \vec{\eta} \cdot \vec{\gamma} =: -i\vec{\eta} \cdot \vec{x}. \quad (6.6.29)$$

Unter Verwendung der Darstellung (6.6.6) ist

$$\vec{x} = \frac{i}{2} \vec{\gamma} \gamma^0 = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & -\vec{\sigma} \end{pmatrix}. \quad (6.6.30)$$

Es ist wichtig zu bemerken, daß diese Matrix **antihermiteisch** und folglich die Darstellung der Boosts

$$S_B[\vec{\eta}] =: S_{\vec{n}}(\eta) = \exp(-i\vec{\eta} \cdot \vec{x}) \quad (6.6.31)$$

nicht unitär ist¹¹. Wir werden unten sehen, daß die Lorentztransformationen erst für die Quantenfeldtheorie unitär realisiert werden. Wir können (6.6.31) explizit auswerten, denn es gilt

$$(i\vec{\eta} \cdot \vec{x})^2 = \frac{1}{4} (\gamma^0 \vec{n} \cdot \vec{\gamma})^2 = -\frac{1}{4} (\vec{n} \cdot \vec{\gamma})^2 = \frac{\vec{n}^2}{4}. \quad (6.6.32)$$

¹¹Die gruppentheoretische Analyse der Darstellungen der eigentlich orthochronen Lorentzgruppe zeigen, daß es keine nichttrivialen endlichdimensionalen unitären Darstellungen der Lorentzgruppe bzw. der dazugehörigen Überlagerungsgruppe $SL(2, \mathbb{C})$ gibt. Dies liegt daran, daß die Lorentzgruppe im Gegensatz zur Drehgruppe **nicht kompakt** ist. Die Drehgruppe $SO(3)$ bzw. deren Überlagerungsgruppe $SU(2)$ ist hingegen kompakt, und wie wir gleich zeigen werden, wird die Drehgruppe in der Tat durch unitäre Transformationen dargestellt.

Summiert man also die Exponentialreihe (6.6.31) auf (*Übung!*), folgt

$$S_B(\vec{\eta}) = \gamma^0 \left[\cosh\left(\frac{\eta}{2}\right) \gamma^0 - \sinh\left(\frac{\eta}{2}\right) \vec{n} \cdot \vec{\gamma} \right]. \quad (6.6.33)$$

Dies kann man einfacher in der Form

$$S_B(\vec{\eta}) = \gamma^0 \Psi \quad \text{mit} \quad U = \begin{pmatrix} \cosh(\eta/2) \\ \sinh(\eta/2) \vec{n} \end{pmatrix} \quad (6.6.34)$$

schreiben. In den Komponenten der Vierergeschwindigkeit des Teilchens

$$u = \begin{pmatrix} \cosh \eta \\ \vec{n} \sinh \eta \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1-v^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \vec{v} \end{pmatrix} = \gamma \begin{pmatrix} 1 \\ \vec{v} \end{pmatrix} \quad (6.6.35)$$

ausgedrückt ist (*Übung!*)

$$U = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\gamma+1}{2}} \\ \vec{n} \sqrt{\frac{\gamma-1}{2}} \end{pmatrix}. \quad (6.6.36)$$

Wenden wir uns nun den Drehungen zu. Diese transformieren definitionsgemäß nur die räumlichen Komponenten untereinander, d.h. in (6.6.20) ist

$$\omega_{00} = \omega_{0j} = -\omega_{j0} = 0, \quad \omega_{jk} = -\epsilon_{jkl} \varphi^l \quad \text{für } j, k \in \{1, 2, 3\}. \quad (6.6.37)$$

Für infinitesimale Drehungen folgt daraus in der Tat

$$x'^0 = x^0, \quad x'^j = x^j + \epsilon^{jkl} \delta \varphi^l x^k = x^j - (\delta \vec{\varphi} \times \vec{x})^j. \quad (6.6.38)$$

Durch Exponentiation folgt daraus die endliche Drehung zu

$$\vec{x}' = \vec{n} (\vec{n} \cdot \vec{x}) - \sin \varphi \vec{n} \times \vec{x} + \cos \varphi P_{\perp}(\vec{n}) \vec{x} \quad \text{mit} \quad \vec{n} = \frac{\vec{\varphi}}{\varphi}. \quad (6.6.39)$$

Weiter ist

$$\gamma^{jk} = - \begin{pmatrix} [\sigma^j, \sigma^k] & 0 \\ 0 & [\sigma^j, \sigma^k] \end{pmatrix} = -2i \epsilon^{jkl} \begin{pmatrix} \sigma^l & 0 \\ 0 & \sigma^l \end{pmatrix} =: -4i \epsilon^{jkl} \Sigma^l. \quad (6.6.40)$$

Wir notieren noch

$$\Sigma^l = \frac{i}{8} \epsilon^{jkl} \gamma^{jk} = \frac{i}{4} \epsilon^{jkl} \gamma^j \gamma^k = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sigma^l & 0 \\ 0 & \sigma^l \end{pmatrix}. \quad (6.6.41)$$

Mit (6.6.37) folgt daraus

$$S_D(\vec{\varphi}) = \exp\left(\frac{1}{8} \omega_{\mu\nu} \gamma^{\mu\nu}\right) = \exp(i \vec{\varphi} \cdot \vec{\Sigma}). \quad (6.6.42)$$

Dies macht die hier verwendete Weyl-Darstellung der Diracmatrizen bequem: Der Spinoperator ist Block-diagonal mit den Spinmatrizen $\sigma^l/2$ auf den Diagonalblöcken. Da die $\vec{\Sigma}$ **hermitesche Matrizen** sind, werden Drehungen gemäß (6.6.42) in der Tat **unitär** dargestellt.

Üblicherweise definiert man statt der $\gamma^{\mu\nu}$

$$\sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2} \gamma^{\mu\nu} = \frac{i}{2} [\gamma^\mu, \gamma^\nu], \quad (6.6.43)$$

so daß die Darstellungsmatrix einer beliebigen $SO(1,3)^\uparrow$ -Transformation mit Hilfe der sechs Parameter $\omega_{\mu\nu} = -\omega_{\nu\mu}$ in der Form

$$S(\omega_{\mu\nu}) = \exp\left(\frac{1}{8}\omega_{\mu\nu}\gamma^{\mu\nu}\right) = \exp\left(-\frac{i}{4}\omega_{\mu\nu}\sigma^{\mu\nu}\right). \quad (6.6.44)$$

Der Zusammenhang zu \vec{x} und $\vec{\Sigma}$ ergibt sich dann aus (6.6.30) bzw. (6.6.41) zu

$$x^a = \frac{i}{4}[\gamma^a, \gamma^0] = \frac{1}{2}\sigma^{a0} = -\frac{1}{2}\sigma^{0a}, \quad \Sigma^a = \frac{i}{8}\epsilon^{abc}\gamma^{bc} = \frac{1}{4}\epsilon^{abc}\sigma^{bc}. \quad (6.6.45)$$

Nun kommen wir auf die Diracgleichung (6.6.1) und den Dirac-Spinor ψ zurück. Bezüglich Drehungen setzt sich in unserer chiralen Darstellung der Diracmatrizen der Dirac-Spinor aus zwei **Weyl-Spinoren** gemäß

$$\psi = \begin{pmatrix} \xi_L \\ \xi_R \end{pmatrix} \quad (6.6.46)$$

zusammen. Dabei sind die $\xi_{L,R} \in \mathbb{C}^2$ zweikomponentige Weylspinoren, die sich wegen (6.6.42-6.6.46) unter Drehungen auch als solche transformieren. Dies weist schon darauf hin, daß ein Dirac-Feld stets zwei Spin-1/2-Teilchen beschreibt. Wie wir unten sehen werden, entspricht das **einem Teilchen und dem dazugehörigen Antiteilchen**.

Aus der Struktur der Dirac-Darstellung der Lorentzgruppe, die sich aus beliebigen Produkten von Boost- und Drehmatrizen (6.6.34) bzw. (6.6.42) ergibt, folgt, daß **Lorentzskalare** mit Hilfe des **Dirac-adjungierten** Zeilenspinors

$$\bar{\psi}(x) = \psi^\dagger(x)\gamma^0 \quad (6.6.47)$$

gebildet werden müssen. In der Tat ist dann wegen (6.6.10) aufgrund von (6.6.22)

$$\bar{\psi}'(x') = \psi'^\dagger(x')\gamma^0 = \psi^\dagger(x)S^\dagger(\Lambda)\gamma^0 = \bar{\psi}(x)\gamma^0 S^\dagger(\Lambda)\gamma^0 = \bar{\psi}(x)S^{-1}(\Lambda). \quad (6.6.48)$$

Daraus folgt sofort, daß

$$\bar{\psi}'(x')\psi(x') = \bar{\psi}(x)\psi(x) \quad (6.6.49)$$

gilt, also $\bar{\psi}\psi$ ein **Skalarfeld** ist. Ebenso folgt aus (6.6.13), daß

$$j^\mu(x) = \bar{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x) \quad (6.6.50)$$

ein **Vektorfeld** ist.

Als nächstes leiten wir aus der Dirac-Gleichung die entsprechende Gleichung für den Dirac-adjungierten Spinor her. Dazu müssen wir nur (6.6.1) hermitesch adjungieren und mit dem Dirac-Adjungierten darstellen:

$$\bar{\psi}(x)\gamma^0(-i\overleftarrow{\mathcal{D}}^\dagger - m) = 0. \quad (6.6.51)$$

Dies von rechts mit γ^0 multipliziert liefert wegen der Pseudohermitizitätsrelation (6.6.9)

$$\bar{\psi}(x)(-i\overleftarrow{\mathcal{D}} - m) = 0. \quad (6.6.52)$$

Bilden wir die Viererdivergenz von (6.6.50), folgt mit der Dirac-Gleichung (6.6.1) und ihrer Adjungierten (6.6.52)

$$\partial_\mu j^\mu = 0, \quad (6.6.53)$$

d.h. die dazugehörige Ladung

$$Q = \int d^3\vec{x} j^0(x) = \int d^3\vec{x} \psi^\dagger(x)\psi(x) \quad (6.6.54)$$

ist **erhalten**. Insofern wählte sich Dirac schon am Ziel, eine konsistente Einteilchen-Interpretation für seine Wellengleichung analog zur nichtrelativistischen Quantenmechanik gefunden zu haben. Allerdings ergeben sich für die ebenen Wellen, die Lösungen für Teilchen mit bestimmtem Impuls entsprechen sollen, stets Lösungen mit positiver und solche mit negativer Frequenz $\omega = \pm E(\vec{k})$. Es stellte sich weiter heraus, daß für die relativistisch konstruierbaren Wechselwirkungen (allen voran die elektromagnetische) bei einer Anfangswellenfunktion, die nur aus der Superposition von Moden mit positiven Frequenzen (also in der Einteilcheninterpretation positiven Energien) gebildet wird, vermöge der Zeitentwicklung zu späteren Zeiten stets Moden mit negativen Frequenzen beigemischt werden. Die Projektion auf Moden positiver Frequenz ist also nicht verträglich mit der Zeitentwicklung, so daß die Moden mit negativer Frequenz notwendig zum Einteilchenhilbertraum der Wellenfunktionen hinzugefügt werden müssen. Dies hat nun notwendig zur Folge, daß die naive Interpretation der Diracgleichung im Sinne der Einteilchenwellenmechanik zu einer Theorie führt, für die der Hamilton-Operator nicht nach unten beschränkt ist, d.h. es existiert kein stabiler Grundzustand. Diracs genialer Ausweg war es, zu postulieren, daß im Grundzustand alle Zustände mit negativer Energie besetzt sind. Dieser **Dirac-See** sollte sich dann in hochenergetischen Reaktionen bemerkbar machen, die ein Elektron aus dem See herausschlagen können. Dieses **Loch im Diracsee** verhält sich dann wie ein Teilchen mit der Elektronenmasse aber positiver Ladung. Auf diese Weise gelangte Dirac (allerdings nach einigen interpretatorischen Komplikationen) zur Vorhersage der Existenz von **Antiteilchen**. Diese **Löchertheorie** ist äquivalent zu der quantenfeldtheoretischen Auffassung, die wir als nächstes entwickeln werden. Der Einführung des Dirac-Sees entspricht in der Quantenfeldtheorie einfach der **Feynman-Stückelberg-Trick** und die nachfolgende Normalordnung der Observablen wie Energie, Impuls, Ladung usw.

Das Vorgehen entspricht genau dem beim elektromagnetischen Feld: Wir stellen als erstes eine **lorentz-invariante Lagrangedichte** auf, gehen zum (nicht manifest kovarianten) Hamiltonformalismus über und deuten die kanonischen Feld-Poisson-Klammerbeziehungen zu **Antikommutatoren** um. Es stellt sich nämlich heraus, daß Kommutatoren für Dirac-Teilchen nicht zum Ziel führen (insbesondere ergibt sich kein nach unten beschränkter Hamiltonoperator). Dies ist eine weitere Manifestation des oben erwähnten Spin-Statistik-Theorems, wonach Teilchen mit halbzahligen Spin¹² stets Fermionen sind.

Um die Quantisierung des Feldes vorzubereiten, stellen wir zunächst die Lagrangedichtefunktion auf. Da die Feldgleichung eine Differentialgleichung erster Ordnung ist, darf die Lagrangedichte die Ableitungen nur linear enthalten. Da wir freie Teilchen beschreiben wollen, muß die Lagrangedichte eine Bilinearform des Dirac-Spinorfeldes sein, und damit die Lorentzinvarianz sichergestellt ist, sollte sie ein Skalarfeld ergeben. Dadurch werden wir auf die Lagrangedichte

$$\mathcal{L} = \bar{\psi}(i\rlap{\not{D}} - m)\psi \quad (6.6.55)$$

geführt. Da $\psi \in \mathbb{C}^4$ ist, können wir wieder ψ und $\bar{\psi}$ als voneinander unabhängige Felder betrachten und getrennt voneinander variieren. Die Euler-Lagrangegleichungen ergeben dann in der Tat die Dirac-Gleichung (6.6.1) und die daraus folgende Gleichung für das Dirac-adjungierte Feld (6.6.51).

Zum Übergang zum Hamilton-Formalismus, benötigen wir als nächstes die kanonisch konjugierten

¹²Dirac-Teilchen haben, wie wir oben anhand des Verhaltens der Dirac-Spinoren unter Drehungen gesehen haben, Spin 1/2.

Feldimpulse. Es ergibt sich

$$\Pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} = i\bar{\psi}\gamma^0 = i\psi^\dagger, \quad \bar{\Pi} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\bar{\psi}}} = 0. \quad (6.6.56)$$

Auf den ersten Blick sieht dies fatal aus, da offenbar der kanonische Impuls zum adjungierten Feld verschwindet. Scheinbar sehen wir uns vor ähnliche Probleme gestellt wie oben beim elektromagnetischen Feld. Dies ist aber lediglich Folge der besonderen Struktur der Lagrangedichte. Man könnte dies beheben, wenn man den Ausdruck in ψ und $\bar{\psi}$ symmetrisiert, was nur um eine totale Divergenz von (6.6.55) verschieden wäre, was im Variationsprinzip keine Änderung für die Feldgleichungen ergibt. Wesentlich ist nur, daß wir die Hamiltondichte mit dem Feldimpuls und dem Feld und seinen räumlichen Ableitungen ausdrücken können, und das ist in der Tat der Fall:

$$\mathcal{H} = \Pi\dot{\psi} - \mathcal{L} = i\bar{\psi}\gamma^0\partial_t\psi - i\bar{\psi}(\not{\partial} + im)\psi = \bar{\psi}(-i\vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} + m)\psi = -\Pi\gamma^0(\vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} + im)\psi. \quad (6.6.57)$$

Die kanonischen Hamiltonschen Bewegungsgleichungen lauten

$$\dot{\psi} = \frac{\delta H}{\delta \Pi} = -\gamma^0(\vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} + im)\psi, \quad \dot{\Pi} = -\frac{\delta H}{\delta \psi} = \Pi\left(-\gamma^0\vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} + im\right). \quad (6.6.58)$$

Multiplikation der ersten Gleichung von links mit $i\gamma^0$ und Zusammenfassen der Terme auf einer Seite liefert wieder die Diracgleichung (6.6.1). Multiplikation der zweiten Gleichung von rechts her mit $i\gamma^0$ und Zusammenfassung der Terme liefert die Gleichung (6.6.51) für $\Pi\gamma^0$. Aufgrund der besonderen Struktur der obigen Lagrangedichte ergibt sich der Zusammenhang (6.6.56) zwischen Feld und kanonisch konjugiertem Impuls nicht aus den kanonischen Gleichungen. Es ergibt sich aber keine Inkonsistenz, diese Beziehung einfach als **Nebenbedingung** zu fordern, d.h. wir können

$$\Pi = i\bar{\psi}\gamma^0 = i\psi^\dagger \quad (6.6.59)$$

setzen.

6.7 Quantisierung des freien Dirac-Feldes

Die Quantisierung des Diracfeldes erfolgt nun dadurch, daß wir ψ durch einen Operator ψ ersetzen. Wir fordern nun aber wegen des Spin-Statistik-Theorems keine kanonischen Kommutatorregeln sondern **kanonische Antikommutatorregeln**. Wie wir sehen werden, ist dies kein Widerspruch zur allgemeinen quantentheoretischen Dynamik, denn die Observablen werden stets durch Funktionen aus einer *gerade Anzahl* von Fermionenfeldoperatoren aufgebaut; insbesondere die Hamiltondichte ist eine bilineare Form in den Feldern. Wie wir zeigen werden, erfüllt der dazugehörige Hamiltonoperator die korrekten Kommutatorrelationen mit den Feldern, so daß sich aus der Quantendynamik wieder die Dirac-Gleichung für den Feldoperator ergeben wird, wie es sein muß. Wir verlangen also die **Antikommutator-Relationen zu gleichen Zeiten**

$$\{\psi_a(t, \vec{x}), \psi_b(t, \vec{y})\} = 0, \quad \{\psi_a(t, \vec{x}), \Pi_b(t, \vec{y})\} = i\{\psi_a(t, \vec{x}), \psi_b^\dagger(t, \vec{y})\} = i\delta_{ab}\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}). \quad (6.7.1)$$

Die $a, b \in \{1, 2, 3, 4\}$ numerieren dabei die Dirac-Spinorkomponenten durch.

Wir berechnen nun die Modenentwicklung nach ebenen Wellen. Wir erwarten für die Teilchen und Antiteilchen jeweils zwei Spinfreiheitsgrade (insgesamt also vier Feldfreiheitsgrade für jede Impulsmode).

Wie in der relativistischen Teilchenphysik üblich, wird der Spin im Ruhesystem des Teilchens gemessen. Es sei also $\sigma = \pm 1/2$ der Eigenzustand zum Spinoperator Σ^3 für $\vec{k} = 0$. Es ist sehr zweckmäßig und bequem, die übrigen Zustände durch einen drehungsfreien Lorentzboost in Richtung von \vec{k} , d.h. durch

$$\Lambda_B(-\eta\vec{n}) \begin{pmatrix} m \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = k \quad \text{mit} \quad \eta = \text{arcosh} \left(\frac{E(\vec{k})}{m} \right), \quad \vec{n} = \frac{\vec{k}}{K}, \quad (6.7.2)$$

zu definieren. Dieses Programm führen wir nun aus. Dazu definieren wir zunächst die **Feldmoden mit positiver Frequenz** durch

$$u_{\vec{k},+}^-(x) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3 2E(\vec{k})}} \exp(-ik \cdot x)|_{k^0=E(\vec{k})}, \quad (6.7.3)$$

Die korrekte quantenfeldtheoretische Modenentwicklung muß mit dem **Feynman-Stückelberg-Trick**, der einfach darin besteht, den Feldmoden mit negativer Frequenz einen Erzeugungs- statt einen Vernichtungsoperators zuzuordnen, wie folgt aussehen

$$\psi(x) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k} \sum_{\sigma} \left[\mathbf{a}(\vec{k}, \sigma) u(\vec{k}, \sigma) u_{\vec{k},+}^-(x) + \mathbf{b}^\dagger(\vec{k}, \sigma) v(\vec{k}, \sigma) u_{\vec{k},+}^*(x) \right]. \quad (6.7.4)$$

Damit diese Funktion die Dirac-Gleichung erfüllt, müssen die Spinoren u und v offenbar den Gleichungen

$$(\not{k} - m)u(\vec{k}, \sigma) = 0, \quad (\not{k} + m)v(\vec{k}, \sigma) = 0 \quad \text{mit} \quad k^0 = E(\vec{k}) \quad (6.7.5)$$

genügen. Es ist klar, daß beide Gleichungen mit der Onshell-Bedingung $k^0 = E(\vec{k})$ verträglich sind, denn multipliziert man die Gleichungen jeweils mit $\not{k} \pm m$, erhält man die Forderung $k^2 = (k^0)^2 - \vec{k}^2 = m^2$.

Für $\vec{k} = 0$ erhalten wir die Gleichungen

$$\gamma^0 u(0, \sigma) = u(0, \sigma), \quad \gamma^0 v(0, \sigma) = -v(0, \sigma). \quad (6.7.6)$$

Setzt man die Diracmatrix γ^0 ein, erhält man die linear unabhängigen Lösungen

$$\begin{aligned} u(0, +1/2) &= \sqrt{m} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} =: \sqrt{m} u'(0, +1/2), & u(0, -1/2) &= \sqrt{m} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} =: \sqrt{m} u'(0, -1/2), \\ v(0, +1/2) &= \sqrt{m} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} =: \sqrt{m} v'(0, +1/2), & v(0, -1/2) &= \sqrt{m} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} =: \sqrt{m} v'(0, -1/2). \end{aligned} \quad (6.7.7)$$

Die etwas ungewohnte Normierung ist bequem, wie wir gleich noch sehen werden. Jetzt führen wir den Boost (6.7.2) aus. Mit (6.6.36) erhalten wir dabei unter Berücksichtigung von $\gamma = E(\vec{k})/m := E/m$

und den Eigenwertgleichungen (6.7.6) für die Felder bei $\vec{k} = 0$

$$\begin{aligned} u(\vec{k}, \sigma) &= \sqrt{\frac{1}{2(E+m)}}(m + \not{k})u'(0, \sigma), \\ v(\vec{k}, \sigma) &= \sqrt{\frac{1}{2(E+m)}}(m - \not{k})v'(0, \sigma). \end{aligned} \quad (6.7.8)$$

Es ist wichtig zu bemerken, daß dies i.a. *keine* Eigenzustände des Spinoperators Σ^3 sind, da Σ^3 i.a. *nicht* mit dem Boost $S_B(\vec{\eta})$ kommutiert. Vielmehr besitzt konstruktionsgemäß das Teilchen in seinem Ruhssystem eine wohldefinierte Spin-z-Komponente $\sigma \in \{\pm 1\}$.

Für ein masseloses Teilchen wird

$$\begin{aligned} u(\vec{k}, \sigma) &= \sqrt{\frac{1}{2E}}\not{k}u'(0, \sigma), \\ v(\vec{k}, \sigma) &= \sqrt{\frac{1}{2E}}(-\not{k})v'(0, \sigma). \end{aligned} \quad (6.7.9)$$

In diesem Fall repräsentieren diese Zustände für Teilchen, die sich in z-Richtung bewegen, Zustände mit bestimmter **Helizität**. Die Helizität ist dabei als die Projektion des Spins auf die Impulsrichtung definiert, d.h. der entsprechende Operator ist

$$\mathbf{h} = \frac{\vec{k} \cdot \vec{\Sigma}}{|\vec{k}|}. \quad (6.7.10)$$

Es ist leicht zu zeigen, daß \mathbf{h} mit den γ^μ vertauscht. Für $\vec{k} = k^3 \vec{e}_3$ ist also

$$\mathbf{h}u(k^3 \vec{e}_3, \sigma) = \sigma u(k^3 \vec{e}_3, \sigma), \quad \mathbf{h}v(k^3 \vec{e}_3, \sigma) = \sigma v(k^3 \vec{e}_3, \sigma). \quad (6.7.11)$$

Für masselose Teilchen sind also u und v Eigenzustände der Helizität in dem Bezugssystem, in dem $\vec{k} \parallel \vec{e}_3$ ist, zu den Eigenwerten $\sigma \in \{-1/2, +1/2\}$.

Für praktische Rechnungen benötigen wir noch die folgenden „**Pseudoorthogonalitätsrelationen**“

$$\bar{u}(\vec{k}, \sigma)u(\vec{k}, \sigma') = 2m\delta_{\sigma, \sigma'}, \quad \bar{v}(\vec{k}, \sigma)v(\vec{k}, \sigma') = -2m\delta_{\sigma, \sigma'}, \quad (6.7.12)$$

$$\bar{u}(\vec{k}, \sigma)v(\vec{k}, \sigma') = \bar{v}(\vec{k}, \sigma)u(\vec{k}, \sigma') = 0, \quad (6.7.13)$$

$$u(\vec{k}, \sigma)^\dagger u(\vec{k}, \sigma') = 2E\delta_{\sigma, \sigma'}, \quad v(\vec{k}, \sigma)^\dagger v(\vec{k}, \sigma') = 2E\delta_{\sigma, \sigma'}, \quad (6.7.14)$$

$$u(\vec{k}, \sigma)^\dagger v(-\vec{k}, \sigma') = v(\vec{k}, \sigma)^\dagger u(-\vec{k}, \sigma') = 0. \quad (6.7.15)$$

Diese Gleichungen lassen sich unmittelbar mit einfachen Manipulationen mit den Diracmatrizen und den Eigenwertgleichungen $\gamma^0 u(0, \sigma) = u(0, \sigma)$ und $\gamma^0 v(0, \sigma) = -v(0, \sigma)$ herleiten. In der letzten Gleichung (6.7.15) ist es wichtig zu beachten, daß die Dreierimpulse in diesen Formeln zueinander entgegengesetzt gerichtet sein müssen, d.h. das Argument in einer der beiden Funktionen muß $-\vec{k}$ sein!

Zur Berechnung der Antikommutatorrelationen für die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren versuchen wir die Modenentwicklung (6.7.4) nach $\mathbf{a}(\vec{k}, \sigma)$ und $\mathbf{b}^\dagger(\vec{k}, \sigma)$ aufzulösen. Aus der Definition der

Feldmoden (6.7.3) folgt (*Übung!*)

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} u_{\vec{k},+}^*(x) u_{\vec{k}',+}(x) = \frac{1}{2E(\vec{k})} \delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}'), \quad (6.7.16)$$

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} u_{\vec{k},+}^*(x) u_{\vec{k}',+}^*(x) = \frac{1}{2E(\vec{k})} \exp(2iEt) \delta^{(3)}(\vec{k} + \vec{k}'). \quad (6.7.17)$$

Multiplizieren wir also die Modenentwicklung (6.7.4) mit $u_{\vec{k},+}(x)$ bzw. mit $u_{\vec{k},+}^*(x)$ und wenden (6.7.14) und (6.7.15) an, erhalten wir

$$\begin{aligned} \mathbf{a}(\vec{k}, \sigma) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} u^\dagger(\vec{k}, \sigma) u_{\vec{k},+}^*(x) \psi(x), \\ \mathbf{b}(\vec{k}, \sigma) &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \psi^\dagger(x) v(\vec{k}, \sigma) u_{\vec{k},\sigma}^*(x). \end{aligned} \quad (6.7.18)$$

Mit Hilfe der Antikommutatorrelationen für die Felder (6.7.1) und der Orthogonalitätsrelationen (6.7.14-6.7.15) erhalten wir daraus die Antikommutatorrelationen für die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$\begin{aligned} \{\mathbf{a}(\vec{k}, \sigma), \mathbf{a}^\dagger(\vec{k}', \sigma')\} &= \{\mathbf{b}(\vec{k}, \sigma), \mathbf{b}^\dagger(\vec{k}', \sigma')\} = \delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}') \delta_{\sigma\sigma'}, \\ \{\mathbf{a}(\vec{k}, \sigma), \mathbf{a}(\vec{k}', \sigma')\} &= \{\mathbf{b}(\vec{k}, \sigma), \mathbf{b}(\vec{k}', \sigma')\} = 0, \\ \{\mathbf{a}(\vec{k}, \sigma), \mathbf{b}(\vec{k}', \sigma')\} &= \{\mathbf{a}^\dagger(\vec{k}, \sigma), \mathbf{b}^\dagger(\vec{k}', \sigma')\} = 0. \end{aligned} \quad (6.7.19)$$

Zur Berechnung des Hamiltonoperators müssen wir, wie oben beim elektromagnetischen Feld, die **Hamiltondichte normalordnen**. Dabei ist zu beachten, daß wir diesmal die fermionischen Antikommutatorregeln zu berücksichtigen haben, d.h. es gilt z.B.

$$:\mathbf{a}(\vec{k}, \sigma) \mathbf{a}^\dagger(\vec{k}', \sigma') := -\mathbf{a}^\dagger(\vec{k}', \sigma') \mathbf{a}(\vec{k}, \sigma), \quad (6.7.20)$$

d.h. der normalgeordnete Ausdruck erhält zusätzlich das Vorzeichen der Permutation, die nötig ist, um die Normalordnung aus der ursprünglichen Operatoranordnung herzustellen.

Für die Lösung der Feldgleichungen lautet die Hamiltondichte gemäß (6.6.57)

$$\mathcal{H} := \bar{\psi}(-i\gamma \cdot \vec{\nabla} + m)\psi := \bar{\psi}(i\gamma^0 \partial_t - i\vec{\gamma} + m)\psi(x) := \psi^\dagger i\partial_t \psi. \quad (6.7.21)$$

In diese Gleichung die Modenentwicklung (6.7.4) eingesetzt, über \vec{x} integriert und die Orthogonalitätsbeziehungen (6.7.14-6.7.15) angewandt, liefert dann den **positiv semidefiniten Hamiltonoperator**

$$\mathbf{H} = \int_V d^3\vec{x} \mathcal{H} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k} \sum_{\sigma} E(\vec{k}) [\mathbf{n}_a(\vec{k}, \sigma) + \mathbf{n}_b(\vec{k}, \sigma)]. \quad (6.7.22)$$

Ebenso findet man den Ladungsoperator gemäß (6.6.54)

$$\mathbf{Q} = \int_V d^3\vec{x} : \psi^\dagger \psi := \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k} \sum_{\sigma} [\mathbf{n}_a(\vec{k}, \sigma) - \mathbf{n}_b(\vec{k}, \sigma)]. \quad (6.7.23)$$

Man beachte, daß wegen der fermionischen Normalordnungsvorschrift \mathbf{Q} *nicht* positiv definit ist, wie es der hermitesche Ausdruck unter dem Normalordnungssymbol suggeriert. Es ist also wieder nicht

die totale Teilchenzahl die Noetherladung der Phaseninvarianz sondern die „Nettoteilchenzahl“, also die Differenz zwischen der Anzahl der Teilchen und der Anzahl der Antiteilchen, ganz analog wie beim beladenen Bosefeld. Die **Besetzungszahloperatoren** sind dabei durch

$$\mathbf{n}_a(\vec{k}, \sigma) = \mathbf{a}^\dagger(\vec{k}, \sigma)\mathbf{a}(\vec{k}, \sigma), \quad \mathbf{n}_b(\vec{k}, \sigma) = \mathbf{b}^\dagger(\vec{k}, \sigma)\mathbf{b}(\vec{k}, \sigma) \quad (6.7.24)$$

definiert.

Das Energieeigenwertproblem läßt sich wieder wie beim harmonischen Oszillator lösen, nur daß jetzt wegen der Antikommutatorregeln $\mathbf{a}^2(\vec{k}, \sigma) = \mathbf{b}^2(\vec{k}, \sigma) = 0$ gilt, d.h. die Fockbasis ist durch

$$\left\{ \{n_a(\vec{k}, \sigma)\}, \{n_b(\vec{k}, \sigma)\} \right\} = \prod_{\vec{k}, \sigma} [\mathbf{a}^\dagger(\vec{k}, \sigma)]^{n_a(\vec{k}, \sigma)} [\mathbf{b}^\dagger(\vec{k}, \sigma)]^{n_b(\vec{k}, \sigma)} |\Omega\rangle \quad (6.7.25)$$

$$\text{mit } n_a(\vec{k}, \sigma), n_b(\vec{k}, \sigma) \in \{0, 1\}$$

gegeben. Dabei ist $|\Omega\rangle$ wieder der Vakuumzustand, der eindeutig durch

$$\forall \vec{k}, \sigma : \mathbf{a}(\vec{k}, \sigma)|\Omega\rangle = \mathbf{b}(\vec{k}, \sigma)|\Omega\rangle = 0 \quad (6.7.26)$$

definiert ist. Es kann also jeder Einteilchenzustand höchstens von einem Teilchen besetzt sein. Die Antivertauschungsregeln haben somit das **Paulische Ausschließungsprinzip** zur Folge.

6.8 Poincaré-Symmetrie der quantisierten Dirac-Theorie

Die Symmetrieanalyse des quantisierten Diracfeldes erfolgt analog wie beim elektromagnetischen Feld in Abschnitt 6.5. Wir berechnen zunächst den **kanonischen Energie-Impuls-Tensor** des Diracfeldes zu

$$\Theta^\mu_\nu = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi_a)} \partial_\nu \psi_a - \mathcal{L} \delta^\mu_\nu = i\bar{\psi} \gamma^\mu \partial_\nu \psi - \mathcal{L} \delta^\mu_\nu. \quad (6.8.1)$$

Für den Energie- und Impulsoperator erhalten wir in der quantisierten Theorie unter Berücksichtigung der Normalordnungsvorschrift

$$\mathbf{P}_\nu = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} : \Theta^0_\nu := \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} : \psi^\dagger(x) i \partial_\nu \psi(x) :, \quad (6.8.2)$$

wobei wir die Beziehung $\bar{\psi} \gamma^0 = \psi^\dagger$ verwendet haben.

Um die entsprechenden Ausdrücke für die Drehimpuls- und Boostoperatoren zu erhalten, müssen wir die entsprechenden infinitesimalen Transformationen

$$\text{Drehungen: } \delta x^0 = 0, \quad \delta \vec{x} = -\delta \vec{\varphi} \times \vec{x}, \quad \delta \psi = i \delta \vec{\varphi} \cdot \vec{\Sigma} \psi, \quad (6.8.3)$$

$$\text{Boosts: } \delta x^0 = -\delta \vec{\eta} \cdot \vec{x}, \quad \delta \vec{x} = -\delta \vec{\eta} t, \quad \delta \psi = -i \delta \vec{\eta} \cdot \vec{x} \psi, \quad (6.8.4)$$

mit den entsprechenden Erzeugern für die Dirac-Spinordarstellungen für Drehungen und Boosts (6.6.41) bzw. (6.6.30) im allgemeinen kanonischen Noether-Formalismus aus Abschnitt 4.3.6 anwenden (s. Gl. (4.3.89) für die Ausdrücke für die erhaltenen Ströme, wobei wir hier stets $\Omega_a^\mu = 0$ setzen können). Daraus ergeben sich die gesuchten Drehimpuls- und Boostoperatoren (*Übung!*) zu

$$\vec{\mathbf{J}} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} : \psi^\dagger(x) [\vec{x} \times (-i\vec{\nabla}) + \vec{\Sigma}] \psi(x), \quad (6.8.5)$$

$$\vec{\mathbf{K}} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} : \psi^\dagger(x) [i\vec{x} \partial_0 + it\vec{\nabla} + \vec{x}] \psi(x). \quad (6.8.6)$$

Beachten wir nun noch, daß der kanonische Feldimpuls durch (6.6.59) gegeben ist, so erhalten wir aus den Antikommutatorregeln für die Felder (6.7.1), daß sich die Dirac-Feldoperatoren unter Lorentztransformationen wie die klassischen Felder verhalten, wie es sein muß.

Um dies zu beweisen, betrachten wir zunächst zeitliche und räumliche Translationen. Sie sollten durch den unitären Operator

$$\mathbf{U}_T(a) = \exp(ia \cdot \mathbf{P}) \quad (6.8.7)$$

gegeben sein. Für eine infinitesimale Transformation folgt dann

$$\psi'(x') = \mathbf{U}_T(\delta a)\psi(x')\mathbf{U}_T^\dagger(\delta a) = \psi(x') + i\delta a^\mu [\mathbf{P}_\mu, \psi(x')] + \mathcal{O}(\delta a^2). \quad (6.8.8)$$

Anwenden der für irgendwelche drei Operatoren \mathbf{A} , \mathbf{B} und \mathbf{C} geltenden Gleichung

$$[\mathbf{AB}, \mathbf{C}] = \mathbf{A}\{\mathbf{B}, \mathbf{C}\} - \{\mathbf{A}, \mathbf{C}\}\mathbf{B} \quad (6.8.9)$$

liefert unter Verwendung von (6.8.2) und den gleichzeitigen Antikommutatorregeln (6.7.1) nach einfacher Rechnung (*Übung!*)

$$[\mathbf{P}_\mu, \psi(x')] = -i\partial_\mu \psi(x'). \quad (6.8.10)$$

Von der Theorie des nichtquantisierten Diracfeld erwarten wir nun, daß es sich unter infinitesimalen Translationen gemäß

$$x' = x - \delta a, \quad \psi(x') = \psi(x) = \psi(x' + \delta a) = \psi(x') + \delta a^\mu \partial_\mu \psi(x') \quad (6.8.11)$$

verhält. Der Vergleich mit (6.8.8) zeigt unter Verwendung von (6.8.10), daß dies tatsächlich der Fall ist. Die Rechnung für Drehungen und Boosts verläuft genau analog. Die unitären Transformationen lauten in diesem Fall¹³

$$\mathbf{U}_D(\vec{\varphi}) = \exp(-i\vec{\varphi} \cdot \vec{\mathbf{J}}), \quad \mathbf{U}_B(\vec{\eta}) = \exp(+i\vec{\eta} \cdot \vec{\mathbf{K}}), \quad (6.8.12)$$

und die entsprechenden Kommutatorrelationen lauten (*Übung!*)

$$\begin{aligned} [\vec{\mathbf{J}}, \psi(x')] &= -[\vec{x}' \times (-i\vec{\nabla}) + \vec{\Sigma}] \psi(x'), \\ [\vec{\mathbf{K}}, \psi(x')] &= -[i\vec{x}' \partial_t + it\vec{\nabla} - \vec{x}] \psi(x'). \end{aligned} \quad (6.8.13)$$

Dies führt dann zu dem von den klassischen Feldern her zu erwartenden Verhalten unter infinitesimalen Drehungen bzw. Boosts

$$\begin{aligned} \delta x^0 &= 0, \quad \delta \vec{x} = -\delta \vec{\varphi} \times \vec{x}, \quad \psi'(x') = (\mathbb{1} + \delta \vec{\varphi} \times \vec{\nabla} + i\delta \vec{\varphi} \cdot \vec{\Sigma}) \psi(x'), \\ \delta x^0 &= -\delta \vec{\eta} \cdot \vec{x}, \quad \delta \vec{x} = -\delta \vec{\eta} x^0, \quad \psi'(x') = (\mathbb{1} + \vec{x}' \partial_0 + x'^0 \vec{\nabla} - i\vec{x}) \psi(x'). \end{aligned} \quad (6.8.14)$$

Dies zeigt, daß die quantisierte Dirac-Feldtheorie tatsächlich eine **unitäre Darstellung der Poincarégruppe** liefert. Da sich die Feldoperatoren wie ihre nichtquantisierten Analoga wie lokale Felder unter diesen Transformationen verhalten, haben wir wieder eine **lokale Quantenfeldtheorie** vor uns. Wie wir oben gesehen haben, führte zugleich die Quantisierung als Fermionenfeld gemäß (6.7.22) auch zu einem **positiv semidefiniten Hamiltonoperator**. Lokale Observablen, wie der Energie-Impuls-Tensor¹⁴ oder der erhaltene Strom (6.6.50), die durch **bilineare** Ausdrücke in den Feldoperatoren gegeben sind, kommutieren auch stets, wenn die Raumzeit-Argumente raumartigen Abstand haben. Dies

¹³Man beachte die auf Konventionen beruhenden Vorzeichen!

¹⁴Streng genommen müßten wir durch Hinzufügen einer geeigneten Viererdivergenz analog zum Vorgehen beim elektromagnetischen Feld den kanonischen Energie-Impuls-Tensor noch symmetrisch unter Vertauschung der Indizes machen, um einen physikalisch sinnvollen Energie-Impuls-Tensor zu erhalten, aber für das jetzige Argument ist dies unerheblich.

folgt unmittelbar aus der Relation (6.8.9) und den Kommutatorregeln zu gleichen Zeiten sowie der soeben nachgewiesenen Lorentzkovarianz dieser Ausdrücke. Da kommutierende Observablen kommutierende, also unabhängig voneinander wohldefinierte Werte annehmen können, bedeutet dies, daß Messungen, die auf eine Umgebung in Raum und Zeit beschränkt sind (also sog. lokale Messungen), keine Auswirkungen auf andere lokale Messungen, die in einem raumartig dazu gelegenen Raumzeitbereich stattfinden, haben können. Es können also insbesondere auch keine Informationen überlichtschnell ausgetauscht werden, wie es dem relativistischen Kausalitätsprinzip entspricht. Man bezeichnet die Vertauschbarkeit lokaler Observablen auf raumartigen Raumzeitabständen daher auch als **Mikrokausalität**. Die Diracfelder ergeben also eine **lokale, mikrokausale Quantenfeldtheorie mit positiv semidefinitem Hamiltonoperator** und besitzt somit eine physikalisch sinnvolle Bedeutung im Sinne der Bornschen Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Quantentheorie. Dies ist, wie schon mehrfach betont, für eine Einteilcheninterpretation des unquantisierten Dirac-Feldes für den Fall wechselwirkender Teilchen nicht möglich. In der Tat zeigt sich, daß bei relativistischen Streuprozessen neue Teilchen erzeugt und vernichtet werden können, und daher erweist sich die Quantenfeldtheorie als die (bislang einzige) adäquate Beschreibung relativistischer Streuprozesse.

6.9 Die diskreten Symmetrietransformationen P , C und T

In diesem Abschnitt betrachten wir die diskreten Symmetrietransformationen der **räumlichen Spiegelung (Parität) P** , der **Ladungskonjugation** (Vertauschen aller Teilchen mit ihren jeweiligen Antiteilchen) C und der **Zeitumkehr oder Zeitspiegelung** für Dirac-Teilchen. Es wird sich herausstellen, daß die **Zeitumkehrtransformation antiunitär** realisiert werden muß.

Wir bemerken noch, daß die schwache Wechselwirkung die einzelnen Symmetrietransformationen C , P und T ebenso wie die kombinierte Transformation CP verletzt. Allerdings kann man zeigen, daß jede lokale, mikrokausale Quantenfeldtheorie mit stabilem Grundzustand invariant unter der kombinierten Transformation CPT sein muß. Bislang gibt es keine Hinweise einer Verletzung dieser CPT -Invarianz. Der Beweis geht auf Pauli und Lüders zurück (für eine ausführliche Darstellung vgl. [SW64]).

6.9.1 Raumspiegelungen

Nach dem Wigner-Theorem muß bei **diskreten Symmetrietransformationen** untersucht werden, ob die Transformationen als unitärer oder antiunitärer Operator realisiert werden müssen. Dies läßt sich am einfachsten an der **Heisenbergalgebra** von Orts- und Impulsoperatoren untersuchen. Da wir uns hier nur mit massiven oder masselosen Diraceteilchen beschäftigen, ist dies auch im relativistischen Kontext unproblematisch, da für solche Felder sowohl ein Orts- als auch ein Impulsoperator existiert, die die Heisenberg-Kommutatorrelationen erfüllen.

Die Raumspiegelung sollte folgendermaßen auf Orts- und Impulsoperatoren operieren:

$$\vec{x}' = \mathbf{U}(P)\vec{x}\mathbf{U}^\dagger(P) = -\vec{x}, \quad \vec{p}' = \mathbf{U}(P)\vec{p}\mathbf{U}^\dagger(P) = -\vec{p}. \quad (6.9.1)$$

Die Kommutatorrelationen transformieren sich gemäß

$$[\mathbf{x}'_i, \mathbf{p}'_j] = [-\mathbf{x}_i, -\mathbf{p}_j] = [\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_j] \stackrel{!}{=} i\delta_{ij}. \quad (6.9.2)$$

Andererseits muß sich dies aus der kanonischen Kommutatorrelation für \mathbf{x} und \mathbf{p} durch die Ähnlichkeitstransformation mit $\mathbf{U}(P)$ ergeben:

$$[\mathbf{x}'_i, \mathbf{p}'_j] = \mathbf{U}(P)[\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_j]\mathbf{U}^\dagger(P) = \mathbf{U}(P)i\delta_{ij}\mathbf{U}^\dagger(P) = \pm i\delta_{ij}, \quad (6.9.3)$$

wobei das obere Vorzeichen für einen unitären, das untere für einen antiunitären Operator gilt. Es muß also die Raumspiegeltransformation notwendig durch einen **unitären Operator** dargestellt werden.

Der **Diracspinoroperator** sollte sich unter der Paritätstransformation gemäß

$$\psi_P(t, \vec{x}) = \mathbf{U}(P)\psi(t, \vec{x})\mathbf{U}^\dagger(P) = \eta_P \hat{S}(P)\psi(t, -\vec{x}) \quad (6.9.4)$$

transformieren. Dabei ist $\hat{S}(P)$ eine Spinortransformationsmatrix, die $\hat{S}^2(P) = \mathbb{1}$ erfüllt und η_P ein Phasenfaktor. Da $\mathbf{U}(P)$ unitär ist, muß für ψ_P die Diracgleichung gelten, d.h. es muß

$$\hat{S}^{-1}(P)(i\cancel{\not{D}} - M)\hat{S}(P)\psi(t, -\vec{x}) = \hat{S}^{-1}(P)(i\gamma^0\partial_t - i\vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} - m)\hat{S}(P)\psi(t, -\vec{x}) \stackrel{!}{=} 0 \quad (6.9.5)$$

sein. Für den Operator ψ gilt voraussetzungsgemäß die Diracgleichung

$$(i\cancel{\not{D}} - m)\psi = (i\gamma^0\partial_t + i\vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} - m)\psi = 0. \quad (6.9.6)$$

Daraus folgt nun aber (6.9.5), wenn

$$\hat{S}^{-1}(P)\gamma^0\hat{S}(P) = \gamma^0, \quad \hat{S}^{-1}(P)\vec{\gamma}\hat{S}(P) = -\vec{\gamma} \quad \text{bzw.} \quad \hat{S}^{-1}(P)\gamma^\mu\hat{S}(P) = P^\mu{}_\nu\gamma^\nu \quad (6.9.7)$$

gilt. Dabei ist $(P^\mu{}_\nu) = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$. Es ist klar, daß aufgrund der Antikommutatorrelationen der γ -Matrizen,

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}\mathbb{1}, \quad (6.9.8)$$

die Matrix

$$\hat{S}(P) = \hat{S}^{-1}(P) = \gamma^0 \quad (6.9.9)$$

sein muß. Man rechnet auch leicht explizit nach, daß diese Matrix tatsächlich (6.9.8) erfüllt.

6.9.2 Ladungskonjugation

Die Ladungskonjugationstransformation C soll Teilchen und Antiteilchen vertauschen. Da ψ Teilchen vernichtet und Antiteilchen erzeugt, muß ψ_C umgekehrt Antiteilchen vernichten und Teilchen erzeugen. Dies ist aber auch für den Operator $\bar{\psi}^t$ der Fall. Dabei steht das hochgestellte t für Transposition im Spinorraum. Die Ladungskonjugationsoperation vertauscht mit Orts- und Impulsoperator, woraus aus den Heisenbergschen Vertauschungsrelationen auf analoge Weise wie oben beim Raumspiegelungsoperator folgt, daß sie **unitär** realisiert werden muß. Es ist also

$$\psi_C(t, \vec{x}) = \mathbf{U}(C)\psi(t, \vec{x})\mathbf{U}^\dagger(C) = \eta_C \hat{S}(C)\bar{\psi}^t(t, \vec{x}). \quad (6.9.10)$$

Da $\mathbf{U}(C)$ unitär ist, muß für ψ_C wie für ψ die Diracgleichung gelten, d.h.

$$\hat{S}^{-1}(C)(i\cancel{\not{D}} - m)\hat{S}(C)\bar{\psi}^t(t, \vec{x}) \stackrel{!}{=} 0. \quad (6.9.11)$$

Andererseits gilt für den Dirac-adjungierten Operator

$$\bar{\psi}(t, \vec{x})(i\cancel{\not{D}} + m) = 0, \quad (6.9.12)$$

und durch Transponieren bzgl. des Spinorraums folgt daraus

$$(i\cancel{\not{D}}^t + m)\bar{\psi}^t(t, x) = 0. \quad (6.9.13)$$

Der Vergleich von (6.9.11) mit (6.9.13) zeigt, daß die Matrix $\hat{S}(C)$ die Gleichung

$$S^{-1}(C)\gamma^\mu\hat{S}(C) = -(\gamma^\mu)^t \quad (6.9.14)$$

erfüllen muß. In unserer Darstellung der Dirac-Matrizen (6.6.6) gilt

$$(\gamma^\mu)^t = (-1)^\mu \gamma^\mu, \quad (6.9.15)$$

und wie man leicht nachrechnet, erfüllt

$$\hat{S}(C) = i\gamma^2\gamma^0, \quad \hat{S}^{-1}(C) = i\gamma^0\gamma^2 = -\hat{S}(C) \quad (6.9.16)$$

die Relationen (6.9.14).

6.9.3 Zeitumkehr

Die Zeitumkehrtransformation muß wie folgt auf Orts- und Impulsoperatoren wirken:

$$\mathbf{U}(T)\vec{x}\mathbf{U}^\dagger(T) = \vec{x}, \quad \mathbf{U}(T)\vec{p}\mathbf{U}^\dagger(T) = -\vec{p}. \quad (6.9.17)$$

Eine analoge Rechnung wie oben beim Paritätsoperator ergibt, daß die **Zeitumkehrtransformation antiunitär** zu repräsentieren ist. Da ein antiunitärer Operator mit einer Adjunktion der ähnlichkeits-transformierten Operatoren einhergeht, muß die Wirkung der Zeitumkehrtransformation auf den Dirac-Feldoperator durch

$$\psi_T(t, \vec{x}) = \mathbf{U}(T)\psi(t, \vec{x})\mathbf{U}^\dagger(T) = \eta_T \hat{S}(T) \bar{\psi}^t(-t, \vec{x}) \quad (6.9.18)$$

gegeben sein. Aus der Gültigkeit der Diracgleichung für $\psi(t, \vec{x})$ folgt wegen der Antiunitarität von $\mathbf{U}(T)$

$$(-i\vec{\mathcal{D}}^* - m)\psi_T(t, \vec{x}) = 0. \quad (6.9.19)$$

Dies in (6.9.18) eingesetzt, liefert die Bedingung

$$\hat{S}^{-1}(T)(i\vec{\mathcal{D}}^* + m)\hat{S}(T)\bar{\psi}^t(-t, \vec{x}) = 0. \quad (6.9.20)$$

Ein Vergleich mit (6.9.13) ergibt, daß

$$\hat{S}^{-1}(T)(\gamma^0)^*\hat{S}(T) = -(\gamma^0)^t, \quad \hat{S}^{-1}(T)\vec{\gamma}^*\hat{S}(T) = \vec{\gamma}^t \Leftrightarrow \hat{S}^{-1}(T)(\gamma^\mu)^*\hat{S}(T) = T^\mu{}_\nu(\gamma^\mu)^t \quad (6.9.21)$$

mit der Zeitumkehrmatrix $(T^\mu{}_\nu) = \text{diag}(-1, 1, 1, 1)$. In unserer Darstellung der Diracmatrizen (6.6.6) sind γ^0 , γ^1 und γ^3 reell und γ^2 rein imaginär. Zusammen mit (6.9.15) folgt dann aus (6.9.21)

$$\hat{S}^{-1}(T)\gamma^\mu\hat{S}(T) = -\gamma^\mu. \quad (6.9.22)$$

Es ist sofort klar, daß

$$\hat{S}(T) = \hat{S}^{-1}(T) = \gamma^5 \quad (6.9.23)$$

mit

$$\gamma^5 = \gamma_5 := i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \quad (6.9.24)$$

diese Gleichung erfüllt.

Alternativ können wir aber wegen (6.9.10) auch

$$\psi_T(t, \vec{x}) = \eta_T \eta_C^* \hat{S}(T) \hat{S}^{-1}(C) \psi_C(-t, \vec{x}) \quad (6.9.25)$$

schreiben. Da sich ψ_C von ψ nur um eine unitäre Transformation unterscheidet, können wir die Zeitumkehrtransformation auch mit dem Ansatz

$$\psi_T(t, \vec{x}) = \eta'_T \hat{S}'(T) \psi(-t, \vec{x}) \quad (6.9.26)$$

realisieren. Offenbar ist bis auf eine Phase η

$$\hat{S}'(T) = \eta \hat{S}(T) \hat{S}^{-1}(C) = \eta \gamma_5 i \gamma^0 \gamma^2 = \eta \gamma^1 \gamma^3. \quad (6.9.27)$$

Die Standardwahl der Phase ist $\eta = i$, d.h.

$$\hat{S}'(T) = i \gamma^1 \gamma^3 = \hat{S}'^{-1}(T). \quad (6.9.28)$$

Setzt man (6.9.26) in die Bewegungsgleichung (6.9.19) des Operators $\psi_T(t, \vec{x})$ ein, erhalten wir durch Vergleich mit der Diracgleichung, die voraussetzungsgemäß für $\psi(t, \vec{x})$ gilt, die Bedingungen

$$\hat{S}'^{-1}(T) (\gamma^0)^* \hat{S}'(T) = \gamma^0, \quad \hat{S}'^{-1}(T) \vec{\gamma}^* \hat{S}'(T) = -\vec{\gamma}. \quad (6.9.29)$$

In der Dirac-Darstellung und der chiralen Darstellung der Diracmatrizen sind γ^0 , γ^1 und γ^3 reell und γ^2 rein imaginär, d.h. wir können (6.9.29) in der Form

$$\hat{S}'^{-1}(T) \gamma^\mu \hat{S}'(T) = (-1)^\mu \gamma^\mu = (\gamma^\mu)^t. \quad (6.9.30)$$

schreiben. Man weist durch direkte Rechnung nach, daß (6.9.28) in der Tat diese Bedingungen erfüllt. Alternativ können wir auch das konjugiert Komplexe von (6.9.29) bilden. Wegen $[\hat{S}'(T)]^* = -\hat{S}'(T)$ ergibt sich für diese Beziehungen dann die Form

$$\hat{S}'^{-1}(T) \gamma^0 \hat{S}'(T) = (\gamma^0)^*, \quad \hat{S}'^{-1}(T) \vec{\gamma} \hat{S}'(T) = -\vec{\gamma}^* \Rightarrow \hat{S}'^{-1}(T) \gamma^\mu \hat{S}'(T) = P^\mu{}_\nu (\gamma^\nu)^* \quad (6.9.31)$$

mit dem Raumspiegelungsoperator $(P^\mu{}_\nu) = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$.

6.9.4 Sesquilinearformen der Diracfelder

Für die Modellbildung für **Wechselwirkungen** sind die Kombinationen $\bar{\psi} \Gamma \psi$ wichtig, wobei Γ irgendwelche 4×4 -Matrizen sein können. Solche bilinearen Formen können nämlich in der Wechselwirkungslagrangedichte mit anderen Feldern geeigneten Wechselwirkungstermen zusammengesetzt werden. Dabei ist aber noch die relativistische Invarianz, also die Invarianz unter eigentliche orthochronen Lorentztransformationen sowie evtl. unter den oben besprochenen diskreten Transformationen wichtig.

Aus dem in Abschnitt 6.8 besprochenen Transformationsverhalten der Feldoperatoren und wegen (6.6.13) folgt sofort, daß

$$S = \bar{\psi} \psi \quad (6.9.32)$$

ein **Skalarfeld** unter eigentlich orthochronen Lorentztransformationen ist. Wegen (6.9.9) ist es auch ein Skalarfeld bzgl. Raumspiegelungen.

Ebenso ist

$$\mathbf{V}^\mu = \bar{\psi} \gamma^\mu \psi \quad (6.9.33)$$

ein Vektorfeld sowohl unter eigentliche orthochronen Lorentztransformationen als auch unter Raumspiegelungen. Man spricht in diesem Zusammenhang genauer von einem **polaren Vektor**.

Aus den Diracmatrizen läßt sich die Matrix

$$\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = -\frac{i}{4!}\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma}\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\rho\gamma^\sigma \quad (6.9.34)$$

bilden. Aus der zweiten Form können wir vermuten, daß sie sich wie ein Skalar unter eigentlich orthochronen Lorentztransformationen verhält, was sofort aus der Transformationseigenschaft der Dirac-Matrizen und $\det \Lambda = 1$ für $\Lambda \in \text{SO}(1,3)^\uparrow$ folgt. Unter Raumspiegelungen wechselt der Ausdruck allerdings sein Vorzeichen, denn es ist offenbar $\det \mathcal{P} = -1$. Folglich ist der Ausdruck

$$\mathbf{P} = \bar{\psi} \gamma^5 \psi \quad (6.9.35)$$

ein **pseudoskalares Feld**.

Ebenso ist

$$\mathbf{A}^\mu = \bar{\psi} \gamma^\mu \gamma^5 \psi \quad (6.9.36)$$

ein **Axialvektorfeld**, d.h. es transformiert sich unter eigentlich orthochronen Lorentztransformationen wie ein Vektorfeld, aber unter Raumspiegelungen mit einem zusätzlichen Vorzeichen, d.h. es gilt

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}^0(t, \vec{x}) \\ \vec{\mathbf{A}}(t, \vec{x}) \end{pmatrix} \xrightarrow{\mathcal{P}} \begin{pmatrix} -\mathbf{A}^0(t, -\vec{x}) \\ +\vec{\mathbf{A}}(t, -\vec{x}) \end{pmatrix}. \quad (6.9.37)$$

Schließlich ist noch

$$\mathbf{S}^{\mu\nu} = \bar{\psi} \sigma^{\mu\nu} \psi \quad \text{mit} \quad \sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{4} [\gamma^\mu, \gamma^\nu] \quad (6.9.38)$$

ein **antisymmetrisches Tensorfeld** zweiter Stufe.

Da die fünf Matrizen

$$\mathbb{1}_4, \quad \gamma^5, \quad \gamma^\mu, \quad \gamma^\mu \gamma^5, \quad \sigma^{\mu\nu} \quad (6.9.39)$$

linear unabhängig sind (*Übung!*) und insgesamt $1 + 1 + 4 + 4 + 6 = 16$ Matrizen vorliegen, kann man alle anderen möglichen Sesquilinearformen, die man aus dem Dirac-Spinor bilden kann, aus den oben definierten Formen durch Linearkombination zusammensetzen. Die Feldoperatoren \mathbf{S} , \mathbf{V}^μ , \mathbf{A}^μ und $\mathbf{T}^{\mu\nu}$ sind zudem noch **selbstadjungiert** (*Übung!*).

Kapitel 7

Einführung in die Quantenelektrodynamik

In diesem Kapitel legen wir die Anfangsgründe der Quantenelektrodynamik (QED) dar. Sie stellt das paradigmatische Beispiel für eine relativistische lokale Quantenfeldtheorie dar. Gleichzeitig ist sie diejenige Theorie, für die die präziseste Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment erreicht werden konnte (z.B. für das anomale magnetische Moment des Elektrons auf 12 signifikante Dezimalstellen).

Wir wählen hier den Weg der **nicht manifest kovarianten** Quantisierung in der **Coulomb-Eichung** der **spinoriellen QED**, also der Theorie für elektromagnetisch wechselwirkende **Dirac-Fermionen**. Wir werden zum Schluß unter Ausnutzung der **Eichinvarianz**, die das wichtigste Prinzip unseres modernen Verständnisses der elementaren Wechselwirkungen ist, **manifest kovariante Feynman-Regeln** erhalten. Für die manifest kovariante Operatorquantisierung (**Gupta-Bleuler-Formalismus**) der QED sei auf [Nac86, Wei95, Kug97] verwiesen.

Die Erweiterung des Eichprinzips auf **nichtabelsche Eichfelder**, der das **Standardmodell der Elementarteilchen** zugrundeliegt, kann hier leider nicht berücksichtigt werden und ist Gegenstand der Vorlesung „Quantenfeldtheorie“.

7.1 Klassische Elektrodynamik als Eichtheorie

Wir betrachten nun die Elektrodynamik von Dirac-Teilchen. Damit haben wir die QED im engeren Sinne vor Augen, die die elektromagnetische Wechselwirkung von Elektronen, Positronen und Photonen zum Gegenstand hat. In diesem Abschnitt beschäftigen wir uns zunächst mit der Beschreibung der entsprechenden **klassischen Feldtheorie**.

Wir gehen von der Lagrangedichte freier Dirac-Teilchen

$$\mathcal{L}_0 = \bar{\psi}(i\cancel{D} - m)\psi \quad (7.1.1)$$

aus (vgl. Abschnitt 6.6). Dort haben wir gesehen, daß der Strom (6.6.50)

$$j^\mu = \bar{\psi}\gamma^\mu\psi \quad (7.1.2)$$

aufgrund der Dirac-Gleichung

$$(i\cancel{D} - m)\psi = 0, \quad \bar{\psi}(i\overleftarrow{\cancel{D}} + m) = 0 \quad (7.1.3)$$

der Kontinuitätsgleichung

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \quad (7.1.4)$$

genügt und folglich die dazugehörige Ladung

$$Q = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \bar{\psi} \gamma^0 \psi \quad (7.1.5)$$

erhalten ist.

Von der klassischen Elektrodynamik wissen wir, daß die elektromagnetische Stromdichte der Kontinuitätsgleichung (7.1.4) genügen muß, damit bei Anwesenheit von Ladungen und Strömen die **Eichinvarianz** gewährleistet ist. Hier leiten wir nun die entsprechenden Feldgleichungen für die Wechselwirkung zwischen dem elektromagnetischen Feld und dem Spinorfeld aus der Forderung der **lokalen Eichinvarianz** her. Die Lagrangedichte (7.1.1) freier Dirac-Teilchen ist unter der **globalen Eichtransformation**

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x) = \exp(i\alpha)\psi(x), \quad \bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}'(x) = \exp(-i\alpha)\bar{\psi}(x) \quad (7.1.6)$$

invariant, und (7.1.2) ist der dazugehörige Noetherstrom. Die Transformation bzw. die durch sie repräsentierte Symmetrie heißt dabei „global“, weil der Gruppenparameter α dabei nicht von den Raumzeitkoordinaten x abhängt.

Diese Invarianz unter der Transformationsgruppe $U(1)$ geht nun zunächst verloren, wenn wir statt des konstanten Transformationsparameters α eine von den Raum-Zeit-Koordinaten x abhängige Transformation

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x) = \exp[iq\chi(x)]\psi(x), \quad \bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}'(x) = \exp[-iq\chi(x)]\bar{\psi}(x) \quad (7.1.7)$$

betrachten, denn dann ergibt sich die Ableitung

$$\partial_\mu \psi'(x) = \exp[iq\chi(x)] [\partial_\mu \psi(x) + iq \partial_\mu \chi(x) \cdot \psi(x)]. \quad (7.1.8)$$

Wir können aber die Ableitung wie folgt zu einer **kovarianten Ableitung** verallgemeinern:

$$D_\mu \psi(x) = [\partial_\mu + iqA_\mu(x)]\psi(x). \quad (7.1.9)$$

Wir erlauben dazu, daß sich zugleich mit (7.1.8) auch das **Eichfeld** A_μ transformiert. Dann können wir verlangen, daß

$$D'_\mu \psi'(x) = [\partial_\mu + iqA'_\mu(x)] \{ \exp[iq\alpha(x)]\psi(x) \} \stackrel{!}{=} \exp[iq\alpha(x)] D_\mu \psi(x) \quad (7.1.10)$$

ist. Führt man die Ableitung aus (*Übung!*), ergibt sich für das transformierte Eichfeld

$$A'_\mu(x) = A_\mu(x) - \partial_\mu \chi(x), \quad (7.1.11)$$

also in der Tat die von der klassischen Elektrodynamik bekannte **Eichtransformation** des Viererpotentials des elektromagnetischen Feldes (6.3.20).

Damit ist aber der Ausdruck

$$\mathcal{L}_{e,\text{eich}} = \bar{\psi}(i\not{D} - m)\psi \quad (7.1.12)$$

wie gewünscht invariant unter der **lokalen Eichtransformation**

$$\begin{aligned} \psi(x) \rightarrow \psi'(x) &= \exp[iq\chi(x)]\psi(x), & \bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}'(x) &= \exp[-iq\chi(x)]\bar{\psi}(x), \\ A_\mu(x) \rightarrow A'_\mu(x) &= A_\mu(x) - \partial_\mu \chi(x). \end{aligned} \quad (7.1.13)$$

Damit das Eichfeld dynamische Photonen beschreibt, müssen wir noch den eichinvarianten Term für freie masselose Vektorfelder als „kinetischen Term“ zur Lagrangedichte (6.3.67) hinzuaddieren. Damit haben wir die **Lagrangedichte der Quantenelektrodynamik**

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \bar{\psi}(i\cancel{D} - m)\psi - qA_\mu j^\mu \quad \text{mit} \quad j^\mu = \bar{\psi}\gamma^\mu\psi, \quad F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \quad (7.1.14)$$

aus dem Prinzip der Eichinvarianz hergeleitet. Da die zugrundegelegte Symmetriegruppe U(1) abelsch ist, bezeichnet man die QED als **abelsche Eichtheorie**. Damit ψ **Elektronen als Teilchen und Positronen als Antiteilchen** beschreibt, muß $q = -e = -\sqrt{4\pi\alpha}$ gesetzt werden. Dabei ist $\alpha \simeq 1/137$ die **Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante**.

Um eine eindeutige Lösung der Feldgleichungen zu erhalten, müssen wir wie schon im Fall freier Felder (vgl. Abschnitt 6.4) die **Eichung fixieren**. Hierzu wählen wir die **Coulomb-Eichbedingung**

$$\text{div}\vec{A} = 0, \quad (7.1.15)$$

die zwar nicht manifest Lorentz-kovariant ist, dafür aber auch im Falle wechselwirkender Felder eine vollständige Eichfixierung gewährleistet, wie wir gleich sehen werden. Für das elektromagnetische Feld ergeben sich dann wie für freie Felder die **beiden dreidimensional transversalen Feldfreiheitsgrade** als die dynamischen Feldfreiheitsgrade, und folglich enthält die mittels der Modenentwicklung nach ebenen Wellen im Wechselwirkungsbild quantisierte Theorie keine unphysikalischen Freiheitsgrade mehr, denn es treten nur Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für die dreidimensional transversalen Feldfreiheitsgrade auf.

Das Feld A^0 , welches schon deshalb kein unabhängiger dynamischer Freiheitsgrad sein kann, weil wie im Falle freier Felder der dazugehörige kanonische Feldimpuls identisch verschwindet, läßt sich aufgrund der Feldgleichungen als Funktional des elektromagnetischen Stromes qj^μ eliminieren. Es ergibt sich als **instantanes Coulombpotential** aus der Ladungsdichteverteilung der Elektronen und Positronen. Dies scheint der **Einstein-Kausalität** zu widersprechen, denn in einer relativistischen Feldtheorie kann es keine sich instantan ausbreitenden Wirkungen geben. Wie wir aber unten zeigen werden, stellt die Eichinvarianz der Theorie sicher, daß in der Tat beobachtbare Größen stets retardiert auf äußere Störungen reagieren, wobei die Wirkungsausbreitung stets unterhalb der Lichtgeschwindigkeit bleibt. Dabei heben sich die scheinbaren Effekte des instantanen Coulomb-Terms gegen andere unphysikalische Terme aus der übrigen Wechselwirkung weg.

Ein Vorteil der Coulomb-Eichung (insbesondere in nichtrelativistischen Anwendungen auf Atome und Moleküle mit vielen Elektronen oder in der Theorie des kondensierten Zustandes) ist andererseits die Möglichkeit, zunächst das (über die naive Störungstheorie hinausgehende!) Problem des gebundenen Zustandes mittels des Coulomb-Anteils des Hamiltonoperators näherungsweise zu lösen und dann das dynamische Photonenfeld störungstheoretisch zu berücksichtigen. Dies führt dann einerseits zu Korrekturen der gebundenen Zustände (z.B. die **Lamb-Shift**, die zur Aufhebung der Entartung bestimmter Energieniveaus in Atomen führen und die zur Entwicklung der modernen Renormierungstheorie für die QED Ende der 1940er Jahre durch **Feynman, Schwinger, Tomonaga und Dyson** geführt hat), andererseits aber auch zu Größen wie der Intensitätsverteilung von Spektrallinien aus Strahlungsübergängen des Atoms.

Um die Theorie zu quantisieren, leiten wir die Bewegungsgleichungen für das elektromagnetische Feld her, indem wir die Wirkung

$$S[A, \psi, \bar{\psi}] = \int_{\mathbb{R}^4} d^4x \mathcal{L}(x) \quad (7.1.16)$$

funktional nach A^μ differenzieren:

$$\frac{\delta S}{\delta A_\mu} = \partial_\mu F^{\mu\nu} - qj^\nu \stackrel{!}{=} 0. \quad (7.1.17)$$

In zeitliche und räumliche Komponenten aufgespalten folgt unter Verwendung der Eichbedingung (7.1.5)

$$\Delta A^0 = -qj^0, \quad (7.1.18)$$

$$\square \vec{A} = q\vec{j} - \vec{\nabla} A^0. \quad (7.1.19)$$

In der Tat ergibt sich daraus sofort als Lösung für A^0

$$A^0(x) = \frac{q}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x}' \frac{\rho(t, \vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \quad \text{mit} \quad \rho = j^0. \quad (7.1.20)$$

Die Verträglichkeit der Gleichung (7.1.19) mit der Eichbedingung (7.1.15) folgt aus der Kontinuitätsgleichung, denn es ist

$$\text{div} \square \vec{A} = q \text{div} \vec{j} - q \Delta A^0 \stackrel{(7.1.18)}{=} q \text{div} \vec{j} + q \partial_t j^0 = q \partial_\mu j^\mu = 0. \quad (7.1.21)$$

Hier zeigt sich der bereits oben mehrfach erwähnte wichtige Zusammenhang zwischen lokaler Eichinvarianz und Stromerhaltung: Die Stromerhaltung ist eine notwendige Bedingung für die Konsistenz der **eichfixierten Bewegungsgleichungen** mit der Eichbedingung (7.1.5), und die Möglichkeit, diese Nebenbedingung zu fordern ist ihrerseits allein durch die Eichinvarianz der Theorie gerechtfertigt.

Schließlich lautet nach der Eichfixierung mittels der Coulomb-eichbedingung (7.1.15) die Wirkung

$$S = \int_{\mathbb{R}^4} d^4x \left[\frac{1}{2} \dot{\vec{A}}^2 + \frac{1}{2} \vec{A} \cdot \Delta \vec{A} + \bar{\psi} (i \not{\partial} - m) \psi - \frac{q}{2} A_0 \bar{\psi} \gamma^0 \psi + q \vec{A} \cdot \bar{\psi} \vec{\gamma} \psi \right]. \quad (7.1.22)$$

Dabei ist für A_0 die Lösung (7.1.20) einzusetzen. Außerdem ist stets die Eichbedingung (7.1.15) zu berücksichtigen, von der wir eben gezeigt haben, daß sie konsistent mit den Bewegungsgleichungen ist. Wir können nunmehr die Spinorelektrodynamik **kanonisch quantisieren** und Störungstheorie betreiben wie wir es im nichtrelativistischen Fall in Kapitel 5 gezeigt haben.

Betrachten wir noch die physikalische Bedeutung unserer klassischen Theorie. Da der Wechselwirkungsterm

$$\mathcal{L}_{\text{int}} = -q A_\mu \bar{\psi} \gamma^\mu \psi \quad (7.1.23)$$

keine Ableitungen enthält, behält auch im wechselwirkenden Fall der Strom dieselbe Form wie für freie Dirac-Felder:

$$j^\mu = \bar{\psi} \gamma^\mu \psi. \quad (7.1.24)$$

Der elektromagnetische Strom ist durch

$$j_{\text{em}}^\mu = q j^\mu \quad (7.1.25)$$

gegeben. Dies wird insbesondere klar, wenn wir die Feldgleichungen (7.1.17) mit Hilfe der Komponenten des **Faraday-tensors**

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \quad (7.1.26)$$

ausdrücken. Dazu bilden wir die „zeit-räumlichen“ und „raum-räumlichen“ Komponenten

$$\begin{aligned} F_{0j} &= \dot{A}_j - \partial_j A_0 = -\dot{A}^j - \partial_j A^0 = E^j, \\ F_{jk} &= \partial_j A_k - \partial_k A_j = -\partial_j A^k + \partial_k A^j = \epsilon^{kjl} (\text{rot } \vec{A})^l = -\epsilon^{jkl} B^l. \end{aligned} \quad (7.1.27)$$

Dies in die Feldgleichungen eingesetzt ergibt die **inhomogenen Maxwell-Gleichungen**

$$\text{rot } \vec{B} - \frac{\partial}{\partial t} \vec{E} = \vec{j}_{\text{em}}, \quad \text{div } \vec{E} = \varrho_{\text{em}} = j_{\text{em}}^0. \quad (7.1.28)$$

Die **homogenen Maxwell-Gleichungen** sind die Integrabilitätsbedingung für ihre Herleitbarkeit aus den elektromagnetischen Potentialen $\Phi = A^0$ und \vec{A} :

$$\vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t} \vec{A} - \vec{\nabla} \Phi, \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \Leftrightarrow \vec{\nabla} \times \left(\vec{E} + \frac{\partial}{\partial t} \vec{B} \right) = 0, \quad \text{div } \vec{B} = 0. \quad (7.1.29)$$

Die Formulierung durch die vier **Maxwell-Gleichungen** (7.1.28) und (7.1.29) für die **eichinvarianten beobachtbaren Felder** \vec{E} und \vec{B} zeigt nochmals explizit die **Eichinvarianz** der Theorie.

7.2 Spinor-QED in Coulombbeichung

Wir quantisieren die QED gleich im Wechselwirkungsbild. Die Rechnungen für die freien Feldoperatoren haben wir bereits in den Abschnitten 6.4 und 6.7 durchgeführt. Wir fassen die entsprechenden Resultate aber hier nochmals übersichtlich zusammen und leiten die im folgenden benötigten **Feynman-Regeln**, also die **freien Green-Funktionen für Photonen und Dirac-Teilchen** und die **störungstheoretischen elementaren Wechselwirkungsvertizes** her.

Der freie Lagrangedichteoperator ist durch den Anteil der vollständigen Lagrangedichte (7.1.14) gegeben, welcher bilinear in den Feldern ist,

$$\mathcal{L}_0 = \frac{1}{2} \dot{\vec{A}}^2 + \frac{1}{2} \vec{A} \cdot \Delta \vec{A} + \bar{\psi} (i \not{\partial} - m) \psi. \quad (7.2.1)$$

Die kanonischen Feldimpulsoperatoren sind demnach

$$\vec{\Pi}_\gamma = \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \dot{\vec{A}}} = \dot{\vec{A}}, \quad \Pi_e = \frac{\partial \mathcal{L}_0}{\partial \dot{\psi}} = i \bar{\psi} \gamma^0 \quad (7.2.2)$$

und die freie Hamiltondichte

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2} \vec{\Pi}_\gamma^2 - \frac{1}{2} \vec{A} \cdot \Delta \vec{A} - \Pi_e \gamma^0 (\vec{\nabla} \cdot \vec{\gamma} + im) \psi. \quad (7.2.3)$$

Hierbei verzichten wir auf die Normalordnung.

Die kanonischen Antikommutatorregeln für das Diracfeld und die Kommutatorregeln für das Photonenfeld in Coulombbeichung können wir direkt (6.7.1) bzw. 6.4.22 entnehmen:

$$\begin{aligned} \{\psi_a(t, \vec{x}), \psi_b(t, \vec{y})\} &= 0, \quad \{\psi_a(t, \vec{x}), \Pi_b(t, \vec{y})\} = i \{\psi_a(t, \vec{x}), \psi_b^\dagger(t, \vec{y})\} = i \delta_{ab} \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}), \\ [\mathbf{A}^j(t, \vec{x}), \mathbf{A}^k(t, \vec{y})] &= 0, \quad [\mathbf{A}^j(t, \vec{x}), \dot{\mathbf{A}}^k(t, \vec{y})] = i \delta_{\perp}^{jk}(\vec{x} - \vec{y}). \end{aligned} \quad (7.2.4)$$

Die Modenentwicklungen der Felder lauten dann gemäß (6.7.4) und (6.4.18)

$$\psi(x) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k} \sum_{\sigma} \left[\mathbf{c}(\vec{k}, \sigma) u(\vec{k}, \sigma) u_{\vec{k},+}(x) + \mathbf{d}^{\dagger}(\vec{k}, \sigma) v(\vec{k}, \sigma) u_{\vec{k},+}^*(x) \right], \quad (7.2.5)$$

$$\vec{A}(x) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{k} \sum_{\lambda} \tilde{\epsilon}(\vec{k}, \lambda) \left[\mathbf{a}(\vec{k}, \lambda) u_{\vec{k},+}(x) + \mathbf{a}^{\dagger}(\vec{k}, \lambda) u_{\vec{k},+}^*(x) \right]. \quad (7.2.6)$$

Dabei haben wir wieder die Modenfunktionen (6.7.3) verwendet und für die Elektronen- bzw. Positronvernichtungsoperatoren $\mathbf{c}(\vec{k}, \sigma)$ und $\mathbf{d}(\vec{k}, \sigma)$ geschrieben.

Als nächstes berechnen wir die **freien Propagatoren des Dirac-Feldes und des elektromagnetischen Feldes**. Wie im nichtrelativistischen Fall treten sie bei der Anwendung des Wick-Theorems bei der störungstheoretischen Auswertung von Matrixelementen aus, wenn Operatoren aus Wechselwirkungsbeiträgen zu verschiedenen Raum-Zeit-Punkten kontrahiert werden. Diese treten aufgrund der Dyson-Wick-Entwicklung (Bornsche Reihe) gemäß 5.1.65 stets als **zeitgeordnetes Produkt** auf.

Der Elektron-Positron-Propagator

Wir berechnen zunächst den **Elektron-Positron-Propagator**

$$\begin{aligned} iG_{ab}(x-y) &= \langle \Omega | \mathcal{T}_c \psi_a(x) \bar{\psi}_b(y) | \Omega \rangle \\ &:= \Theta(x^0 - y^0) \langle \Omega | \psi_a(x) \bar{\psi}_b(y) | \Omega \rangle - \Theta(y^0 - x^0) \langle \Omega | \bar{\psi}_b(y) \psi_a(x) | \Omega \rangle, \end{aligned} \quad (7.2.7)$$

wobei das zusätzliche Vorzeichen beim zweiten Term von den Fermionenvertauschungsregeln bei der Zeitordnung herrührt. Wir berechnen zunächst die Vakuumerwartungswerte. Da der Feldoperator im hier betrachteten relativistischen Fall stets eine Summe aus Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren ist, sind beide Beiträge von Null verschieden. Es ist klar, daß zum ersten Term nur die Teilchen (Vernichtungsoperatoren $\mathbf{c}(\vec{k}, \sigma)$) und zum zweiten Term nur die Antiteilchen (Vernichtungsoperatoren $\mathbf{d}(\vec{k}, \sigma)$) beitragen. Setzen wir also die Modenentwicklung (7.2.5) ein, erhalten wir nach einer einfachen Rechnung (*Übung!*)

$$\begin{aligned} \langle \Omega | \psi_a(x) \bar{\psi}_b(y) | \Omega \rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3 2E(\vec{k})} (\not{k} + m \mathbb{1}_4)_{ab} \exp[-ik \cdot (x-y)] \Big|_{k^0=E(\vec{k})=\sqrt{\vec{k}^2+m^2}}, \\ \langle \Omega | \bar{\psi}_b(y) \psi_a(x) | \Omega \rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3 2E(\vec{k})} (\not{k} - m \mathbb{1}_4)_{ab} \exp[+ik \cdot (x-y)] \Big|_{k^0=E(\vec{k})=\sqrt{\vec{k}^2+m^2}}. \end{aligned} \quad (7.2.8)$$

Dabei haben wir die auch im folgenden noch nützlichen **Spinsummen** der Dirac-Spinoren

$$\sum_{\sigma} u(\vec{k}, \sigma) \bar{u}(\vec{k}, \sigma) = \not{k} + m, \quad \sum_{\sigma} v(\vec{k}, \sigma) \bar{v}(\vec{k}, \sigma) = \not{k} - m \quad (7.2.9)$$

verwendet, die am einfachsten mit Hilfe der expliziten Darstellung der Spinoren (6.7.7) und (6.7.8) und den Antikommutatorregeln (6.6.4) bewiesen werden (*Übung!*).

Unter Verwendung der folgenden Formeln für die Heaviside-Einheitssprungfunktion

$$\begin{aligned}\Theta(t)\exp[-iE(\vec{k})t] &= i \int_{\mathbb{R}} \frac{dk^0}{2\pi} \frac{\exp(-ik^0 t)}{k^0 - E(\vec{k}) + i0^+}, \\ \Theta(-t)\exp[+iE(\vec{k})t] &= -i \int_{\mathbb{R}} \frac{dk^0}{2\pi} \frac{\exp(-ik^0 t)}{k^0 + E(\vec{k}) - i0^+}\end{aligned}\quad (7.2.10)$$

erhalten wir

$$\begin{aligned}\Theta(x^0 - y^0) \langle \Omega | \psi_a(x) \bar{\psi}_b(y) | \Omega \rangle &= i \int_{\mathbb{R}^4} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \frac{\not{k} + m}{2E(\vec{k})} \frac{\exp[-ik \cdot (x - y)]}{k^0 - E(\vec{k}) + i0^+}, \\ -\Theta(y^0 - x^0) \langle \Omega | \bar{\psi}_b(y) \psi_a(x) | \Omega \rangle &= i \int_{\mathbb{R}^4} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \frac{E(\vec{k})\gamma^0 - \vec{k} \cdot \vec{\gamma} - m}{2E(\vec{k})} \frac{\exp[-ik^0(x^0 - y^0) - i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{y})]}{k^0 + E(\vec{k}) - i0^+} \\ &= i \int_{\mathbb{R}^4} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \frac{-k^0\gamma^0 + \vec{\gamma} \cdot \vec{k} - m}{2E(\vec{k})} \frac{\exp[-ik^0(x^0 - y^0) + i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{y})]}{k^0 + E(\vec{k}) - i0^+} \\ &= -i \int_{\mathbb{R}^4} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \frac{\not{k} + m}{2E(\vec{k})} \frac{\exp[-ik \cdot (x - y)]}{k^0 + E(\vec{k}) - i0^+}.\end{aligned}\quad (7.2.12)$$

Dabei haben wir im letzten Schritt \vec{k} durch $-\vec{k}$ substituiert. Fügen wir beide Teile gemäß (7.2.7) zum Propagator zusammen, erhalten wir nach einigen einfachen Umformungen (*Übung!*)

$$G_{ab}(x - y) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^4}{(2\pi)^4} \tilde{G}_{ab}(k) \exp[-ik \cdot (x - y)] \quad \text{mit} \quad (7.2.13)$$

$$\tilde{G}_{ab}(k) = \frac{(\not{k} + m \mathbb{1}_4)_{ab}}{k^2 - m^2 + i0^+} \quad (7.2.14)$$

Meist gibt man den Elektron-Positron-Propagator auch einfach als Spinormatrix an, ohne die Indizes explizit zu schreiben,

$$\tilde{G}(k) = \frac{\not{k} + m}{k^2 - m^2 + i0^+}. \quad (7.2.15)$$

Man rechnet unter Verwendung der Modenentwicklung (6.7.4) auch leicht nach, daß die „anormalen Propagatoren“ verschwinden:

$$\langle \Omega | \mathcal{T}_c \psi_a(x) \psi_b(y) | \Omega \rangle = \langle \Omega | \mathcal{T}_c \bar{\psi}_a(x) \bar{\psi}_b(y) | \Omega \rangle = 0. \quad (7.2.16)$$

Der Photonenpropagator

Der zeitgeordnete Photonenpropagator, den wir für die Feynmanregeln der Störungstheorie benötigen, ist durch

$$i\Delta^{\mu\nu}(x - y) = \langle \Omega | \mathcal{T}_c \mathbf{A}^\mu(x) \mathbf{A}^\nu(y) | \Omega \rangle \quad (7.2.17)$$

definiert. In der hier verwendeten Strahlungseichung ist $\mathbf{A}^0 = 0$ und folglich

$$\Delta_{\perp}^{00} = \Delta_{\perp}^{a0} = \Delta_{\perp}^{0a} = 0 \quad \text{für } a \in \{1, 2, 3\}. \quad (7.2.18)$$

Die Raum-Raum-Komponenten berechnen wir mit Hilfe der Modenentwicklung (7.2.6) in analoger Weise wie eben beim Elektron-Positron-Propagator. In der Energie-Impulsdarstellung ergibt sich (*Übung!*)

$$\Delta_{\perp}^{ab}(k) = \left(\delta^{ab} - \frac{k^a k^b}{\vec{k}^2} \right) \frac{1}{k^2 + i0^+}. \quad (7.2.19)$$

Im folgenden ist es bequemer, die Gleichungen (7.2.18) und (7.2.19) in die kovariante Schreibweise zu bringen. Dies wird durch Einführung eines zusätzlichen konstanten Vierervektors $U^{\mu} = (1, 0, 0, 0)$ ermöglicht. Der Grund dafür ist, daß wir dann die Strahlungseichbedingungen $\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathbf{A}} = 0$ und $\mathbf{A}^0 = 0$ in die äquivalente manifest kovariante Form

$$\partial_{\mu} \mathbf{A}^{\mu} = 0, \quad U_{\mu} \mathbf{A}^{\mu} = 0 \quad (7.2.20)$$

bringen können. Zunächst ist

$$-g^{\mu\nu} + U^{\mu} U^{\nu} = \begin{cases} 0 & \text{falls } \mu = 0 \text{ oder } \nu = 0, \\ \delta^{\mu\nu} & \text{falls } \mu, \nu \in \{1, 2, 3\}. \end{cases} \quad (7.2.21)$$

Außerdem gilt

$$k^{\mu} - (k \cdot U) U^{\mu} = \begin{cases} 0 & \text{falls } \mu = 0, \\ k^{\mu} & \text{falls } \mu \in \{1, 2, 3\} \end{cases} \quad (7.2.22)$$

und

$$\vec{k}^2 = (U \cdot k)^2 - k^2. \quad (7.2.23)$$

Damit ist

$$\begin{aligned} \Delta_{\perp}^{\mu\nu}(k) &= \left(-g^{\mu\nu} + U^{\mu} U^{\nu} - \frac{[k^{\mu} - (k \cdot U) U^{\mu}][k^{\nu} - (k \cdot U) U^{\nu}]}{(U \cdot k)^2 - k^2} \right) \frac{1}{k^2 + i0^+} \\ &= -\frac{1}{k^2 + i0^+} \left[g^{\mu\nu} + \frac{k^2 U^{\mu} U^{\nu} - (k \cdot U)(k^{\mu} U^{\nu} + k^{\nu} U^{\mu}) + k^{\mu} k^{\nu}}{(k \cdot U)^2 - k^2} \right]. \end{aligned} \quad (7.2.24)$$

Dabei haben wir das Symbol \perp als Index an den Propagator geschrieben, um zu betonen, daß es sich um einen sowohl im Sinne der Vierer- als auch der Dreierimpulsvektoren um einen transversalen Propagator handelt, denn offenbar gilt

$$k_{\mu} \Delta_{\perp}^{\mu\nu}(k) = U_{\mu} \Delta_{\perp}^{\mu\nu}(k) = 0. \quad (7.2.25)$$

Um die Feynman-Regeln für die Störungstheorie herzuleiten, benötigen wir zunächst den Wechselwirkungsanteil des Hamilton-Operators. Dieser ist einfach durch $\mathcal{H}_{\text{int}} = -\mathcal{L}_{\text{int}}$ gegeben, wobei für A_0 die Lösung (7.1.20) der Bewegungsgleichung für diese Feldkomponente einzusetzen ist, d.h.

$$\mathbf{H}_{\text{int}} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} \left[-q \vec{\mathbf{A}}(x) \cdot \vec{\mathbf{j}}(x) \right] + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{x}' \frac{q^2}{4\pi |\vec{x} - \vec{x}'|} \mathbf{j}^0(t, \vec{x}) \mathbf{j}^0(t, \vec{x}') \quad (7.2.26)$$

mit dem Viererstromoperator des Dirac-Feldes

$$\mathbf{j}^{\mu}(x) = \bar{\Psi}(x) \gamma^{\mu} \Psi(x). \quad (7.2.27)$$

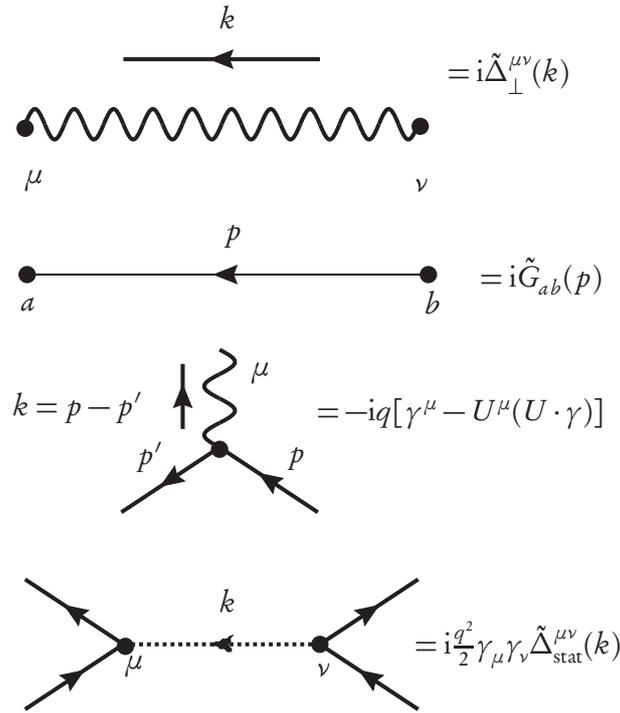


Abbildung 7.1: Die Feynmanregeln der QED für die inneren Linien (Propagatoren) und Vertizes in kanonischer Quantisierung in Coulombbeichung.

Für das Folgende ist es bequem, den zweiten Term mit Hilfe des Propagators für ein statisches Coulomb-Feld

$$\Delta_{\text{stat}}^{\mu\nu}(x - x') = \delta(x^0 - x'^0) \frac{U^\mu U^\nu}{4\pi|\vec{x} - \vec{x}'|} = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \underbrace{\frac{U^\mu U^\nu}{(k \cdot U)^2 - k^2}}_{\tilde{\Delta}_{\text{coul}}^{\mu\nu}(k)} \exp[-ik \cdot (x - x')] \quad (7.2.28)$$

in die Form

$$\mathbf{H}_{\text{int}} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \left[-q\vec{\mathbf{A}}(x) \cdot \vec{\mathbf{j}}(x) \right] + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x' q^2 \Delta_{\text{stat}}^{\mu\nu} \mathbf{j}_\mu(x) \mathbf{j}_\nu(x') \quad (7.2.29)$$

zu bringen.

Die Herleitung der Feynman-Regeln erfolgt wörtlich wie in Abschnitt 5.1.5. Wir können sie sogleich am **Wechselwirkungs-Hamilton-Operator** (7.2.26) ablesen. Wir stellen sogleich die Diagrammregeln für die inneren Linien (Propagatoren) und Vertizes in Abb. 7.1 zusammen.

Diese Feynmanregeln sind nun nicht nur unbequem sondern auch unintuitiv, denn außer Wechselwirkungen von geladenen Dirac-Teilchen (hier Elektronen und/oder Positronen), die aus zwei Dreiervertizes und einer sie verbindenden den transversalen Propagator $\tilde{\Delta}_\perp^{\mu\nu}$ repräsentierenden inneren Linie entstehen, gibt es auch Beiträge von gleichartigen Diagrammen (oder Unterdiagrammen in einem größeren Gesamtdiagramm) in der letzten Zeile von (Abb. 7.1), die einen statischen Coulomb-Propagator beinhalten, der einer instantanen Fernwirkung wie in der nichtrelativistischen Physik entspricht. Andererseits ist allerdings ein solcher Anteil auch im transversalen Propagator (7.2.24) enthalten, allerdings mit umgekehrtem Vorzeichen. Für jeden Diagrammanteil mit vier äußeren Elektron-Positron-Linien

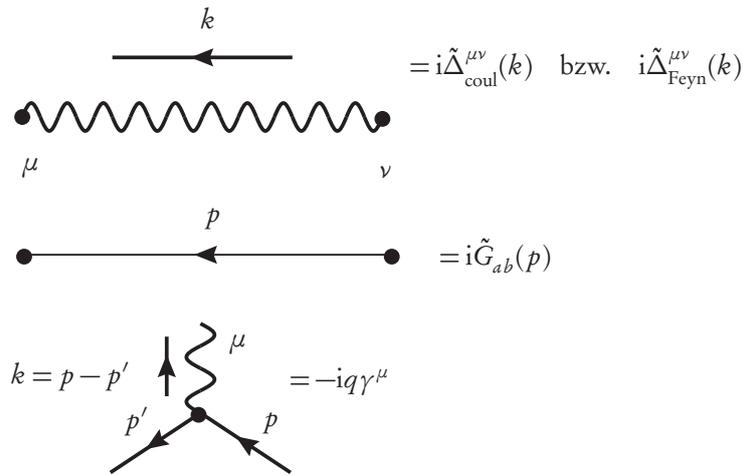


Abbildung 7.2: Die endgültigen Feynmanregeln der QED für die inneren Linien (Propagatoren) und Vertices in Coulomb- bzw. Feynman-Eichung.

haben wir also auch ein Diagramm mit zwei Dreiervertizes, die durch einen transversalen Propagator verbunden sind. Da der transversale Propagator insbesondere auch transversal zu U^μ ist, können wir für die Dreiervertizes einfach

$$= -iq\gamma^\mu \quad (7.2.30)$$

setzen. Außerdem können wir auch das Diagramm mit vier Elektron-Positronlinien aus zweien solcher Vertices und durch einen statischen Coulombpropagator zusammengesetzt denken. Daß dabei auch die kombinatorischen Faktoren beim Zusammensetzen eines Diagramms mit gegebener Topologie korrekt werden, wird durch den Faktor $1/2$ in der Diagrammregel für den Vierervertex sichergestellt.

Insgesamt können wir uns also den Dreiervertex gemäß (7.2.30) interpretiert denken und die Vierervertizes, die einen statischen Propagator enthalten, einfach dadurch berücksichtigt denken, daß wir die Photonlinie durch den Propagator

$$\tilde{\Delta}_{\text{coul}}^{\mu\nu}(k) = \tilde{\Delta}_{\perp}^{\mu\nu}(k) + \tilde{\Delta}_{\text{stat}}^{\mu\nu}(k) = -\frac{1}{k^2 + i0^+} \left[g^{\mu\nu} - \frac{(k \cdot U)(k^\mu U^\nu + k^\nu U^\mu) - k^\mu k^\nu}{(k \cdot U)^2 - k^2} \right] \quad (7.2.31)$$

ersetzen. All diese Überlegungen gelten auch, wenn äußere Elektronen- bzw. Positronenlinien involviert sind, da sich stets der transversale und der statische Photonpropagator addieren, wenn Vierervertice in den involvierten Diagrammen vorkommen, die durch diese Propagatoren verbunden sind. Für äußere Photonlinien gelten diese Regeln sowieso, da für jeden Photonimpuls \vec{k} die Polarisationsvektoren definitionsgemäß $\epsilon_\alpha^\mu(\vec{k})U_\mu = \epsilon_\alpha^0(\vec{k}) = 0$ erfüllen und daher auch in diesem Fall der ursprüngliche Dreiervertex durch (7.2.30) ersetzt werden darf. Insgesamt gelangen wir zu den **Feynmanregeln in Coulomb-Eichung** gemäß Fig. 7.2.

Daß wir beim Photonpropagator den Term in der zweiten Klammer ebenfalls weglassen dürfen, macht man sich am einfachsten in der Formulierung der Feynman-Regeln im Raum-Zeit-Bereich klar.

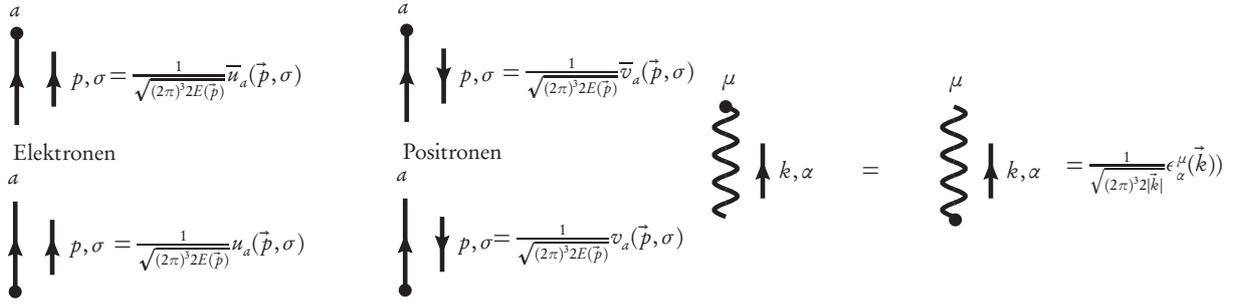


Abbildung 7.3: Die Feynman-Regeln der QED für die äußeren Linien.

Definieren wir nämlich

$$\Delta(x) = \int_{\mathbb{R}^4} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \frac{1}{k^2 + i0^+} \exp(-ik \cdot x), \quad (7.2.32)$$

$$\Delta_2(x) = \int_{\mathbb{R}^4} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \frac{1}{(k^2 + i0^+)[(k \cdot U)^2 - k^2]} \exp(-ik \cdot x),$$

so können wir den Photonpropagator (7.2.31) im Raum-Zeit-Bereich in der Form

$$\Delta_{\text{coul}}^{\mu\nu}(x) = -g^{\mu\nu} \Delta(x) + [U^\rho \partial_\rho (\partial^\mu U^\nu + \partial^\nu U^\mu) - \partial^\mu \partial^\nu] \Delta_2(x) \quad (7.2.33)$$

schreiben.

Der Propagator taucht immer als Kontraktion von Photonfeldoperatoren im Zusammenhang mit **erhaltenen Strömen** auf, also in Ausdrücken der Form

$$\int_{\mathbb{R}^4} d^4 x \int_{\mathbb{R}^4} d^4 y \mathbf{j}_\mu(x) \Delta_{\text{coul}}^{\mu\nu}(x-y) \mathbf{j}_\nu(y).$$

Die Ableitungsoperatoren ∂^μ und ∂^ν können wir als Ableitungen nach Komponenten von x bzw. von y schreiben und dann durch partielle Integration auf die Ströme überwälzen. Dann ergeben sich Viererdivergenzen von erhaltenen Strömen, d.h.

$$\partial_\mu \mathbf{j}^\mu = 0. \quad (7.2.34)$$

Die Terme vom zweiten Beitrag zum Propagator verschwinden also aufgrund der Stromerhaltung identisch, und daher können wir den entsprechenden Beitrag auch in der Impulsraumform (7.2.31) weglassen. Wir dürfen also in den Feynmanregeln in Abb. 7.2 statt des Photonpropagators in Coulomb-Eichung den **Photonpropagator in Feynman-Eichung**

$$\tilde{\Delta}_{\text{Feyn}}^{\mu\nu}(k) = -\frac{g^{\mu\nu}}{k^2 + i0^+} \quad (7.2.35)$$

verwenden.

Die äußeren Linien (s. Fig. 7.3) repräsentieren, analog wie in der nichtrelativistischen Theorie, die asymptotisch freien Elektronen, Positronen bzw. Photonen im Anfangs- oder Endzustand eines Streuprozesses. Die geraden äußeren Linien repräsentieren Elektronen (für die die Pfeile auf der Linie und der Impuls in die gleiche Richtung weisen) bzw. Positronen (für die die Pfeile auf der Linie und der Impuls in die entgegengesetzte Richtung weisen) und die Wellenlinien Photonen. Die entsprechenden analytischen Ausdrücke ergeben sich aus den Normierungsfaktoren der in (6.7.3) gegebenen Modenfunktionen der Einteilchenzustände zu gegebenem Impuls und gegebener Spineinstellung bzw. Polarisationsrichtung.

7.3 Der invariante Streuquerschnitt

Die Definition des Streuquerschnittes erfolgt genau wie im nichtrelativistischen Fall. Allerdings müssen wir in der relativistischen Theorie diese Definition im Hinblick auf die Festlegung auf das **Laborsystem** präzisieren. Wir definieren also zunächst den Streuquerschnitt für einen Prozeß, bei dem zwei Teilchen im Anfangszustand (z.B. zwei Elektronen, zwei Positronen, ein Elektron und ein Positron oder ein Elektron (bzw. Positron) und ein Photon) miteinander stoßen, wobei jetzt aber im Endzustand beliebig viele Teilchen produziert werden können, solange die fundamentalen Erhaltungssätze von Energie, Impuls, Drehimpuls und elektrischer Ladung erfüllt sind. Freilich gibt es auch immer noch die **elastische Streuung**¹ und den entsprechenden **elastischen Wirkungsquerschnitt**, aber auch **inelastische Prozesse** (wie z.B. **Bremsstrahlung** $e^+ + e^- \rightarrow e^+ + e^- + \gamma$ oder **Paarvernichtung** $e^+ + e^- \rightarrow \gamma + \gamma$)². Das T -Matrixelement wird über das S -Matrix-Element wie im nichtrelativistischen Fall zu

$$S_{fi} = \delta_{fi} + iT_{fi} \quad (7.3.1)$$

definiert. Für die Matrixelemente \mathcal{M}_{fi} wählt man nun eine vom nichtrelativistischen Fall etwas abweichende Konvention. Jedes asymptotisch freie Teilchen im Anfangs- oder Endzustand liefert gemäß den Feynmanregeln (Abb. 7.3) für die entsprechenden äußeren Linien stets einen Faktor $1/\sqrt{(2\pi)^3 E(\vec{p})}$ (mit $E(\vec{p}) = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2}$ bei Elektronen und Positronen bzw. $1/\sqrt{(2\pi)^3 |\vec{k}|}$ bei Photonen). Es ist üblich, außer dem Faktor $(2\pi)^4 \delta^{(4)}(P_f - P_i)$ auch noch diese Faktoren auszusondern und nur den Restfaktor als \mathcal{M}_{fi} zu bezeichnen. Betrachten wir also einen Prozeß mit zwei Teilchen mit Viererimpulsen p_1 und p_2 im Anfangs- und n Teilchen mit Viererimpulsen p'_j ($j \in \{1, \dots, n\}$) im Endzustand, definieren wir

$$T_{fi} = (2\pi)^4 \delta^{(4)}\left(p_1 + p_2 - \sum_{j=1}^n p'_j\right) \mathcal{M}_{fi} \times \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3 2E(\vec{p}_1)}} \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3 2E(\vec{p}_2)}} \prod_{j=1}^n \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3 2E(\vec{p}'_j)}}. \quad (7.3.2)$$

Die Matrixelemente \mathcal{M}_{fi} sind dann **manifest kovariante skalare Funktionen der beteiligten Viererimpulse**. Deshalb spricht man auch genauer von **invarianten Matrixelementen**.

Der **invariante Streuquerschnitt** ist dann im **Laborsystem** genau wie im nichtrelativistischen Fall durch die Übergangswahrscheinlichkeitsdichte dividiert durch den Fluß der auf das ruhende Target, d.h. Teilchen mit dem Viererimpuls $p_2 = (m, 0, 0, 0)$, zulaufenden Teilchen mit Viererimpuls $p_1 = (E(\vec{p}), \vec{p})$ und die Dichte des ruhenden Teilchens definiert.

Wir benötigen also zunächst die Dichte für die Teilchen. Für Elektronen oder Positronen erhalten wir sie z.B. über deren Ladungsdichte, also die Zeitkomponente des erhaltenen Stromes (6.6.50), wobei wir in der quantisierten Theorie die Normalordnung zu berücksichtigen haben. Mit Hilfe der Modenentwicklung (7.2.5) ergibt dies unter Verwendung des Wickschen Theorems für Elektronen bzw.

¹genannt Møller-Streuung für $e^- + e^- \rightarrow e^- + e^-$ bzw. $e^+ + e^+ \rightarrow e^+ + e^+$, Bhabba-Streuung für $e^- + e^+ \rightarrow e^- + e^+$ und Compton-Streuung für $e^- + \gamma \rightarrow e^- + \gamma$ bzw. $e^+ + \gamma \rightarrow e^+ + \gamma$

²Es ist eine gute *Übung* sich zu überlegen, warum es aufgrund der Energie-Impulserhaltung den Prozeß $e^+ + e^- \rightarrow \gamma$ nicht geben kann! Dabei ist zu beachten, daß die Viererimpulse asymptotisch freier Teilchen stets „on shell“ sind, d.h. es gilt $p^2 = m^2$ für Elektronen und Positronen bzw. $k^2 = 0$ für Photonen im Anfangs- bzw. Endzustand.

Positronen

$$\begin{aligned}\varrho_{e^-} &= \left\langle \Omega \left| \mathbf{c}(\vec{p}, \sigma) : \bar{\psi}(x) \gamma^0 \psi(x) : \mathbf{c}^\dagger(\vec{p}, \sigma) \right| \Omega \right\rangle = \frac{1}{(2\pi)^3}, \\ \varrho_{e^+} &= \left\langle \Omega \left| \mathbf{d}(\vec{p}, \sigma) : \bar{\psi}(x) \gamma^0 \psi(x) : \mathbf{d}^\dagger(\vec{p}, \sigma) \right| \Omega \right\rangle = -\frac{1}{(2\pi)^3}.\end{aligned}\quad (7.3.3)$$

Dabei ergibt sich das Vorzeichen bei den Positronen aus der Vorzeichenregel beim Normalordnen für Fermionen. Für Photonen haben wir keinen teilchenzahlartigen erhaltenen Strom, so daß wir die Energiedichte verwenden, wobei wir wieder normalordnen müssen, um die unendliche Vakuumenergiedichte abzuziehen,

$$\epsilon_\gamma = \left\langle \Omega \left| \mathbf{a}(\vec{k}, \alpha) \frac{1}{2} : [\vec{\mathbf{A}}^2(x) + [\vec{\nabla} \times \vec{\mathbf{A}}(x)]^2] : \mathbf{a}^\dagger(\vec{k}, \alpha) \right| \Omega \right\rangle = \frac{|\vec{k}|}{(2\pi)^3}.\quad (7.3.4)$$

Da ein Photon mit Impuls \vec{k} die Energie $|\vec{k}|$ besitzt, ist also die Dichte für ein Photon ebenfalls

$$\varrho_\gamma = \frac{1}{(2\pi)^3}.\quad (7.3.5)$$

Es zeigt sich also, daß bei unserer Normierungskonvention alle Einteilchenzustände einer einheitlichen Dichte von $|\varrho| = 1/(2\pi)^3$ entsprechen.

Der Fluß im Laborsystem ist also durch

$$J = |\varrho| v_{\text{rel}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{|\vec{p}_1|}{E(\vec{p}_1)}.\quad (7.3.6)$$

definiert. Nun können wir aber die Relativgeschwindigkeit v_{rel} , die stets als die Geschwindigkeit eines der einlaufenden Teilchen, gemessen im Ruhssystem des anderen Teilchens *definiert* ist, in die kovariante Form

$$v_{\text{rel}} = \frac{|\vec{p}_1|}{E(\vec{p}_1)} = \frac{\sqrt{(p_1 \cdot p_2 / m_2)^2 - m_1^2}}{E_1} = \frac{\sqrt{(p_1 \cdot p_2)^2 - (m_1 m_2)^2}}{E_1 m_2}\quad (7.3.7)$$

bringen, wobei wir benutzt haben, daß $p_2 = (m_2, 0, 0, 0)$ ist und damit

$$J|\varrho_2| = \frac{1}{(2\pi)^6} \frac{\sqrt{(p_1 \cdot p_2 / m_2)^2 - m_1^2}}{E_1} = \frac{1}{(2\pi)^6} \frac{\sqrt{(p_1 \cdot p_2)^2 - (m_1 m_2)^2}}{E_1 m_2} =: \frac{I}{(2\pi)^6 E_1 m_2}.\quad (7.3.8)$$

Mit (7.3.3) erhalten wir also für den differentiellen Streuquerschnitt

$$\begin{aligned}d\sigma &= \frac{1}{J|\varrho_2|} (2\pi)^4 \delta^{(4)} \left(p_1 + p_2 - \sum_{j=1}^n p'_j \right) |T_{fi}|^2 \prod_{j=1}^n d^3 \vec{p}'_j \\ &= (2\pi)^4 \delta^{(4)} \left(p_1 + p_2 - \sum_{j=1}^n p'_j \right) \frac{|\mathcal{M}_{fi}|^2}{4\sqrt{(p_1 \cdot p_2)^2 - (m_1 m_2)^2}} \prod_{j=1}^n \frac{d^3 \vec{p}'_j}{(2\pi)^3 2E(\vec{p}'_j)}.\end{aligned}\quad (7.3.9)$$

Wir bemerken zunächst, daß der so definierte **Wirkungsquerschnitt invariant unter Lorentz-Transformationen** ist, denn die δ -Distribution, die Matrixelemente \mathcal{M}_{fi} und der invariante Strom im Nenner sind Lorentz-Skalare. Es bleibt nur noch zu zeigen, daß auch die Impulsraumvolumenintegrale

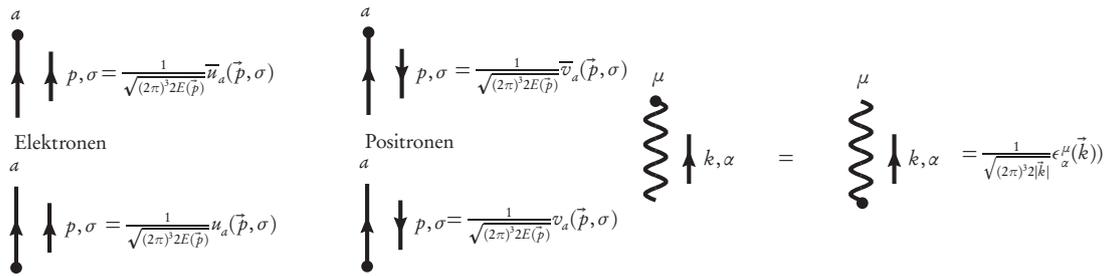


Abbildung 7.4: Die Feynman-Regeln der QED für die äußeren Linien bei der Berechnung der invarianten Matrixelemente \mathcal{M}_{fi} .

invariant sind. Dies sieht man aber sofort an der folgenden manifest kovarianten Schreibweise,

$$\frac{d^3 \vec{p}'_1}{2E(\vec{p}'_1)} = \int_{\mathbb{R}} d^4 p'_1 \Theta(p'_1^0) \delta(p_1'^2 - m_1^2). \quad (7.3.10)$$

Da $d^4 p_1^0 d^3 \vec{p}'_1 = d^4 p_1$ invariant ist, und im Integranden nur Invarianten stehen, ist also in der Tat das Integralmaß auf der linken Seite dieser Gleichung ebenfalls eine Lorentz-Invariante. Insgesamt ist also der differentielle Streuquerschnitt (7.3.9) in der Tat ein **invarianter Wirkungsquerschnitt**.

Bei der Berechnung des **totalen Wirkungsquerschnitts** muß man die Impulsintegrale ausführen und ggf. die Mehrfachzählung von Zuständen im Falle, daß identische Teilchen im Endzustand auftreten, berücksichtigen, d.h. ist eine Teilchenspezies k im betrachteten Endzustand n_k -mal vorhanden, ist der totale Streuquerschnitt durch $(n_k!)$ zu dividieren.

Die **invarianten Matrixelemente** \mathcal{M}_{fi} können nun mit den folgenden Feynmanregeln berechnet werden: Der Beitrag der Bornschen Reihe (im relativistischen Kontext auch als **Dyson-Wick-Reihe** bezeichnet³) der n -ten Ordnung zum Matrixelement $i\mathcal{M}_{fi}$ ergibt sich wie im nichtrelativistischen Fall wie folgt:

1. Man zeichne alle topologisch verschiedenen Diagramme mit äußeren Beinen entsprechend dem betrachteten Anfangs- und Endzustand des Streuprozesses, die n Vertizes beinhalten. Alle Diagramme erhalten einen Faktor $1/n!$ (der aus der Exponentialreihe der Born-Entwicklung stammt). Jedes Diagramm erhält einen kombinatorischen Faktor, der zählt, auf wie viele Arten die Kontraktionen ausgeführt werden können, um das Diagramm der vorgegebenen Topologie zu erhalten.
2. An jedem $ee\gamma$ -Vertex gilt Energie- und Impulserhaltung. Ebenso gilt Energie- und Impulserhaltung für den gesamten Prozeß, also die Viererimpulserhaltung für das Gesamtdiagramm. Über al-

³Bemerkenswerterweise hat Feynman diese Regeln ohne Rückgriff auf die formale Quantenfeldtheorie aus intuitiven Überlegungen hergeleitet und dabei seine Diagrammtechnik entwickelt. Gleichzeitig hatte Schwinger mit sehr formalen Betrachtungen die Störungstheorie ausgearbeitet. Beide haben auf einer berühmten Konferenz auf Shelter Island (New York) ihre Resultate vorgetragen und waren sehr erstaunt, daß sie auf völlig verschiedenem Wege zu den gleichen Resultaten gelangten. Dyson hat dann über die quantenfeldtheoretische Betrachtungsweise, die der hier präsentierten Darstellung sehr ähnlich war, die Erklärung nachgeliefert. Wick hat dann in diesem Zusammenhang zu der Entwicklung der invarianten Störungstheorie durch sein bereits oben bei der nichtrelativistischen Theorie besprochenen Theorems zur Berechnung von Vakuum Erwartungswerten von Feldoperatoren beigetragen. Für eine umfassende Darstellung der historischen Entwicklung sei auf [Sch94], das auch die parallele Entwicklung in Japan (Tomonaga) und die Schweizer Beiträge (Belinfante, Pauli et al.) gebührend würdigt, verwiesen.

le nicht durch diese Erhaltungssätze festgelegten Viererimpulse ist zu integrieren mit $\int_{\mathbb{R}^4} d^4k/(2\pi)^4$. Jeder Schleife im Diagramm entspricht ein solches Viererimpulsintegral⁴.

3. Zwei Diagramme, die sich nur durch Vertauschung zweier äußerer Fermionenlinien unterscheiden, haben ein relativ zueinander verschiedenes Vorzeichen. Jede geschlossene Schleife in einem Diagramm, die aus einem zusammenhängenden Zug von Fermionenpropagatorlinien besteht, ergibt ebenfalls ein zusätzliches Vorzeichen.
4. Die inneren Linien und der $ee\gamma$ -Vertex besitzen die in Abb. 7.2 angegebene analytische Bedeutung. Bei den äußeren Linien sind in den Ausdrücken von Abb. 7.3 die Faktoren $1/\sqrt{(2\pi)^3 2E(\vec{p})}$ wegzulassen (vgl. Abb. 7.4).

7.4 Beispiele für QED-Wirkungsquerschnitte

In diesem Abschnitt wollen wir die einfachsten Beispiele für die störungstheoretische Berechnung von Wirkungsquerschnitten in der QED behandeln. Dabei beschränken wir uns auf Diagramme ohne Schleifen, die sogenannte **Baumgraphennäherung**. Zunächst betrachten wir die Kinematik für **Zweiteilchenstreuprozesse**, d.h. Kollisionen zweier Teilchen mit zwei Teilchen im Endzustand.

7.4.1 Kinematik für Zweiteilchenstreuprozesse

Im folgenden wollen wir Zweiteilchenstreuprozesse der allgemeinen Art $1 + 2 \rightarrow 1' + 2'$ betrachten. Daher leiten wir zunächst den Ausdruck für den **invarianten differentiellen Streuquerschnitt im Schwerpunktsystem** und die dabei benötigten kinematischen Beziehungen zwischen den Energien und Impulsen her. Ausgangspunkt ist Gl. (7.3.9). Die Viererimpulse schreiben wir in der Form

$$p_1 = \begin{pmatrix} E_1 \\ \vec{p} \end{pmatrix}, \quad p_2 = \begin{pmatrix} E_2 \\ -\vec{p} \end{pmatrix}, \quad p'_1 = \begin{pmatrix} E'_1 \\ \vec{p}' \end{pmatrix}, \quad p'_2 = \begin{pmatrix} E'_2 \\ -\vec{p}' \end{pmatrix}. \quad (7.4.1)$$

Dabei sind die Energien stets die On-Shell-Energien der Teilchen, also $E_1 = \sqrt{m_1^2 + P^2}$ mit $P = |\vec{p}|$ usw. Die Gesamtschwerpunktenergie ist durch die Mandelstamvariable

$$s = (p_1 + p_2)^2 = (E_1 + E_2)^2 = (p'_1 + p'_2)^2 = (E'_1 + E'_2)^2 \quad (7.4.2)$$

gegeben. Eine etwas längere Rechnung (*Übung*) zeigt, daß der im Nenner von (7.3.9) auftretende invariante Strom durch

$$I := \sqrt{(p_1 \cdot p_2)^2 - (m_1 m_2)^2} = \sqrt{s} P \quad (7.4.3)$$

gegeben ist.

Die vierdimensionale δ -Distribution integrieren wir aus, indem wir über $d^3\vec{p}'_2$ den räumlichen Anteil ausintegrieren, was keinerlei neue Faktoren erzeugt. Den zeitlichen Anteil der δ -Distribution integrieren wir aus, indem wir noch das Integral über $|\vec{p}'_1| = P'$ ausführen. Dazu bemerken wir, daß

$$P' dP' = E'_1 dE'_1 = E'_2 dE'_2 \quad (7.4.4)$$

⁴In den vielen Fällen sind diese bei der Auswertung dieser Schleifen enthaltenden Diagramme der Störungstheorie auftretenden Integrale divergent. Allerdings lassen sich diese Divergenzen systematisch und physikalisch sinnvoll beseitigen. Dies ist Gegenstand der Renormierungstheorie und kann in dieser Vorlesung nicht behandelt werden (vgl. die bereits zitierten Lehrbücher der Quantenfeldtheorie und [Hee02]).

ist, wobei wir $E'_1 = \sqrt{m_1'^2 + P'^2}$ und $E'_2 = \sqrt{m_2'^2 + P'^2}$ berücksichtigt haben. Daraus erhalten wir

$$d(E'_1 + E'_2) = \frac{P'(E'_1 + E'_2)}{E'_1 E'_2} dP' \quad (7.4.5)$$

und damit

$$P'^2 dP' = \frac{P' E'_1 E'_2}{E'_1 + E'_2} d(E'_1 + E'_2). \quad (7.4.6)$$

Damit ist die δ -Distribution in (7.3.9) sofort ausintegriert, und unter Berücksichtigung von (7.4.3) ergibt sich schließlich

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{64\pi^2 s} \frac{P'}{P} \left| \mathcal{M}_{fi} \right|^2. \quad (7.4.7)$$

Dabei ist das Raumwinkelement durch

$$d\Omega = d\vartheta d\varphi \sin\vartheta \quad (7.4.8)$$

gegeben. Die Kugelkoordinaten ϑ und φ des Schwerpunktsimpulses im Endzustand \vec{p}' beziehen sich dabei auf die durch die Richtung des Schwerpunktsimpulses im Anfangszustand \vec{p} bestimmte Polarachse.

Das über die Spins in Ausgangs- und Endzuständen summierte **invariante Matricelementquadrat** ist ein Lorentz-Skalar und kann daher nur von den drei **Mandelstam-Variablen**

$$s = (p_1 + p_2)^2 = (p'_1 + p'_2)^2, \quad (7.4.9)$$

$$t = (p_1 - p'_1)^2 = (p_2 - p'_2)^2, \quad (7.4.10)$$

$$u = (p_1 - p'_2)^2 = (p_2 - p'_1)^2 \quad (7.4.11)$$

abhängen. Wegen der On-Shell-Bedingungen für die Viererimpulse sind diese drei Variablen allerdings nicht voneinander unabhängig, sondern es gilt die Beziehung (*Übung*)

$$s + t + u = m_1^2 + m_2^2 + m_1'^2 + m_2'^2. \quad (7.4.12)$$

Betrachten wir nun noch den Zusammenhang zwischen den Mandelstam-Variablen und den kinematischen Parametern im Schwerpunktsystem. Dies sind die Beträge der Schwerpunktsimpulse P und P' im Eingangs- bzw. Ausgangskanal und der Streuwinkel, der durch $\vec{p} \cdot \vec{p}' = PP' \cos\vartheta$ definiert ist. Mit (7.4.1) finden wir zunächst

$$s = (E_1 + E_2)^2 = (E'_1 + E'_2)^2. \quad (7.4.13)$$

Setzen wir darin die Energie-Impulsbeziehungen ein, finden wir nach einiger Rechnung den Zusammenhang zwischen s und den Schwerpunktsimpulsen bzw. -energien

$$E_1 = \frac{s + m_1^2 - m_2^2}{2\sqrt{s}}, \quad E_2 = \frac{s + m_2^2 - m_1^2}{2\sqrt{s}}, \quad (7.4.14)$$

$$E'_1 = \frac{s + m_1'^2 - m_2'^2}{2\sqrt{s}}, \quad E'_2 = \frac{s + m_2'^2 - m_1'^2}{2\sqrt{s}}, \quad (7.4.15)$$

$$P = \frac{\sqrt{[s - (m_1 + m_2)^2][s - (m_1 - m_2)^2]}}{2\sqrt{s}} \quad (7.4.16)$$

$$P' = \frac{\sqrt{[s - (m_1' + m_2')^2][s - (m_1' - m_2')^2]}}{2\sqrt{s}} \quad (7.4.17)$$

Daraus ergibt sich auch der physikalische Wertebereich für s zu

$$s \geq \max[(m_1 + m_2)^2, (m'_1 + m'_2)^2]. \quad (7.4.18)$$

Der Streuwinkel ist mit t verknüpft durch (Übung!)

$$t = (p_1 - p'_1)^2 = (E_1 - E'_1)^2 - (\vec{p} - \vec{p}')^2 = t_0 - 4PP' \sin^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right). \quad (7.4.19)$$

Daraus ergibt sich der größte bzw. kleinste Wert für t für $\vartheta = 0$ bzw. $\vartheta = \pi$ zu⁵

$$\begin{aligned} t_0 &= (E_1 - E'_1)^2 - (P - P')^2 = \left[\frac{(m_1^2 - m_2^2) - (m_1'^2 - m_2'^2)}{2\sqrt{s}} \right]^2 - (P - P')^2, \\ t_1 &= (E_1 - E'_1)^2 - (P + P')^2 = \left[\frac{(m_1^2 - m_2^2) - (m_1'^2 - m_2'^2)}{2\sqrt{s}} \right]^2 - (P + P')^2. \end{aligned} \quad (7.4.20)$$

Also ist t bei vorgegebener Schwerpunktsenergie $E = \sqrt{s}$ eine monotone Funktion des Streuwinkels ϑ , so daß man t als invariantes Maß für den Streuwinkel im Schwerpunktsystem auffassen kann.

7.4.2 $e^+ + e^- \rightarrow \mu^+ + \mu^-$

Einer der am einfachsten zu berechnenden Prozesse ist die Paarvernichtung von einem Elektron mit einem Positron zu einem $\mu^+ - \mu^-$ -Paar. Dabei betrachten wir nicht zu hohe Energien, so daß wir die schwache Wechselwirkung vernachlässigen können und nur den dominanten rein elektromagnetischen Übergang zu betrachten brauchen. Dazu müssen wir nur wissen, daß sich die **Muonen** im Hinblick auf die elektromagnetische Wechselwirkung exakt genauso verhalten wie Elektronen und Positronen. Der einzige Unterschied ist die Masse ($m_e = 0.511$ MeV, $m_\mu = 105.7$ MeV).

Wir beginnen mit der Berechnung des **invarianten Matrixelements**, indem wir das Diagramm entsprechend den Feynmanregeln in Abb. 7.2 und 7.4 auswerten. Das Diagramm in Abb. 7.5 ist von oben nach unten und entgegen den Pfeilrichtungen der äußeren Fermionenlinien zu lesen. Dann müssen wir uns nicht um Dirac-Indizes kümmern, denn es ergibt sich gleich der richtige Ausdruck im Sinne der Matrix-Vektor-Schreibweise. Es ist klar, daß wir jetzt bei den Dirac-Spinoramplituden zwischen Elektronen/Positronen bzw. Muonen unterscheiden müssen. Dann ergibt sich

$$i\mathcal{M}_{fi} = -iq\bar{u}(\mu, \vec{p}'_1, \sigma'_1)\gamma^\mu v(\mu, \vec{p}'_2, \sigma'_2) \frac{-ig_{\mu\nu}}{(p_1 + p_2)^2 + i0^+} (-iq)\bar{v}(e, \vec{p}_2, \sigma_2)\gamma^\nu u(e, \vec{p}_1, \sigma_1). \quad (7.4.21)$$

Dabei ergibt sich der Symmetriefaktor daraus, daß wir einen Vorgang in zweiter Ordnung der Störungstheorie betrachten (Faktor $1/2! = 1/2$). Beim Quadrieren des Wechselwirkungs-Hamilton-Operators entsteht ein zusätzlicher Faktor 2 aus der binomischen Formel. Die Kontraktionen lassen sich nur auf eine Weise bilden, da μ und e verschiedene Teilchen sind und an den Vertizes nur jeweils eine dieser Teilchensorten auftreten kann⁶. Fassen wir (7.4.21) ein wenig zusammen, erhalten wir

$$\mathcal{M}_{fi} = e^2\bar{u}(\mu, \vec{p}'_1, \sigma'_1)\gamma^\mu v(\mu, \vec{p}'_2, \sigma'_2)\bar{v}(e, \vec{p}_2, \sigma_2)\gamma^\nu u(e, \vec{p}_1, \sigma_1) \frac{g_{\mu\nu}}{s}, \quad (7.4.22)$$

⁵Wir folgen hier der Bezeichnungsweise in [N⁺10].

⁶Man mache sich klar, daß ein Wechselwirkungsterm $\mathcal{L}_I = q'\bar{\psi}_e A\psi_\mu$, der zwar von der Spinor- und Lorentzstruktur her Sinn ergibt, aufgrund der von der Eichinvarianz notwendigen **Stromerhaltung** widerspricht, denn es ergäbe sich ein Beitrag zum Strom $q'\bar{\psi}_e\gamma^\mu\psi_\mu$.

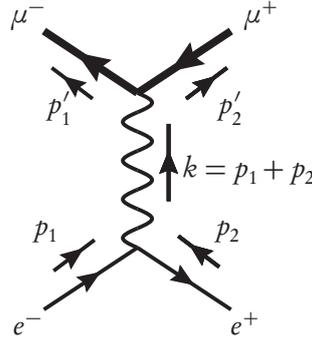


Abbildung 7.5: Diagramm in niedrigster Ordnung der Störungstheorie zur Berechnung des invarianten Matrixelements für die Paarannihilationsreaktion $e^+ + e^- \rightarrow \mu^+ + \mu^-$.

wobei wir $q = -e$ verwendet haben. Dabei haben wir die Mandelstamvariable

$$s = (p_1 + p_2)^2 = (p'_1 + p'_2)^2 \quad (7.4.23)$$

eingefügt. Den $i0^+$ -Term können wir dabei vernachlässigen, weil aufgrund der Kinematik $s \geq 4m_\mu^2$ sein muß. Das ist sofort physikalisch klar, weil s das Quadrat der Gesamtenergie im Schwerpunkt sein muß. Im günstigsten Falle wird das $\mu^+ \mu^-$ -Paar in Ruhe erzeugt, so daß man eine Gesamtenergie von $2m_\mu$ aufbringen muß. Freilich kann man diese Bedingung auch formal aus der Viererimpulserhaltung und den on-shell-Bedingungen $p_1'^2 = p_2'^2 = m_\mu^2$ nachrechnen. In der Tat ist im Schwerpunktsystem $\vec{p}'_1 = -\vec{p}'_2 = -\vec{p}'$, und damit wird

$$s = [2E_\mu(\vec{p}')]^2 = 4(m_\mu^2 + \vec{p}'^2) \geq 4m_\mu^2. \quad (7.4.24)$$

Wir interessieren uns nun für den Streuquerschnitt für ein unpolarisiertes Paar von Elektronen und Positronen im Eingangskanal und interessieren uns auch nicht für die Polarisation der Muonen im Endkanal, d.h. wir müssen das Matrixelement quadrieren und dann über die Spins im Eingangskanal mitteln und über die Spins im Endkanal summieren. Wir erhalten dann das spingemittelte Matrixelement

$$\overline{|\mathcal{M}_{fi}|^2} = \frac{1}{4} \sum_{\text{Spins}} |\mathcal{M}_{fi}|^2. \quad (7.4.25)$$

Dabei haben wir über die Spins von Elektron und Positron im Anfangszustand gemittelt (Faktor 1/4) und über diejenigen im Endzustand summiert. Weiter bemerken wir noch, daß wegen

$$(\gamma^\mu)^\dagger = \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0, \quad \bar{u} = u^\dagger \gamma_0 \quad (7.4.26)$$

für das Bilden des Konjugiert komplexen

$$[\bar{u} \gamma^\mu v]^* = v^\dagger (\gamma^\mu)^\dagger \bar{u}^\dagger = \bar{v} \gamma^0 (\gamma^\mu)^\dagger \gamma^0 u \quad (7.4.27)$$

gilt. Verwenden wir dann für die Spinsummen (7.2.9), erhalten wir

$$\overline{|\mathcal{M}_{fi}|^2} = \frac{e^4 g_{\mu\nu} g_{\mu'\nu'}}{s^2} \text{tr}[(\not{p}'_1 + M)\gamma^\mu(\not{p}'_2 - M)\gamma^{\mu'}] \text{tr}[(\not{p}_1 + m)\gamma^\nu(\not{p}_2 - m)\gamma^{\nu'}]. \quad (7.4.28)$$

Die Dirac-Spuren lassen sich ohne Probleme mit den Formeln in Anhang C.1 (oder auch mit Hilfe von Computeralgebrasystemen, z.B. unter Verwendung des Tracer-Pakets in Mathematica) auswerten. Das Resultat ist

$$\overline{|\mathcal{M}_{fi}|^2} = 8e^4 \frac{(p_1 \cdot p_2')(p_1' \cdot p_2) + (p_1 \cdot p_1')(p_2 p_2') + M^2(p_1 \cdot p_2) + m^2(p_1' \cdot p_2') + 2m^2 M^2}{s^2}. \quad (7.4.29)$$

Eliminieren wir die Viererimpulsprodukte zugunsten der Mandelstamvariablen

$$\begin{aligned} s &= (p_1 + p_2)^2 = 2m^2 + 2p_1 \cdot p_2 = 2M^2 + 2p_1' \cdot p_2', \\ t &= (p_1 - p_1')^2 = m^2 + M^2 - 2p_1 \cdot p_1' = m^2 + M^2 - 2p_2 \cdot p_2', \\ u &= (p_1 - p_2')^2 = m^2 + M^2 - 2p_1 \cdot p_2' = m^2 + M^2 - 2p_2 \cdot p_1' \end{aligned} \quad (7.4.30)$$

unter Verwendung der Beziehung

$$u = 2(m^2 + M^2) - s - t, \quad (7.4.31)$$

erhalten wir schließlich

$$\overline{|\mathcal{M}_{fi}|^2} = \frac{2e^4}{s^2} \{s^2 + 2[(m^2 + M^2)^2 + (s - 2m^2 - 2M^2)t + t^2]\} \underset{m, M \rightarrow 0}{\cong} \frac{2e^4}{s^2} (s^2 + 2st + 2t^2). \quad (7.4.32)$$

Dabei haben wir im letzten Schritt den ultrarelativistischen Limes $s \geq M^2, m^2$ betrachtet. Wir rechnen im folgenden der Übersichtlichkeit halber in diesem Limes weiter. Führen wir den Streuwinkel ϑ im Schwerpunktsystem ein, ergibt sich

$$t = -2P_1 P_1' (1 - \cos \vartheta) = -\frac{s}{2} (1 - \cos \vartheta), \quad (7.4.33)$$

wo $P_1 = |\vec{p}_1|$ usw. bedeuten sollen. Daraus folgt für das Matrixelement

$$\overline{|\mathcal{M}_{fi}|^2} = e^4 (1 + \cos^2 \vartheta) = 16\pi^2 \alpha^2 (1 + \cos^2 \vartheta). \quad (7.4.34)$$

Für den invarianten Streuquerschnitt liefert (7.4.7 mit $\alpha = e^2/(4\pi)$) das wohlbekanntes Resultat

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha^2}{4s} (1 + \cos^2 \vartheta). \quad (7.4.35)$$

Die Winkelabhängigkeit ist charakteristisch für Spin-1/2-Teilchen. Der totale Streuquerschnitt ergibt sich durch Integration (mit $x = \cos \vartheta$) zu

$$\sigma(s) = 2\pi \int_{-1}^1 dx \frac{\alpha^2}{4s} (1 + x^2) = \frac{4\pi\alpha^2}{3s}. \quad (7.4.36)$$

Die Resultate (7.4.35) und (7.4.36) stimmen gut mit Messungen der JADE-Kollaboration am DESY [B⁺85] überein (s. auch [PS95]). In diesem Paper werden die Abweichungen der Winkelverteilungen vom Resultat (7.4.35) aufgrund der schwachen Wechselwirkung untersucht, und es werden QED-Korrekturen der nächsthöheren Ordnung $\mathcal{O}(\alpha^3)$ berücksichtigt.

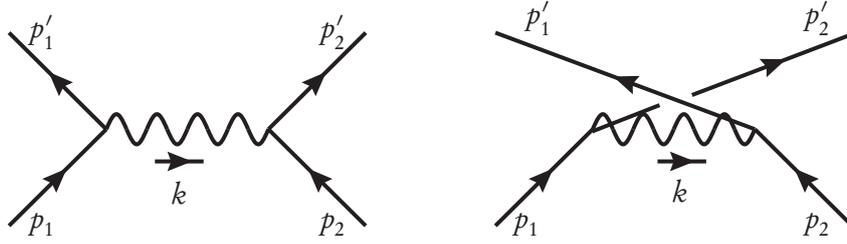


Abbildung 7.6: Die Diagramme zur Møllerstreuung in führender Ordnung gemäß „moderner“ Feynmanregeln.

7.4.3 Møller-Streuung

Als weiteres Beispiel betrachten wir nun die elastische Elektronenstreuung (Møller-Streuung) [Mø132]. In führender Ordnung mit den kovarianten Feynmanregeln gemäß Abb. 7.2 und 7.4 haben wir in führender Ordnung die beiden in Abb. 7.6 gezeigten Diagramme zu berücksichtigen. Unter Beachtung der Vorzeichenregel für das Austauschdiagramm erhalten wir

$$\begin{aligned} \frac{i}{e^2} \mathcal{M}_{fi} &= \frac{i}{t} \bar{u}(p'_1, \sigma'_1) \gamma^\mu u(p_1, \sigma_1) \bar{u}(p'_2, \sigma'_2) \gamma_\mu u(p_2, \sigma_2) \\ &\quad - \frac{i}{u} \bar{u}(p'_2, \sigma'_2) \gamma^\mu u(p_1, \sigma_1) \bar{u}(p'_1, \sigma'_1) \gamma_\mu u(p_2, \sigma_2). \end{aligned} \quad (7.4.37)$$

Dabei haben wir wieder die Mandelstamvariablen

$$t = (p'_1 - p_1)^2 = (p'_2 - p_2)^2, \quad u = (p'_1 - p_2)^2 = (p'_2 - p_1)^2 \quad (7.4.38)$$

eingeführt.

Zur Bildung der Spinsummen der betragsquadrierten Amplitude können wir wieder die üblichen Regeln gemäß Abschnitt C.1 für Diracmatrizen und die Spinsummenregeln (7.2.9) verwenden. Wir geben sogleich wieder das über die Spins im Anfangszustand (Endzustand) gemittelte (summierte) Resultat an,

$$\begin{aligned} \frac{1}{e^4} \overline{|\mathcal{M}_{fi}|^2} &= \frac{1}{4t^2} \text{tr}[(\not{p}'_1 + m) \gamma^\mu (\not{p}_1 + m) \gamma^\nu] \text{tr}[(\not{p}'_2 + m) \gamma_\mu (\not{p}_2 + m) \gamma_\nu] \\ &\quad - \frac{1}{4tu} \text{tr}[(\not{p}'_1 + m) \gamma^\mu (\not{p}_1 + m) \gamma^\nu (\not{p}'_2 + m) \gamma_\mu (\not{p}_2 + m) \gamma_\nu] \\ &\quad + \frac{1}{4u^2} \text{tr}[(\not{p}'_2 + m) \gamma^\mu (\not{p}_1 + m) \gamma^\nu] \text{tr}[(\not{p}'_1 + m) \gamma_\mu (\not{p}_2 + m) \gamma_\nu] \\ &\quad - \frac{1}{4tu} \text{tr}[(\not{p}'_2 + m) \gamma^\mu (\not{p}_1 + m) \gamma^\nu (\not{p}'_1 + m) \gamma_\mu (\not{p}_2 + m) \gamma_\nu]. \end{aligned} \quad (7.4.39)$$

Die Dirac-Spuren sind wieder schnell mit Hilfe des Computeralgebrapaketes Tracer berechnet, und aus (7.4.7) ergibt sich der differentielle Streuquerschnitt zu

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha^2}{s t^2 u^2} \left[(t^2 + tu + u^2)^2 - 4m^2(t^3 + u^3) + 4m^4(t^2 - tu + u^2) \right]. \quad (7.4.40)$$

Wir bemerken, daß dieser Ausdruck symmetrisch bzgl. Vertauschen der Mandelstam-Variablen t und u ist, was die **Ununterscheidbarkeit** der Elektronen im Anfangs- und Endzustand widerspiegelt.

Die kinematischen Beziehungen (7.4.14-7.4.20) vereinfachen sich wegen $m_1 = m_2 = m'_1 = m'_2 = m$ zu

$$s = 4E^2, \quad t = -4P^2 \sin^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right), \quad u = -4P^2 \cos^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right). \quad (7.4.41)$$

Der differentielle Streuquerschnitt im Schwerpunktsystem ergibt sich daraus mit der allgemeinen Formel (7.4.7) zu

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{|\overline{\mathcal{M}}_{fi}|^2}{256\pi^2 E^2} = \frac{\alpha^2}{4E^2} \frac{(2E^2 - m^2)^2}{(E^2 - m^2)^2} \left[\frac{4}{\sin^4 \vartheta} - \frac{3}{\sin^2 \vartheta} + \frac{(E^2 - m^2)^2}{(2E^2 - m^2)^2} \left(\frac{4}{\sin^2 \vartheta} + 1 \right) \right]. \quad (7.4.42)$$

Betrachten wir noch den ultrarelativistischen und den nichtrelativistischen Limes $E \gg m$ bzw. $P^2 = E^2 - m^2 \ll m^2$. Das ergibt

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega}_{E \gg m} &\cong \frac{\alpha^2}{E^2} \left(\frac{4}{\sin^4 \vartheta} - \frac{2}{\sin^2 \vartheta} + \frac{1}{4} \right), \\ \frac{d\sigma}{d\Omega}_{P \ll m} &\cong \frac{\alpha^2 m^2}{4P^4} \left(\frac{4}{\sin^4 \vartheta} - \frac{3}{\sin^2 \vartheta} + \mathcal{O}(P^2/m^2) \right). \end{aligned} \quad (7.4.43)$$

Der nichtrelativistische Limes stimmt mit unserem Ergebnis aus der nichtrelativistischen Streutheorie (5.1.98) überein, wie man nach einiger Rechnung mit den Winkelfunktionen zeigt und bedenkt, daß in der nichtrelativistischen Formel $E_{\text{cm}} = P^2/(2m)$ bedeutet.

Wir sehen, daß dieser Ausdruck für $P \rightarrow 0$ sowie für alle Schwerpunktsenergien für $\vartheta \rightarrow 0, \pi$ divergiert. Ebenso divergiert der totale Streuquerschnitt. Dies rührt daher, daß die Photonen masselos sind, denn es ist gemäß (7.4.19) und (7.4.12)

$$t = -2P^2(1 - \cos \vartheta), \quad u = -P^2(1 + \cos \vartheta), \quad (7.4.44)$$

und dies sind gerade die im Nenner des Photonpropagators auftretenden kinematischen Größen. Diese **Infrarotdivergenzen** lassen sich beseitigen, indem man die endliche Energieauflösung des Detektors berücksichtigt und bedenkt, daß aufgrund ihrer Masselosigkeit beliebig viele sehr weiche Photonen emittiert werden können, deren Gesamtenergie kleiner als die Energieauflösung des Detektors ist. Summiert man all diese Beiträge auf, erhält man ein endliches von der Energieauflösung des Detektors abhängiges Resultat für den totalen Streuquerschnitt [BN37, Wei95, PS95]. Von dem divergenten kinematischen Bereich für $\vartheta \rightarrow 0, \pi$ abgesehen, stimmt die **Møllersche Formel** (7.4.42) hervorragend mit dem gemessenen differentiellen Streuquerschnitt überein.

7.4.4 Bhabha-Streuung

Unter **Bhabba-Streuung** versteht man die elastische Elektron-Positronstreuung, also den Prozeß $e^+ + e^- \rightarrow e^+ + e^-$. Die beiden Diagramme besitzen wieder ein relatives Vorzeichen, weil das zweite Diagramm aus dem ersten durch Vertauschen der einlaufenden Elektronenlinie mit der auslaufenden Positronenlinie hervorgeht, also zwei Fermionenerzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren vertauscht werden. Wir haben also

$$i\mathcal{M}_1 = i \frac{e^2}{t} \bar{u}_1 \gamma^\mu u_1 \bar{v}_2 \gamma_\mu v_2, \quad i\mathcal{M}_2 = -i \frac{e^2}{s} \bar{u}_1 \gamma^\mu v_2 \bar{v}_2 \gamma_\mu u_1. \quad (7.4.45)$$

Dabei haben wir zur Abkürzung $u_1 = u(\vec{p}_1, \sigma_1)$ usw. geschrieben. Das Betragsquadrat ist demnach

$$|\mathcal{M}_f|^2 = |\mathcal{M}_1|^2 + |\mathcal{M}_2|^2 + \mathcal{M}_1^* \mathcal{M}_2 + \mathcal{M}_1 \mathcal{M}_2^*. \quad (7.4.46)$$

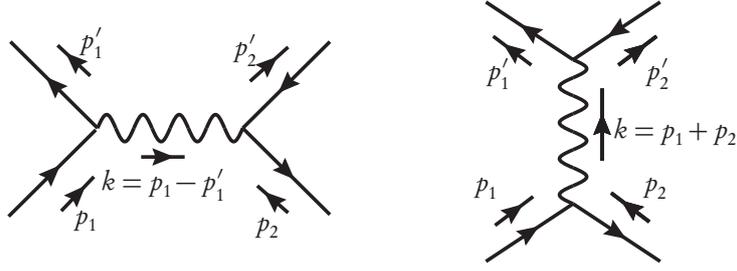


Abbildung 7.7: Diagramm in niedrigster Ordnung der Störungstheorie zur Berechnung des invarianten Matrixelements für die Bhabba-Streuung $e^+ + e^- \rightarrow e^+ + e^-$.

Bilden wir nun die Spinsummen, um den Streuquerschnitt für unpolarisierte Teilchen zu erhalten, finden wir wie bei der Møller-Streuung

$$\begin{aligned}
 \sum_{\text{spins}} |\mathcal{M}_1|^2 &= \frac{e^4}{t^2} \text{tr}[(\not{p}'_1 + m)\gamma^\mu(\not{p}_1 + m)\gamma^\nu] \text{tr}[(\not{p}_2 - m)\gamma_\mu(\not{p}'_2 - m)\gamma_\nu] \\
 &= \frac{8e^4}{t^2} [8m^4 + s^2 + u^2 - 4m^2(s - t + u)], \\
 \sum_{\text{spins}} |\mathcal{M}_2|^2 &= \frac{e^4}{s^2} \text{tr}[(\not{p}'_1 + m)\gamma^\mu(\not{p}'_2 - m)\gamma^\nu] \text{tr}[(\not{p}_2 - m)\gamma_\mu(\not{p}_1 + m)\gamma_\nu] \\
 &= \frac{8e^4}{s^2} [8m^4 + t^2 + u^2 + 4m^2(s - t - u)], \\
 \sum_{\text{spins}} \mathcal{M}_1 \mathcal{M}_2^* &= \frac{e^4}{st} \text{tr}[(\not{p}'_1 + m)\gamma^\mu(\not{p}_1 + m)\gamma^\nu(\not{p}_2 - m)\gamma_\mu(\not{p}'_2 - m)\gamma_\nu] \\
 &= \frac{8e^4}{st} [12m^4 - 8m^2u + u^2] \\
 &= \mathcal{M}_1^* \mathcal{M}_2.
 \end{aligned} \tag{7.4.47}$$

Der Wirkungsquerschnitt ist damit gemäß (7.4.7) durch

$$\begin{aligned}
 \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{1}{64\pi^2 s} \overline{|\mathcal{M}_{fi}^2|} = \frac{\alpha^2}{2s} \left\{ \frac{1}{t^2} [(s - 2m^2)^2 + (u - 2m^2)^2 + 4m^2 t] \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{s^2} [(t - 2m^2)^2 + (u - 2m^2)^2 + 4m^2 s] \right. \\
 &\quad \left. + \frac{2}{st} [(u - 2m^2)^2 - 4m^2(u - 2m^2)] \right\}
 \end{aligned} \tag{7.4.48}$$

gegeben. Unter Verwendung der allgemeinen kinematischen Beziehungen (7.4.41), die freilich auch hier gelten, folgt

$$\begin{aligned}
 \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{\alpha^2}{16E^2} \left[\frac{(E^2 + P^2)^2}{P^4 \sin^4(\vartheta/2)} - \frac{8E^4 - m^4}{P^2 E^2 \sin^2(\vartheta/2)} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{12E^4 + m^4}{E^4} - \frac{4P^2(E^2 + P^2)}{E^4} \sin^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right) + \frac{4P^4}{E^4} \sin^4\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \right].
 \end{aligned} \tag{7.4.49}$$

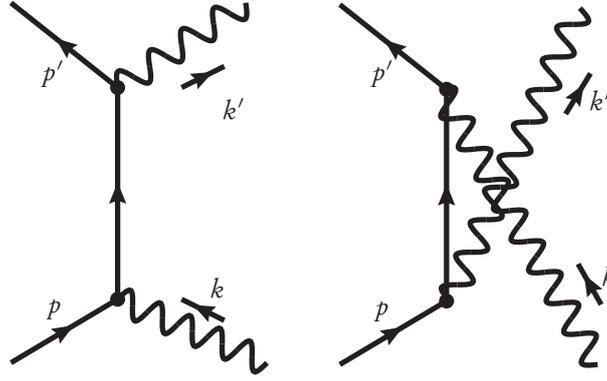


Abbildung 7.8: Diagramm in niedrigster Ordnung der Störungstheorie zur Berechnung des invarianten Matrixelements für die Compton-Streuung $e^- + \gamma \rightarrow e^- + \gamma$.

Im nichtrelativistischen Limes erhalten wir den **Rutherford'schen Streuquerschnitt** für die Coulomb-Streuung zweier (*unterscheidbarer!*) Teilchen,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \underset{P \ll m}{\cong} \frac{\alpha^2 m^2}{16P^4 \sin^4(\vartheta/2)} \quad (7.4.50)$$

und im ultrarelativistischen Limes

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \underset{P \gg m}{\cong} = \frac{\alpha^2}{P^2} \cos^4\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \left(\frac{4}{\sin^4 \vartheta} - \frac{2}{\sin^2 \vartheta} + \frac{1}{4} \right) = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Mott}} \cos^4\left(\frac{\vartheta}{2}\right). \quad (7.4.51)$$

7.4.5 Compton-Streuung

Schließlich berechnen wir den Streuquerschnitt für die **Compton-Streuung**, also die elastische Streuung eines Elektrons mit einem Photon $e^- + \gamma \rightarrow e^- + \gamma$. In niedrigster Ordnung ist das invariante Matrixelement durch die beiden Diagramme in Abb. 7.8 gegeben.

Das rechte Diagramm unterscheidet sich dabei vom linken lediglich durch die Vertauschung der äußeren Photonlinien. Da Photonen Bosonen sind, gehen also beide Diagramme mit demselben Vorzeichen in das Matrixelement ein. Mit Hilfe der Feynman-Regeln lesen wir das Matrixelement unmittelbar ab zu

$$\mathcal{M}_{fi} = -e^2 \bar{u}(p', \sigma') \gamma^\mu \frac{\not{p} + \not{k} + m}{(p+k)^2 - m^2} \gamma^\nu u(p, \sigma) e_{\mu, \alpha}(\vec{k}') e_{\nu, \alpha}(\vec{k}) + \{(\vec{k}, \alpha) \leftrightarrow (\vec{k}', \alpha')\}. \quad (7.4.52)$$

Zur Berechnung des **unpolarisierten Streuquerschnitts** gehen wir wieder wie in den vorigen Beispielen vor. Zusätzlich zu den Spinsummen für die Elektronenanfangs- und Endzustände benötigen wir nur noch die Summe über die Polarisationszustände für die Photonen. Wegen der Stromerhaltung dürfen wir gemäß (C.2.6) dafür einfach

$$\sum_{\alpha} e_{\mu, \alpha}(\vec{k}) e_{\nu, \alpha}(\vec{k}) \rightarrow -g_{\mu\nu} \quad (7.4.53)$$

setzen.

Weiter definieren wir die Mandelstam-Variablen zu

$$s = (p+k)^2, \quad t = (p-p')^2, \quad u = (p-k')^2. \quad (7.4.54)$$

Führen wir dann das Betragsquadrat von (7.4.52) aus und mitteln über den Elektronenspin und Photonpolarisationen im Anfangszustand und summieren über diese Größen für die Teilchen im Endzustand, erhalten wir die Spur

$$\begin{aligned} \overline{|\mathcal{M}_{fi}|^2} = \frac{e^4}{4} \operatorname{tr} \left\{ (\not{p} + m) \left[\frac{\gamma^\nu (\not{p} + \not{k} + m) \gamma^\mu}{s - m^2} + \frac{\gamma^\mu (\not{p} - \not{k}' + m) \gamma^\nu}{u - m^2} \right] \right. \\ \left. \times (\not{p}' + m) \left[\frac{\gamma_\mu (\not{p} + \not{k} + m) \gamma_\nu}{s - m^2} + \frac{\gamma_\nu (\not{p} - \not{k}' + m) \gamma_\mu}{u - m^2} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (7.4.55)$$

Auch diese Spur lässt sich wieder leicht mit Hilfe von Tracer berechnen. Als Funktion von s und u ergibt sich mit $e^2 = 4\pi\alpha$

$$\begin{aligned} \overline{|\mathcal{M}_{fi}|^2} = \frac{32\alpha^2}{(s - m^2)^2(u - m^2)^2} [6m^8 - m^4(3s^2 + 14su + 3u^2) \\ + m^2(s + u)(s^2 + 6su + u^2) - su(u^2 + s^2)]. \end{aligned} \quad (7.4.56)$$

Üblicherweise gibt man den Streuquerschnitt für die Comptonstreuung im **Laborsystem** an, in dem das Elektron vor dem Stoß ruht. Der Zusammenhang zwischen den Mandelstamvariablen und den Viererimpulsen von Elektron und Photon vor dem Stoß, $p = (m, 0)^t$, $k = (\omega = |\vec{k}|, \vec{k})$ bzw. nach dem Stoß $p' = (E' = \sqrt{m^2 + \vec{p}'^2}, \vec{p}')$, $k' = (\omega' = |\vec{k}'|, \vec{k}')$ ist

$$s = (p + k)^2 = m^2 + 2m\omega, \quad u = (p - k')^2 = m^2 - 2m\omega'. \quad (7.4.57)$$

Aus der Viererimpulserhaltung folgt weiter $p' = p + (k - k')$. Durch Quadrieren erhalten wir daraus nach einfachen Umformungen

$$m \left(\frac{1}{\omega'} - \frac{1}{\omega} \right) = 1 - \cos \vartheta, \quad (7.4.58)$$

wobei ϑ den Winkel zwischen dem Impuls des einlaufenden und dem des auslaufenden Photons bezeichnet.

Die allgemeine Formel (7.4.7) für den differentiellen Streuquerschnitt ist allerdings im **Schwerpunktssystem** gegeben. Für den hier betrachteten Fall für den spin- und polarisationsgemittelten Streuquerschnitt hängt das quadrierte Matrixelement offenbar nicht vom Winkel φ ab, und wir erhalten den differentiellen Streuquerschnitt im Laborsystem am einfachsten, indem wir zunächst

$$d\Omega_{\text{cm}} = 2\pi d\vartheta_{\text{cm}} \sin \vartheta_{\text{cm}}$$

über die Mandelstamvariable t ausdrücken. Aus (7.4.19) folgt wegen $P_{\text{cm}} = \omega_{\text{cm}} = \omega'_{\text{cm}}$

$$dt = -2\omega_{\text{cm}}^2 d\vartheta_{\text{cm}} \sin \vartheta_{\text{cm}} \Rightarrow d\Omega_{\text{cm}} = -\frac{\pi}{\omega_{\text{cm}}^2} dt. \quad (7.4.59)$$

Nun ist aber wegen (7.4.16)

$$\omega_{\text{cm}} = \frac{s - m^2}{2\sqrt{s}} = \frac{m\omega}{\sqrt{s}}. \quad (7.4.60)$$

Im Laborsystem gilt

$$t = (k - k')^2 = -2k \cdot k' = -2\omega\omega'(1 - \cos \vartheta), \quad (7.4.61)$$

und unter Zuhilfenahme von (7.4.58) findet man nach einfacher Rechnung (*Übung*)

$$dt = -2\omega'^2 d\vartheta \sin \vartheta = -\frac{d\Omega}{\pi} \omega'^2. \quad (7.4.62)$$

Mit (7.4.59) folgt schließlich

$$d\Omega_{\text{cm}} = \left(\frac{\omega'}{\omega_{\text{cm}}} \right)^2 d\Omega, \quad (7.4.63)$$

und (7.4.7) liefert dann unter Zuhilfenahme von (7.4.60) den differentiellen Streuquerschnitt im **Labor-system**

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = \frac{1}{64m^2} \left(\frac{\omega'}{\omega} \right)^2 \overline{|\mathcal{M}_{fi}|^2}. \quad (7.4.64)$$

Setzen wir schließlich (7.4.57) in (7.4.56) ein, erhalten wir nach einigen Umformungen unter Verwendung von (7.4.58) den **Klein-Nishina-Streuquerschnitt** für die Compton-Streuung [KN29]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha^2}{2m^2} \left(\frac{\omega'}{\omega} \right)^2 \left(\frac{\omega}{\omega'} + \frac{\omega'}{\omega} - \sin^2 \vartheta \right). \quad (7.4.65)$$

In diesem Fall können wir auch den **totalen Streuquerschnitt** berechnen. Dazu drücken wir ω' vermöge (7.4.58) durch den Streuwinkel ϑ aus und integrieren (7.4.65) über $\vartheta \in [0, \pi]$ und multiplizieren mit 2π für die φ -Integration. Nach längeren Umformungen ergibt sich dann

$$\sigma = \frac{2\pi\alpha}{m^2 x} \left[\left(1 - \frac{4}{x} - \frac{8}{x^2} \right) \ln(1+x) + \frac{1}{2} + \frac{8}{x} - \frac{1}{2(1+x)^2} \right] \quad (7.4.66)$$

mit

$$x = \frac{s - m^2}{m^2} = \frac{2\omega}{m}. \quad (7.4.67)$$

Im nichtrelativistischen Limes $\omega \ll m$, also $x \ll 1$, ergibt eine Reihenentwicklung von (7.4.66)

$$\sigma = \frac{8\pi\alpha^2}{3m^2} (1-x). \quad (7.4.68)$$

Der erste Term in der Klammer entspricht dem **Thomson-Wirkungsquerschnitt** für die klassische Streuung von elektromagnetischer Strahlung an einer Punktladung der Ladung $\pm e$.

Im relativistischen Limes, d.h. $x \gg 1$, ergibt die Entwicklung von (7.4.66)

$$\sigma = \frac{\pi\alpha}{m^2 x} (1 + \ln x). \quad (7.4.69)$$

Anhang A

Gaußintegrale

Die Gaußsche Wahrscheinlichkeitsverteilung spielt sowohl in der mathematischen Statistik als auch der Physik eine wichtige Rolle. Daher werden häufig Integrale über Gaußverteilungen benötigt. In diesem Anhang leiten wir einige der wichtigsten damit zusammenhängenden Formeln her.

A.1 Das eindimensionale Gaußintegral

Wir beginnen mit der Berechnung des Integrals

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-x^2). \quad (\text{A.1.1})$$

Es läßt sich mit folgendem Trick geschlossen auswerten. Dazu schreiben wir

$$I^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-x^2) \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp(-y^2) = \int_{\mathbb{R}^2} d^2x \exp(-\vec{x}^2). \quad (\text{A.1.2})$$

Substituieren wir darin Polarkoordinaten $\vec{x} = r(\cos \varphi, \sin \varphi)$, $d^2x = r dr d\varphi$, erhalten wir

$$I^2 = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} dr r \exp(-r^2) = -2\pi \frac{1}{2} \exp(-r^2) \Big|_{r=0}^{\infty} = \pi. \quad (\text{A.1.3})$$

Da $I > 0$, folgt also

$$I = \sqrt{\pi}. \quad (\text{A.1.4})$$

Dieses Resultat können wir nun verwenden, um auch das allgemeinere Integral

$$I(a, b) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-ax^2 + bx), \quad a, b \in \mathbb{C} \quad (\text{A.1.5})$$

zu berechnen. Damit das Integral konvergiert, muß offenbar $\text{Re } a > 0$ sein. Mit einer quadratischen Ergänzung folgt zunächst

$$I(a, b) = \exp\left(\frac{b^2}{4a}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[-a \left(x - \frac{b}{2a}\right)^2\right]. \quad (\text{A.1.6})$$

Durch die Substitution $y = \sqrt{a}[x - b/(2a)]$ finden wir unter Verwendung von (A.1.4)

$$I(a, b) = \exp\left(\frac{b^2}{4a}\right) \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp(-y^2) = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left(\frac{b^2}{4a}\right). \quad (\text{A.1.7})$$

Die Gaußverteilung schreibt man am bequemsten in der Form

$$P(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right) \quad \text{mit } \sigma > 0, \quad x_0 \in \mathbb{R}. \quad (\text{A.1.8})$$

Mit (A.1.7) erhält man nach einigen einfachen Umformungen, daß diese Funktion normiert ist, d.h.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx P(x) = 1. \quad (\text{A.1.9})$$

Den Erwartungswert der Verteilung erhält man aus

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx (x-x_0)P(x) = \langle x \rangle - x_0 = 0 \Rightarrow \langle x \rangle = x_0. \quad (\text{A.1.10})$$

Um die **Standardabweichung** zu berechnen, gehen wir von der erzeugenden Funktion

$$F(z) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp[-z(x-x_0)^2] = I(z, 0) = \sqrt{\frac{\pi}{z}} \quad (\text{A.1.11})$$

aus. Durch Ableiten nach z folgt

$$F'(z) = - \int_{-\infty}^{\infty} dx (x-x_0)^2 \exp[-z(x-x_0)^2] = -\frac{1}{2z} \sqrt{\frac{\pi}{z}}. \quad (\text{A.1.12})$$

Daraus ergibt sich

$$\Delta x^2 = \langle (x-x_0)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx (x-x_0)^2 P(x) = \sigma^2. \quad (\text{A.1.13})$$

Die Gaußverteilung (A.1.8) beschreibt also eine Zufallsgröße x mit Mittelwert x_0 und Standardabweichung $\Delta x = \sigma$.

A.2 Mehrdimensionale Gaußintegrale

Mehrdimensionale Gaußintegrale können leicht auf den eben behandelten eindimensionalen Fall zurückgeführt werden. Sei dazu $\hat{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ eine selbstadjungierte Matrix ($\hat{A}^\dagger = \hat{A}$), für die die Bilinearform $\vec{x}^t \hat{A} \vec{x}$ positiv definit ist. Dann fragen wir nach dem Integral

$$I(\hat{A}) = \int_{\mathbb{R}^n} d^n x \exp(-\vec{x}^t \hat{A} \vec{x}). \quad (\text{A.2.1})$$

Aufgrund des Satzes von der **Hauptachsentransformation** können wir stets eine unitäre Matrix \hat{U} mit Determinante 1 finden (also $U \in \text{SU}(n)$), sodaß

$$\hat{A}' = \hat{U} \hat{A} \hat{U}^\dagger = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n). \quad (\text{A.2.2})$$

A.2 · Mehrdimensionale Gaußintegrale

Wegen der oben vorausgesetzten Selbstdjungiertheit und positiven Definitheit von \hat{A} sind die Eigenwerte positiv reell ($\lambda_k > 0$). Substituieren wir nun

$$\vec{y} = \hat{U}\vec{x}, \quad d^n y = \det \hat{U} d^n x, \quad (\text{A.2.3})$$

erhalten wir

$$I(\hat{A}) = \int_{\mathbb{R}^n} d^n y \exp\left(-\sum_{k=1}^n \lambda_k x_k^2\right). \quad (\text{A.2.4})$$

Dabei haben wir verwendet, daß man für jedes y_k den Integrationsweg in der komplexen Ebene beliebig deformieren können, weil die Exponentialfunktion überall analytisch ist. Mit (A.2.4) ist aber das mehrdimensionale Gaußintegral auf das Produkt von einzelnen Gaußintegralen zurückgeführt. Verwenden wir (A.1.6) mit $b = 0$, erhalten wir also

$$I(\hat{A}) = \sqrt{\frac{\pi^n}{\prod_{k=1}^n \lambda_k}} \quad (\text{A.2.5})$$

Nun ist aber

$$\prod_{k=1}^n \lambda_k = \det \hat{A}' = \det \hat{A}, \quad (\text{A.2.6})$$

d.h. wir erhalten das Resultat

$$I(\hat{A}) = \sqrt{\frac{\pi^n}{\det \hat{A}}}. \quad (\text{A.2.7})$$

Anhang B

Einige Integrale mit Bose- und Fermiverteilungen

In diesem Abschnitt wollen wir einige häufig gebrauchte Integrale im Zusammenhang mit Bose- und Fermiverteilungen berechnen sowie Formeln für die Summation über fermionische und bosonische Matsubara-Frequenzen des Imaginärzeitformalismus der thermischen Feldtheorie bereitstellen.

B.1 Integrale zum idealen Gas

Wir beginnen mit der Berechnung des für die Behandlung des idealen Fermigas benötigten Integrals (4.5.56).

Wir betrachten dazu allgemeiner das fermionische Integral

$$I_F(n) = \int_0^\infty dx x^n \frac{\exp x}{(1 + \exp x)^2}. \quad (\text{B.1.1})$$

Wir führen es zunächst in eine Reihe über, indem wir den Bruch mit $\exp(-2x)$ erweitern

$$I_F(n) = \int_0^\infty dx x^n \frac{\exp(-x)}{[1 + \exp(-x)]^2}. \quad (\text{B.1.2})$$

Um dies in eine Reihe zu entwickeln, betrachten wir zunächst die geometrische Reihe

$$g(q) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k q^k = \frac{1}{q+1}. \quad (\text{B.1.3})$$

Durch Differentiation ergibt sich daraus

$$g'(q) = -\frac{1}{(1+q)^2} = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k k q^{k-1} = -\sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (k+1) q^k. \quad (\text{B.1.4})$$

Verwenden wir diese Formel in (B.1.2) mit $q = \exp(-x)$, erhalten wir

$$I_F(n) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (k+1) \int_0^\infty x^n \exp[-(k+1)x]. \quad (\text{B.1.5})$$

Das Integral unter der Summe läßt sich bequem mit Hilfe der erzeugenden Funktion

$$G(z) = \int_0^\infty dx \exp(-xz) = \frac{1}{z} \quad (\text{B.1.6})$$

berechnen. Es folgt durch Ableiten unter dem Integral

$$\int_0^{\infty} x^n \exp(-zx) = (-1)^n G^{(n)}(z) = \frac{n!}{z^{n+1}}. \quad (\text{B.1.7})$$

Dies in (B.1.5) mit $z = k + 1$ angewandt ergibt

$$I_F(n) = n! \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(k+1)^n} \quad \text{für } n \in \{2, 3, \dots\}. \quad (\text{B.1.8})$$

Die Reihe selbst läßt sich mit Hilfe von Fourier-Reihen lösen. Dazu betrachten wir die Fourierreihe für die Funktion $f(x) = x^n$ im Intervall $x \in [-\pi, \pi]$. Es gilt

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \tilde{f}_k \exp(ikx) \quad \text{mit} \quad \tilde{f}_k = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx f(x) \exp(-ikx). \quad (\text{B.1.9})$$

Um die Koeffizienten zu berechnen, verwenden wir wieder eine erzeugende Funktion:

$$G(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx \exp(-izx) = \frac{\sin(\pi z)}{\pi z}. \quad (\text{B.1.10})$$

Daraus folgt

$$G^{(n)}(z) = \frac{(-i)^n}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx x^n \exp(-izx). \quad (\text{B.1.11})$$

Wir erhalten die Koeffizienten in (B.1.9) durch

$$\tilde{f}_k = i^n G^{(n)}(k) \quad \text{für } k \neq 0. \quad (\text{B.1.12})$$

Für $k = 0$ folgt

$$\tilde{f}_0 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx x^n = \begin{cases} 0 & \text{falls } n \text{ ungerade,} \\ \frac{\pi^n}{n+1} & \text{falls } n \text{ gerade.} \end{cases} \quad (\text{B.1.13})$$

Es ist klar, daß für gerade (ungerade) n durch Zusammenfassen der Reihenglieder mit entgegengesetztem Vorzeichen reine Cosinus- bzw. Sinusreihen entstehen. Wir geben nun einige dieser Reihenentwicklungen an, die im *offenen* Intervall $(-\pi, \pi)$ gelten.

$$x = 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k} \sin(kx), \quad (\text{B.1.14})$$

$$x^2 = \frac{\pi^2}{3} + 4 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k^2} \cos(kx), \quad (\text{B.1.15})$$

$$x^3 = 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{k} \left(\pi^2 - \frac{6}{k^2} \right) \sin(kx), \quad (\text{B.1.16})$$

$$x^4 = \frac{\pi^4}{5} + 8 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k^2} \left(\pi^2 - \frac{6}{k^2} \right) \cos(kx). \quad (\text{B.1.17})$$

Nun können wir die Reihen in (B.1.8) auswerten. Um etwa (4.5.56) zu beweisen, müssen wir gemäß (B.1.8) in (B.1.15) $x = 0$ setzen. Das liefert

$$0 = \frac{\pi^2}{3} + 4 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k^2} \Rightarrow \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k-1}}{k^2} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(k+1)^2} = \frac{\pi^2}{12}. \quad (\text{B.1.18})$$

Damit haben wir $I(2) = \pi^2/6$. In (4.5.56) integrieren wir aber über die ganze reelle Achse, und da der Integrand in dem Fall symmetrisch ist, verdoppelt dies das Resultat.

Anhang C

Formeln für die QED

In diesem Anhang stellen wir einige Formeln für die störungstheoretische Berechnung von Matrixelementen in der QED zusammen.

C.1 Dirac-Spinoren

Im Zusammenhang mit der Dirac-Gleichung haben wir die Dirac-Matrizen γ^μ eingeführt. Viele benötigte Formeln können wir allein aufgrund der Antikommutatorregeln

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} \quad (\text{C.1.1})$$

herleiten. Oft benötigen wir die Pseudohermitizitätsrelationen

$$\gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0 = (\gamma^\mu)^\dagger. \quad (\text{C.1.2})$$

Im Zusammenhang mit den Feynmanregeln sind manchmal die **Kontraktionsidentitäten**

$$\gamma_\mu \gamma^\mu = 4, \quad (\text{C.1.3})$$

$$\gamma_\mu \gamma^\nu \gamma^\mu = -2\gamma^\nu, \quad (\text{C.1.4})$$

$$\gamma_\mu \gamma^\nu \gamma^\rho \gamma^\mu = 4g^{\nu\rho}, \quad (\text{C.1.5})$$

$$\gamma_\mu \gamma^\nu \gamma^\rho \gamma^\sigma \gamma^\mu = -2\gamma^\sigma \gamma^\rho \gamma^\nu. \quad (\text{C.1.6})$$

Beweis: die erste Identität folgt unmittelbar aus (C.1.1)

$$\gamma_\mu \gamma^\mu = g_{\mu\nu} \gamma^\mu \gamma^\nu = \frac{1}{2} g_{\mu\nu} \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = g_{\mu\nu} g^{\mu\nu} = \delta^\mu_\mu = 4. \quad (\text{C.1.7})$$

Daraus folgt die zweite Identität durch einmaliges Anwenden der Antikommutatorrelation (C.1.1)

$$\gamma_\mu \gamma^\nu \gamma^\mu = \gamma_\mu [\{\gamma^\nu, \gamma^\mu\} - \gamma^\mu \gamma^\nu] = 2\gamma_\mu g^{\nu\mu} - \gamma_\mu \gamma^\mu \gamma^\nu \stackrel{(\text{C.1.3})}{=} 2\gamma^\nu - 4\gamma^\nu = -2\gamma^\nu. \quad (\text{C.1.8})$$

Auf diese Art können wir fortfahren. Beweisen wir noch (C.1.5):

$$\gamma_\mu \gamma^\nu \gamma^\rho \gamma^\mu = \gamma_\mu \gamma^\nu [\{\gamma^\rho, \gamma^\mu\} - \gamma^\mu \gamma^\rho] \stackrel{(\text{C.1.4})}{=} 2\gamma^\rho \gamma^\nu + 2\gamma^\nu \gamma^\rho = 2\{\gamma^\rho, \gamma^\nu\} = 4g^{\rho\nu}. \quad (\text{C.1.9})$$

Der Beweis folgt dann auf exakt analoge Weise (*Übung!*).

Schließlich benötigt man oft die Spur von Dirac-Matrixprodukten. Dazu bemerken wir, daß aufgrund der expliziten Darstellung der Dirac-Matrizen (6.6.7)

$$\text{tr } \gamma^\mu = 0. \quad (\text{C.1.10})$$

Aus der Vertauschbarkeit von Matrizen unter der Spur folgt unter Zuhilfenahme der Antikommutatorregeln (C.1.1)

$$\text{tr}(\gamma^\mu \gamma^\nu) = \frac{1}{2} \text{tr}(\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\}) = g^{\mu\nu} \text{tr } \mathbb{1} = 4g^{\mu\nu}. \quad (\text{C.1.11})$$

Aus der Blockgestalt der Dirac-Matrizen gemäß (6.6.7) folgt, daß ein Produkt aus einer ungeraden Anzahl von Dirac-Matrizen stets eine solche Blockgestalt hat, d.h. die Blöcke auf der Diagonalen solcher Produkte sind identisch 0 und damit insbesondere auch die Diagonalelemente der Gesamtmatrix selbst, d.h. es gilt

$$\text{tr} \left(\underbrace{\gamma^\mu \gamma^\nu \dots \gamma^\omega}_{2n+1} \right) = 0 \quad \text{für alle } n \in \mathbb{N}. \quad (\text{C.1.12})$$

Für vier Dirac-Matrizen gilt

$$\text{tr}(\gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\rho \gamma^\sigma) = 4(g^{\mu\nu} g^{\rho\sigma} - g^{\mu\rho} g^{\nu\sigma} + g^{\mu\sigma} g^{\nu\rho}). \quad (\text{C.1.13})$$

Zum Beweis verwenden wir wieder die Antikommutatorregeln, (C.1.11):

$$\begin{aligned} \text{tr}(\gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\rho \gamma^\sigma) &= 2g^{\mu\nu} 4g^{\rho\sigma} - \text{tr}(\gamma^\nu \gamma^\mu \gamma^\rho \gamma^\sigma) = 8g^{\mu\nu} g^{\rho\sigma} - 8g^{\mu\rho} g^{\nu\sigma} + \text{tr}(\gamma^\nu \gamma^\rho \gamma^\mu \gamma^\sigma) \\ &= 8(g^{\mu\nu} g^{\rho\sigma} - g^{\mu\rho} g^{\nu\sigma} + g^{\mu\sigma} g^{\nu\rho}) - \text{tr}(\gamma^\nu \gamma^\rho \gamma^\sigma \gamma^\mu). \end{aligned} \quad (\text{C.1.14})$$

Die letzte Spur ist wegen der Vertauschbarkeit von Matrizen unter der Spur gleich der Spur auf der linken Seite der Gleichung, und Vereinigen dieser Terme ergibt schließlich (C.1.13).

Bei der Berechnung von Spinsummen oder Mittelwertbildung über die Spins bei der Berechnung unpolarisierter Wirkungsquerschnitte benötigt man noch die Spin-Summen über die Elektron- und Positronamplituden (6.7.8)

$$\sum_{\sigma} u(\vec{k}, \sigma) \bar{u}(\vec{k}, \sigma) = \not{k} + m, \quad \sum_{\sigma} v(\vec{k}, \sigma) \bar{v}(\vec{k}, \sigma) = \not{k} - m. \quad (\text{C.1.15})$$

Diese Formeln beweist man am einfachsten durch Rechnen mit der expliziten Darstellung (6.7.7) und (6.7.9).

C.2 Polarisationsvektoren für Photonen

Nur die beiden transversal-raumartigen Feldfreiheitsgrade eines (asymptotisch) freien Photons sind physikalische Feldfreiheitsgrade. Entsprechend gibt es zu jedem Impuls \vec{k} eines Photons zwei aufeinander orthogonale und zu \vec{k} orthogonale Polarisationsvektoren. Für die in diesem Skript verwendeten linearen Polarisationszustände für elektromagnetische Feld in Strahlungseichung, das den Eichbedingungen

$$A^0(x) = 0, \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{A}(x) = 0 \quad (\text{C.2.1})$$

genügt, ergeben sich daraus zwei reelle Polarisationsvektoren

$$\epsilon^\mu(\vec{k}, \alpha) \quad \text{mit} \quad \epsilon^0(\vec{k}, \alpha) = 0, \quad \alpha \in \{1, 2\}. \quad (\text{C.2.2})$$

C.2 · Polarisationsvektoren für Photonen

Die Orientierung der Vektoren $\vec{\epsilon}(\vec{k}, 1)$ und $\vec{\epsilon}(\vec{k}, 2)$, $\hat{k} := \vec{k}/|\vec{k}|$, ist so gewählt, daß sie in dieser Reihenfolge ein rechtshändiges kartesisches Koordinatensystem bilden, d.h. es ist

$$\vec{\epsilon}(\vec{k}, 1) \times \vec{\epsilon}(\vec{k}, 2) = \hat{k}, \quad \vec{\epsilon}(\vec{k}, 2) \times \hat{k} = \vec{\epsilon}(\vec{k}, 1), \quad \hat{k} \times \vec{\epsilon}(\vec{k}, 1) = \vec{\epsilon}(\vec{k}, 2). \quad (\text{C.2.3})$$

Außerdem soll die folgende relative Orientierung für die Polarisationsvektoren zu \vec{k} bzw. $-\vec{k}$ gelten:

$$\vec{\epsilon}(\vec{k}, \alpha) \cdot \vec{\epsilon}(-\vec{k}, \alpha') = (-1)^\alpha \delta_{\alpha\alpha'}. \quad (\text{C.2.4})$$

Für die Polarisationssumme gilt

$$\sum_{\alpha=1,2} \epsilon^a(\vec{k}, \alpha) \epsilon^b(\vec{k}, \alpha) = \delta^{ab} - \frac{k^a k^b}{\vec{k}^2}. \quad (\text{C.2.5})$$

Bei der Berechnung von Übergangsmatrixelementen \mathcal{M}_{fi} für Streuprozesse, bei denen äußere Photonenlinien in den entsprechenden Feynman-Diagrammen auftreten, kann bei der Summation über die Polarisation im Endzustand bzw. beim Mitteln über die Polarisationen im Anfangszustand aufgrund der Eichinvarianz der QED die Polarisationssumme durch

$$\sum_{\alpha=1,2} \epsilon^\mu(\vec{k}, \alpha) \epsilon^\nu(\vec{k}, \alpha) \rightarrow -g^{\mu\nu} \quad (\text{C.2.6})$$

ersetzt werden.

Anhang C · Formeln für die QED

Literaturverzeichnis

- [AGD76] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, I. E. Dzialoshinski, *Quantum Field Theory Methods in Statistical Physics*, Dover Publications, New York (1976).
- [B⁺85] W. Bartel, et al., New results on $e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-$ from the JADE detector at PETRA, *Z. Phys. C* **26**, 507 (1985).
URL <https://doi.org/10.1007/BF01551792>
- [Bal70] L. E. Ballentine, The Statistical Interpretation of Quantum Mechanics, *Rev. Mod. Phys.* **42**, 358 (1970).
URL <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.42.358>
- [Bal98] L. E. Ballentine, *Quantum Mechanics*, World Scientific, Singapore, New Jersey, London, Hong Kong (1998).
- [Bar64] V. Bargmann, Note on Wigner's Theorem on Symmetry Operations, *Journ. Math. Phys.* **5**, 862 (1964).
URL <https://doi.org/10.1063/1.1704188>
- [Bel39] F. J. Belinfante, On the spin angular momentum of mesons, *Physica* **6**, 887 (1939).
URL [https://doi.org/10.1016/S0031-8914\(39\)90090-X](https://doi.org/10.1016/S0031-8914(39)90090-X)
- [BN37] F. Bloch, A. Nordsieck, Note on the radiation field of the electron, *Phys. Rev.* **52**, 54 (1937).
URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.52.54>
- [Boh35] N. Bohr, Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?, *Physical Review* **48**, 696 (1935).
URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.48.696>
- [Cal85] H. B. Callen, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, 2. Aufl., John Wiley&Sons, New York, Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore (1985).
- [CH10] W. Cassing, H. v. Hees, *Mathematische Methoden für Physiker*, Universität Gießen (2010).
URL <https://itp.uni-frankfurt.de/~hees/publ/maphy.pdf>
- [EPR35] A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen, Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?, *Phys. Rev.* **47**, 777 (1935).
URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.47.777>

LITERATURVERZEICHNIS

- [Fee32] E. Feenberg, The Scattering of Slow Electrons by Neutral Atoms, *Phys. Rev.* **40**, 40 (1932).
URL <https://doi.org/10.1103/PhysRev.40.40>
- [FH03] B. Friedrich, D. Herschbach, Stern and Gerlach: How a Bad Cigar Helped to Reorient Atomic Physics, *Physics Today* **12/2003**, 53 (2003).
URL https://scitation.aip.org/journals/doc/PHTOAD-ft/vol_56/iss_12/53_1.shtml
- [Fic79] E. Fick, *Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie*, 4. Aufl., Aula-Verlag, Wiesbaden (1979).
- [FK06] H. Fischer, H. Kaul, *Mathematik für Physiker*, Bd. 3, 2. Aufl., Springer Verlag (2006).
URL <https://doi.org/10.1007/978-3-8351-9000-9>
- [FK07] H. Fischer, H. Kaul, *Mathematik für Physiker*, Bd. 1, 6. Aufl., Springer Verlag (2007).
URL <https://doi.org/10.1007/978-3-8351-9207-2>
- [FK08] H. Fischer, H. Kaul, *Mathematik für Physiker*, Bd. 2, 3. Aufl., Springer Verlag (2008).
URL <https://doi.org/10.1007/978-3-8351-9222-5>
- [FW71] A. L. Fetter, J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, McGraw-Hill Book Company, New York (1971).
- [GP90] A. Galindo, P. Pascual, *Quantum Mechanics*, Springer Verlag, Heidelberg (1990), 2 Vols.
- [GY03] K. Gottfried, T. Yan, *Quantum Mechanics: Fundamentals*, Springer (2003).
- [Hee98] H. van Hees, *Prinzipien der Quantentheorie* (1998).
URL <https://theorie.physik.uni-giessen.de/~hees/publ/quant.pdf>
- [Hee02] H. van Hees, *Introduction to Quantum Field Theory* (2002).
URL <https://itp.uni-frankfurt.de/~hees/publ/lect.pdf>
- [Hee08a] H. van Hees, *Klassische Mechanik* (2008).
URL <https://itp.uni-frankfurt.de/~hees/faq-pdf/mech.pdf>
- [Hee08b] H. van Hees, *Statistische Physik* (2008).
URL <https://itp.uni-frankfurt.de/~hees/faq-pdf/stat.pdf>
- [Hob87] A. Hobson, *Concepts in Statistical Mechanics*, 2. Aufl., Gordon and Breach Science Publishers (1987).
- [Jay57a] E. Jaynes, Information Theory and Statistical Mechanics, *Phys. Rev.* **106**, 620 (1957).
URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.106.620>
- [Jay57b] E. Jaynes, Information Theory and Statistical Mechanics. II, *Phys. Rev.* **108**, 171 (1957).
URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.108.171>
- [JO01] J. D. Jackson, L. B. Okun, Historical roots of gauge invariance, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 663 (2001).
URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.73.663>

LITERATURVERZEICHNIS

- [Kat67] A. Katz, *Principles of Statistical Mechanics*, W. H. Freeman and Company, San Francisco and London (1967).
- [KN29] O. Klein, T. Nishina, Über die Streuung von Strahlung durch freie Elektronen nach der neuen relativistischen Quantendynamik von Dirac, *Z. Phys. A* **52**, 853 (1929).
URL <https://doi.org/10.1007/BF01366453>
- [Kug97] T. Kugo, *Eichtheorie*, Springer-Verlag, Heidelberg (1997).
- [LL77] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, Pergamon Press, Oxford (1977).
- [LL87] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik, Bd. 5, Statistische Physik*, 8. Aufl., Akademie-Verlag, Berlin (1987).
- [LMB04] M. LeBellac, F. Mortessagne, G. G. Batrouni, *Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Thermodynamics*, Cambridge University Press, Cambridge, New York, Melbourne, Madrid, Cape Town (2004).
- [Mes99] A. Messiah, *Quantum Mechanics*, Dover Publications, New York (1999).
- [Møl32] C. Møller, Zur Theorie des Durchgangs schneller Elektronen durch Materie, *Ann. Physik* **406**, 531 (1932).
URL <https://doi.org/10.1002/andp.19324060506>
- [N⁺10] K. Nakamura, et al., Review of particle physics, *J. Phys. G* **37**, 075021 (2010).
URL <https://doi.org/10.1088/0954-3899/37/7A/075021>
- [Nac86] O. Nachtmann, *Phänomene und Konzepte der Elementarteilchenphysik*, Vieweg, Braunschweig, Wiesbaden (1986).
- [PBCBGC05] G. Potel, F. Barranco, S. Cruz-Barrios, J. Gómez-Camacho, Quantum mechanical description of Stern-Gerlach experiments, *Phys. Rev. A* **71** (2005).
URL <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.71.052106>
- [PS95] M. Peskin, D. V. Schroeder, *An Introduction to Quantum Field Theory*, Addison-Wesley Publ. Comp., Reading, Massachusetts (1995).
- [Rei65] F. Reif, *Fundamentals of statistical and thermal physics*, McGraw Hill Book Company, New York (1965).
- [Ryd96] L. H. Ryder, *Quantum Field Theory*, 2. Aufl., Cambridge University Press, Cambridge, New York, Melbourne (1996).
- [Sch94] S. Schweber, *QED and the men who made it: Dyson, Feynman, Schwinger, and Tomonaga*, Princeton University Press, Princeton (1994).
- [Sch08] F. Schwabl, *Quantenmechanik für Fortgeschrittene (QM II)*, 5. Aufl., Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (2008).
URL <https://doi.org/10.1007/978-3-540-85076-2>
- [Smi61] W. I. Smirnow, *Lehrbuch der höheren Mathematik*, 3. Aufl., VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin (1961).

LITERATURVERZEICHNIS

- [Som78] A. Sommerfeld, *Vorlesungen über Theoretische Physik V, Thermodynamik und Statistik*, Verlag Harri Deutsch (1978).
- [ST93] J. J. Sakurai, S. Tuan, *Modern Quantum Mechanics*, Addison Wesley (1993).
- [SW64] R. Streater, A. S. Wightman, *Die Prinzipien der Quantenfeldtheorie*, Bibliographisches Institut, Mannheim (1964).
- [Tay72] J. R. Taylor, *Scattering Theory: The Quantum Theory on Nonrelativistic Collisions*, John Wiley&Sons, New York, London, Sydney, Toronto (1972).
- [Wei95] S. Weinberg, *The Quantum Theory of Fields*, Bd. 1, Cambridge University Press (1995).
- [Wic50] G. C. Wick, The evaluation of the collision matrix, *Phys. Rev.* **80**, 268 (1950).
URL <https://doi.org/10.1103/PhysRev.80.268>