Quantenmechanik II

Prof. A. Wipf
Theoretisch-Physikalisches-Institut
Friedrich-Schiller-Universität, Max Wien Platz 1
07743 Jena

11. Auflage, WS 2019/20
1. Auflage, SS 1995

Hinweise auf Tippfehler und andere Unzulänglichkeiten sind willkommen
(per email an: wipf@tpi.uni-jena.de)

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einführung, Literatur

Folgende Bücher kann ich empfehlen:

M. Bartelmann, B. Feuerbacher, T. Krüger, D. Lüst, A. Rebhan, A. Wipf, *Theoretische Physik*, Springer (2014)
G. Gottfried and T.M. Yan, *Quantum Mechanics: Fundamentals*; Springer, 2003
C. Cohen-Tannoudij, B. Diu und Laloe; *Quantenmechanik I+II*, de Gruyter, 2009
J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*; 2. Auflage, Pearson 1993
A. Galino und P. Pascual, *Quantum Mechanics I und II*; Springer, 1990 und 1991
S. Gasiorowicz, *Quantenphysik*; 8. Auflage, Oldenbourg, 2002
L.I. Schiff, *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, 1968
A.S. Dawydow, *Quantenmechanik*; J.A. Barth, 1992
J. Townsend, *A modern Approach to Quantum Mechanics*; Mc.Graw-Hill, 2000
R. Becker und F. Sauter, *Theorie der Elektrizität 2*, 10. Auflage, Teubner, 1970

1.1 Einführung

In der Vorlesung Quantenmechanik I haben Sie die Grundlagen der Quantenmechanik kennengelernt. In der Schrödinger'schen Wellenmechanik beschreibt der zeitabhängige Vektor $|\psi(t)\rangle$ den Zustand des Systems zur Zeit t. Die Eigenwerte des einer Observablen zugeordneten (selbstadjungierten) Operators sind die möglichen Meßresultate für diese Observable. Wir haben die zeitunabhängige *Schrödinger-Gleichung* für ein Teilchen im Zentralfeld gelöst und dabei wesentlichen Gebrauch von der vorhandenen Drehsymmetrie gemacht: Die dritte Komponente und das Quadrat des Drehimpulses können gleichzeitig mit dem Hamilton-Operator diagonalisiert werden und gestatten eine explizite Lösung des Coulomb-Problems. Die Quantentheorie kann in unterschiedlichen Bildern formuliert werden. Neben dem *Schrödinger-* und *Heisenbergbild* gibt es das für die Streutheorie relevante *Wechselwirkungsbild*. Im letzten Semester haben wir einfache Mehrteilchensysteme besprochen und die zeitunabhängige *Störungstheorie* kennengelernt. Diese Resultate werden wir hier vertiefen und erweitern.

Wir beginnen die Vorlesung Quantenmechanik II mit der Einführung in *Mehrkörpersysteme*. Ein wichtiger Spezialfall sind Systeme bestehend aus identischen Teilchen. Wegen der prinzipiellen Ununterscheidbarkeit von identischen Teilchen sind die Wellenfunktionen vollständig symmetrisch oder vollständig antisymmetrisch in den Teilchenkoordinaten. Als Anwendung behandeln wir ideale Fermigase und Thomas-Fermi-Atome und daran anschließend die Hartree-Fock-Näherung. Es folgt eine Diskussion von Atommodellen und der Addition von Drehimpulsen.

Im nächsten Kapitel folgt eine Einführung in die *zeitabhängige Störungstheorie* und *Streutheorie*. Hier werden die goldene Regel von Fermi und verschiedene Einschaltvorgänge diskutiert. Danach wird die Potentialstreuung behandelt. Als Anwendung betrachten wir die elastische Streuung von Elektronen an Atomen. Es folgt die Partialwellenanalyse der Potentialstreuung an kugelsymmetrischen Potentialen und das optische Theorem. Abschließend behandeln wir relativ ausführlich die Coulomb-Streuung und die Streuung gleichartiger Teilchen.

Der Rest der Vorlesung ist der *relativistischen Quantenmechanik* und *Quantenfeldtheorie* gewidmet. Dabei wird die Dirac'sche Theorie des Elektrons einen großen Raum einnehmen. Die *Dirac-Gleichung* ist die relativistische Verallgemeinerung der Ihnen bekannten nicht-relativistischen Schrödinger-Gleichung. Danach wird die wichtige Methode der sogenannten *zweiten Quantisierung* besprochen. Sie ist eine sehr effiziente Methode, um Mehrteilchensysteme in der Festkörperphysik und relativistischen Teilchenphysik zu behandeln. In Form der relativistischen Quantenfeldtheorien führt sie zum Verständnis der Elementarteilchen und den Vermittlern ihrer gegenseitigen Wechselwirkungen.

Kapitel 2

Mehrkörpersysteme

Nach Abspaltung der Schwerpunktbewegung vereinfacht sich die stationäre Schrödinger-Gleichung für das nicht-relativistische H-Atom auf ein exakt lösbares Einteilchenproblem. Berücksichtigt man allerdings die relativistische Spin-Bahn-Kopplung oder wird ein äußeres Feld angelegt, so können die Energieniveaus und Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms nur mit Näherungsmethoden berechnet werden. Auch das Heliumatom entzieht sich einer exakten Behandlung. Seine Eigenschaften können zum Beispiel mit Hilfe der Schrödinger'schen Störungstheorie oder der Variationsmethode berechnet werden. In diesem Kapitel werden wir weitere Methoden kennen lernen, um die Dynamik mehrerer Teilchen zu behandeln.

Da sich Wechselwirkungen mit endlicher Geschwindigkeit ausbreiten, kann bereits die klassische Wechselwirkungsenergie nicht nur von den Teilchenorten zu einer *festen* Zeit abhängen. Sind aber die Relativgeschwindigkeiten der Teilchen des Systems klein verglichen mit der Lichtgeschwindigkeit, dann ändern sich deren Koordinaten (zum Beispiel Orte und Spins) während der Zeit der Übertragung der Wechselwirkung zwischen den Teilchen nur wenig. Dann kann man bis zu Gliedern der Ordnung $(v/c)^2$ die Hamiltonfunktion als Funktion allein der Orte, Impulse und Spins der Teilchen definieren.

2.1 Hamiltonoperator und Hilbertraum

Wir behandeln in diesem Kapitel Systeme, für die die *nicht-relativistische Näherung* gültig ist. Dann hat der Hamilton-Operator die Form

$$H=\sum_{i=1}^{N}\frac{\boldsymbol{p}_i^{\,2}}{2m_i}+V(\boldsymbol{x}_1,\dots,\boldsymbol{x}_N)+W. \tag{2.1}$$

V ist von der Ordnung $(v/c)^0$ und beschreibt denjenigen Anteil der Wechselwirkungsenergie, der nur von den Orten der Teilchen abhängt. W ist von der Ordnung $(v/c)^2$ und enthält die Spin-Bahn-Wechselwirkung. W ist eine Funktion der Orte, Impulse und Spins der Teilchen und berücksichtigt teilweise die Retardierung der Wechselwirkung. Die Zeitentwicklung des ungestörten Mehrkörpersystems folgt aus der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle=H|\psi\rangle. \tag{2.2}$$

Wir stellen uns vor, dass ein Gesamtsystem durch die *Kopplung von Teilsystemen* entsteht. Dabei müssen die Teilsysteme nicht notwendigerweise Einteilchensysteme sein. Die Formalisierung der Kopplung von N Systemen zu einem Gesamtsystem geschieht durch Einführung des *Tensorproduktes* der Hilberträume $\mathcal{H}_1,\dots,\mathcal{H}_N$ der Einzelsysteme,

$$\mathcal{H}=\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}_2\otimes\cdots\otimes\mathcal{H}_N. \tag{2.3}$$

Für das Tensorprodukt von Vektoren $|\psi_i\rangle$ der Teilräume $\mathcal{H}_i$ schreiben wir

$$|\psi_1\rangle\otimes|\psi_2\rangle\otimes\cdots\otimes|\psi_N\rangle\equiv|\psi_1\psi_2\cdots\psi_N\rangle \tag{2.4}$$

Das Tensorprodukt ist *linear in jedem Faktor.*

Das Skalarprodukt von zwei Produktzuständen ist das Produkt der Skalarprodukte seiner Faktoren,

$$\langle\phi_1\cdots\phi_N|\psi_1\cdots\psi_N\rangle_{\mathcal{H}}=\langle\phi_1|\psi_1\rangle_{\mathcal{H}_1}\cdots\langle\phi_N|\psi_N\rangle_{\mathcal{H}_N}. \tag{2.5}$$

Die Tensorprodukte

$$|n_1\dots n_N\rangle\equiv|n_1\rangle\otimes\cdots\otimes|n_N\rangle \tag{2.6}$$

der Basisvektoren der einzelnen Hilberträume bilden eine Basis des gesamten Hilbertraumes $\mathcal{H}$. Die bedeutet aber keinesfalls, dass jeder Zustand in $\mathcal{H}$ ein Produktzustand ist.

Produktzustände nennt man separabel. Kann ein Zustand nicht als Produkt geschrieben werden, dann heißt er verschränkt. Jeder Zustand – separabel oder verschränkt – ist eine (im Allgemeinen unendliche) Summe von Produktzuständen (2.6).

Sind $A_1, \dots, A_N$ „Observablen" der Teilsysteme mit Hilberträumen $\mathcal{H}_1, \dots, \mathcal{H}_N$, d.h.

$$A_i : \mathcal{H}_i \to \mathcal{H}_i, \tag{2.7}$$

dann ist ihr Tensorprodukt $A_1 \otimes \cdots \otimes A_N$ eine Observable des Gesamtsystems. Sie wirkt folgendermaßen auf Produktzustände im Hilbertraum $\mathcal{H}$:

$$(A_1 \otimes \cdots \otimes A_N)\,(|\psi_1\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_N\rangle) = |A_1\psi_1\rangle \otimes \cdots \otimes |A_N\psi_N\rangle. \tag{2.8}$$

Die Operatoren A_i können nicht addiert werden, da sie in verschiedenen Hilberträumen wirken. Setzt man aber stillschweigend voraus, dass A_i auf den Räumen $\mathcal{H}_j$ mit $j \neq i$ trivial wirkt, dann kann man sie addieren und man definiert

$$A_1 + \cdots + A_N \equiv A_1 \otimes \mathbb{1} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} + \cdots + \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1} \otimes A_N. \tag{2.9}$$

Mit dieser Übereinkunft ist

$$\begin{aligned}(A_1 + \cdots + A_N)\,(|\psi_1\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_N\rangle) = |A_1\psi_1\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_N\rangle + \dots \\ \cdots + |\psi_1\rangle \otimes \cdots \otimes |A_N\psi_N\rangle.\end{aligned} \tag{2.10}$$

Diese Notation wird zum Beispiel bei der Addition von Drehimpulses verschiedener Teilchen benutzt.

Es sei nun $|a_i\rangle$ Eigenvektor von A_i mit Eigenwert a_i. Dann ist der *Produktzustand*

$$|a_1\rangle \otimes \cdots \otimes |a_N\rangle \equiv |a_1 \dots a_N\rangle \tag{2.11}$$

automatisch Eigenvektor der Summe und des Tensorprodukts der Operatoren A_i,

$$\begin{aligned}(A_1 + \cdots + A_N)\,|a_1 \dots a_N\rangle &= (a_1 + \cdots + a_N)\,|a_1 \dots a_N\rangle \\ (A_1 \otimes \cdots \otimes A_N)\,|a_1 \dots a_N\rangle &= (a_1 \cdot \cdots \cdot a_N)\,|a_1 \dots a_N\rangle.\end{aligned} \tag{2.12}$$

Um Zustände in $\mathcal{H}$ vollständig zu charakterisieren kann man in jedem Teilraum $\mathcal{H}_i$ einen vollständigen Satz von verträglichen Observablen wählen und gleichzeitig diagonalisieren. Steht ξ_1 für die Eigenwerte einer vollständigen Menge verträglicher Observablen in $\mathcal{H}_1$, ξ_2

für einen derartige Menge in $\mathcal{H}_2$ usw., dann bilden die Produktzustände

$$|\xi_1 \dots \xi_N\rangle \equiv |\xi_1\rangle \otimes \cdots \otimes |\xi_N\rangle \tag{2.13}$$

eine Basis von $\mathcal{H}$. Zum Beispiel können wir die *gemeinsamen* Eigenzustände

$$|\boldsymbol{x}_1 s_1, \dots, \boldsymbol{x}_N s_N\rangle = |\boldsymbol{x}_1 s_1\rangle \otimes \cdots \otimes |\boldsymbol{x}_N s_N\rangle \tag{2.14}$$

der miteinander verträglichen Orts- und Spinoperatoren wählen. Ein beliebiger Zustand ist dann eine (unendliche) Superposition der Basis (2.14):

$$|\psi\rangle = \sum_{s_1,\dots,s_N} \int \mathrm{d}^3x_1 \dots \mathrm{d}^3x_N \, \psi\left(\boldsymbol{x}_1, s_1, \dots, \boldsymbol{x}_N, s_N\right) \, |\boldsymbol{x}_1 s_1, \dots, \boldsymbol{x}_N s_N\rangle \,, \tag{2.15}$$

wobei die Entwicklungskoeffizienten die N-Teilchen-Wellenfunktionen

$$\psi(\boldsymbol{x}_1, s_1, \dots, \boldsymbol{x}_N, s_N) = \langle \boldsymbol{x}_1 s_1, \dots, \boldsymbol{x}_N s_N|\psi\rangle \tag{2.16}$$

sind. Das Skalarprodukt zweier Zustandsvektoren lautet

$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_{s_1,\dots,s_N} \int \mathrm{d}^3x_{\,1} \dots \mathrm{d}^3x_{\,N} \, \bar{\phi}(\boldsymbol{x}_1, s_1 \dots, \boldsymbol{x}_N, s_N)\psi(\boldsymbol{x}_1, s_1, \dots, \boldsymbol{x}_N, s_N). \tag{2.17}$$

Für einen auf Eins normierten Zustand ist die Wellenfunktion (2.16) die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, das erste Teilchen am Ort $\boldsymbol{x}_1$ mit dritter Spinkomponenten s_1, das zweite Teilchen am Ort $\boldsymbol{x}_2$ mit dritter Spinkomponenten s_2, $\dots$ und das N'te Teilchen am Ort $\boldsymbol{x}_N$ mit dritter Spinkomponenten s_N zu finden. Für identische Teilchen (ein in der klassischen Physik unbekannter Begriff) müssen die Wellenfunktionen bei Vertauschung der Argumente ein vorgeschriebenes Verhalten zeigen. Dies werden wir später besprechen.

Für spinlose Teilchen ist jedes Teilsystem ein Einteilchensystem mit Hilbertraum $L_2(\mathbb{R}^3)$. Dem Produktzustand (2.4) ist folgende Wellenfunktion zugeordnet,

$$\left\langle \boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_N \middle| \psi_1 \cdots \psi_N \right\rangle = \langle \boldsymbol{x}_1|\psi_1\rangle \cdots \langle \boldsymbol{x}_N|\psi_N\rangle = \psi_1(\boldsymbol{x}_1) \cdots \psi(\boldsymbol{x}_N). \tag{2.18}$$

Für spinlose Teilchen bedeutet die Eigenschaft (2.3)

$$L_2\left(\mathbb{R}^3\right) \otimes \cdots \otimes L_2\left(\mathbb{R}^3\right) = L_2\big(\mathbb{R}^{3N}\big), \tag{2.19}$$

und deshalb kann jede quadratintegrierbare N-Teilchen Wellenfunktion $\psi(\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_N)$

durch eine Folge

$$\sum a_{n_1 \dots n_N} \psi_{n_1}(\boldsymbol{x}_1) \cdots \psi_{n_N}(\boldsymbol{x}_N) \tag{2.20}$$

beliebig genau approximiert werden. Der Hilbertraum für N unterscheidbare spinlose Teilchen ist gleich

$$\mathcal{H}^{(N)} = L^2\left(\mathbb{R}^{3N}\right) \tag{2.21}$$

und für N unterscheidbare Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$

$$\mathcal{H}^{(N)} = L^2\left(\mathbb{R}^{3N}\right) \otimes \underbrace{\mathbb{C}^2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{C}^2}_{N\text{mal}}. \tag{2.22}$$

Im allgemeinen Fall, insbesondere wenn die Teilchen nicht unterscheidbar sind, ist er ein *Unterraum* von

$$\mathcal{H}^{(N)} = L^2\left(\mathbb{R}^{3N}\right) \otimes \mathcal{H}_S^{(1)} \otimes \mathcal{H}_S^{(2)} \cdots \otimes \mathcal{H}_S^{(N)}, \tag{2.23}$$

wobei der Spinraum $\mathcal{H}_S^{(i)}$ von der Natur des i'ten Teilchens abhängt.

2.2 Identische Teilchen

Ein wichtiger Spezialfall ist die Kopplung *identischer* Teilchen mit identischen Einteilchen-Hilberträumen. Identische quantenmechanische Teilchen sind *wirklich* nicht unterscheidbar. Wir können zum Beispiel Elektronen nicht markieren wie klassische Billardkugeln um sie voneinander zu unterscheiden. Ein Zustand, in welchem ein erstes spinloses Teilchen bei $\boldsymbol{x}_1$ sitzt und ein zweites, identisches Teilchen, bei $\boldsymbol{x}_2$, ist derselbe Zustand wie wenn das zweite Teilchen bei $\boldsymbol{x}_1$ sitzt und das erste bei $\boldsymbol{x}_2$. Dasselbe gilt für alle Eigenwerte von Einteilchen-Observablen. Wir wollen nun die Konsequenzen dieser Ununterscheidbarkeit von quantenmechanischen Teilchen untersuchen. Sei

$$|\xi_1 \dots \xi_N) \tag{2.24}$$

der Zustandsvektor eines Systems von N identischen Teilchen. Dabei soll ξ_i die Eigenwerte irgend eines vollständigen Satzes von verträglichen Observablen in $\mathcal{H}_i$ sein. Dann ist die normierte Wellenfunktion $\psi(\xi_1, \dots, \xi_N) = \langle \xi_1 \dots \xi_N | \psi \rangle$ die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, das „erste“ Teilchen mit Quantenzahlen ξ_1, das „zweite“ Teilchen mit Quantenzahlen ξ_2 usw. zu finden. Obwohl wir die Teilchen nicht unterscheiden können, müssen wir sie im Formalismus markieren. Dies heißt nicht, dass wir die Teilchen physikalisch unterscheiden können. Die Ununterscheidbarkeit der Teilchen bedeutet, dass bei einer Vertauschung zweier Argumente in (2.24) der Zustand unverändert bleibt.

Etwas allgemeiner, sei π eine Umordnung oder Permutation von N Objekten, dann beschreiben

$$|\xi_1\xi_2\dots\xi_N\rangle \quad \text{und} \quad P(\pi)\,|\xi_1\xi_2\dots\xi_N\rangle = \left|\xi_{\pi(1)}\xi_{\pi(2)}\dots\xi_{\pi(N)}\right\rangle \tag{2.25}$$

identische Zustände. Die Permutationen von N Objekten bilden eine nicht-Abelsche Gruppe der Ordnung $N!$. Die Abbildung $\pi \longrightarrow P(\pi)$ ist eine *unitäre Darstellung* dieser Permutationsgruppe auf dem N-Teilchen Hilbertraum, d.h.

$$\left\langle P(\pi)\phi\middle|P(\pi)\psi\right\rangle = \langle\phi|\psi\rangle, \qquad P(e) = \mathbb{1}_{\mathcal{H}}, \quad P(\pi_1)P(\pi_2) = P(\pi_1\pi_2). \tag{2.26}$$

Hier ist e das neutrale Element der Permutationsgruppe, welches die Reihenfolge der Objekte nicht ändert und $\pi_1\pi_2$ bedeutet zuerst die Umordnung π_2 und danach die Umordnung π_1 ausführen.

Keine Observable kann identische Teilchen unterscheiden und alle Teilchen werden auf genau die gleiche Art behandelt. Deshalb sind die den Observablen entsprechenden Operatoren symmetrische Funktionen der Teilchenkoordinaten. Symmetrische Operatoren ändern sich also nicht wenn die Teilchenkoordinaten permutiert werden. Beispiele von symmetrischen Observablen sind der Gesamtimpuls und gesamte Bahndrehimpuls

$$\boldsymbol{p} = \sum_i \boldsymbol{p}_i \quad \text{und} \quad \boldsymbol{L} = \sum_i \boldsymbol{L}_i, \tag{2.27}$$

sowie der (Modell)-Hamilton-Operator

$$H = \frac{1}{2m}\sum_i \boldsymbol{p}_i^2 + \sum_{i<j} V(r_{ij}), \tag{2.28}$$

wobei $r_{ij} = |\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j|$ den Abstand zwischen dem i'ten und j'ten Teilchen bezeichnet. Identische Teilchen haben natürlich gleiche Massen.

2.2.1 Permutationen und Symmetrien

Sei nun π_{ij} diejenige *Transposition*, welche das i'te und j'te Element austauscht und $P_{ij} = P(\pi_{ij})$ der entsprechende unitäre Operator auf dem N-Teilchen Hilbertraum. Jede Permutation ist eine Komposition von Transpositionen. P_{ij} wirkt auf einem N-Teilchen-Zustand gemäß

$$P_{ij}|\xi_1\xi_2\dots\xi_i\dots\xi_j\dots\xi_N\rangle = |\xi_1\xi_2\dots\xi_j\dots\xi_i\dots\xi_N\rangle\,, \tag{2.29}$$

vertauscht also die Argumente i und j des Zustandsvektors. Zum Beispiel ist

$$P_{12}P_{13}|\xi_1\xi_2\xi_3\rangle = P_{12}|\xi_3\xi_2\xi_1\rangle = |\xi_2\xi_3\xi_1\rangle. \tag{2.30}$$

Die Gruppe der Permutationen ist nicht-Abelsch. Zum Beispiel ist

$$P_{13}P_{12}|\xi_1\xi_2\xi_3\rangle = P_{13}|\xi_2\xi_1\xi_3\rangle = |\xi_3\xi_1\xi_2\rangle \tag{2.31}$$

verschieden von (2.30) und deshalb gilt $P_{12}P_{13} \neq P_{13}P_{12}$. Sei nun $A(1,2,\dots,N)$ irgendein Operator auf dem N-Teilchen Hilbertraum. Dann ist zum Beispiel

$$\begin{aligned} P_{12}A(1,2,3,\dots,N)|\xi_1\xi_2\xi_3\dots\xi_N\rangle &= A(2,1,3,\dots,N)|\xi_2\xi_1\xi_3\dots\xi_N\rangle \\ A(1,2,3,\dots,N)P_{12}|\xi_1\xi_2\xi_3\dots\xi_N\rangle &= A(1,2,3,\dots,N)|\xi_2\xi_1\xi_3\dots\xi_N\rangle \end{aligned}$$

und analog für beliebige Paare i,j, und wir schließen

$$P_{ij}A(1,\dots,i,\dots,j,\dots,N) = A(1,\dots,j,\dots,i,\dots,N)P_{ij}. \tag{2.32}$$

Ein *symmetrischer Operator* ist nun ein Operator der mit allen Transpositionen P_{ij} und deshalb auch mit allen Permutationen vertauscht:

$$A \text{ symmetrisch:} \;\; P(\pi)AP^{-1}(\pi) = A. \tag{2.33}$$

Wir wollen annehmen $|\psi\rangle$ sei eine Eigenfunktion eines symmetrischen Vielteilchen-Hamilton-Operators, $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$. Da H mit den Permutationen vertauscht, gilt

$$HP|\psi\rangle = PH|\psi\rangle = PE|\psi\rangle = EP|\psi\rangle. \tag{2.34}$$

Also ist $P|\psi\rangle$ ebenfalls Eigenzustand mit derselben Energie. Ist $P|\psi\rangle$ nicht proportional zu $|\psi\rangle$, dann ist die Energie E entartet. Diese Entartung heißt *Austauschentartung.*

Betrachten wir ein System bestehend aus zwei identischen Teilchen, zum Beispiel den beiden Elektronen im Helium-Atom, etwas genauer. Die Permutationsgruppe besteht hier nur aus der Identität e und Transposition π_{12}. Wegen $\pi_{12}\pi_{12} = e$ und der Darstellungseigenschaft ist auch das Quadrat von $P_{12} = P(\pi_{12})$ die Identität. Damit sind die möglichen Eigenwerte von P_{12} gleich ± 1. Ist $|\xi_1\xi_2\rangle$ irgendeine Eigenfunktion von $H(\xi_1,\xi_2)$ mit Energie E ist, dann sind auch

$$\begin{aligned} |\xi_1\xi_2\rangle_s &= |\xi_1\xi_2\rangle + P_{12}|\xi_1\xi_2\rangle = |\xi_1\xi_2\rangle + |\xi_2\xi_1\rangle \\ |\xi_1\xi_2\rangle_a &= |\xi_1\xi_2\rangle - P_{12}|\xi_1\xi_2\rangle = |\xi_1\xi_2\rangle - |\xi_2\xi_1\rangle \end{aligned} \tag{2.35}$$

Eigenfunktionen mit derselben Energie. Die symmetrische Kombination ist Eigenfunktion von P_{12} mit Eigenwert 1 und die antisymmetrische Kombination ist Eigenfunktion von P_{12} mit Eigenwert -1.

Nun ist es eine *experimentelle Tatsache* (die allerdings im Rahmen einer lokalen relativistischen Quantenfeldtheorie verstanden werden kann), dass die Wellenfunktionen von 2 identischen Teilchen stets Eigenfunktionen von P_{12} sind. Der zugehörige Eigenwert hängt nur von der Teilchensorte ab. Die Wellenfunktion von zwei *identischen Fermionen*, z.B. zweier Elektronen, Protonen oder Neutronen, muss antisymmetrisch sein,

$$P_{12}|\xi_1\xi_2\rangle_a = -|\xi_1\xi_2\rangle_a \tag{2.36}$$

und die Wellenfunktion von zwei *identischen Bosonen*, z.B. zweier π^0-Mesonen, Photonen oder He^4-Nukleonen, muss symmetrisch sein

$$P_{12}|\xi_1\xi_2\rangle_s = |\xi_1\xi_2\rangle_s. \tag{2.37}$$

Diese tiefliegende Beziehung zwischen Spin und Statistik, nach der identische Teilchen mit ganzzahligem Spin (Bosonen) symmetrische Wellenfunktionen und identische Teilchen mit halbganzem Spin (Fermionen) antisymmetrische Wellenfunktionen haben, bleibt im Rahmen der nichtrelativistischen Quantenmechanik unbegründet.

Für Systeme mit mehr als zwei Teilchen gilt die analoge Aussage: bei einem Austausch von zwei identischen Fermionen ändert die Wellenfunktion das Vorzeichen und bei Austausch von identischen Bosonen bleibt sie unverändert:

$$\begin{aligned} P(\pi)|\psi\rangle &= \mathrm{sign}(\pi)|\psi\rangle \qquad && \text{Fermionen} \\ P(\pi)|\psi\rangle &= |\psi\rangle && \text{Bosonen.} \end{aligned}$$

Hier ist $\mathrm{sign}(\pi)$ das so-genannte Signum der Permutation: es ist 1 falls π aus einer geraden Anzahl Transpositionen besteht und sonst -1.

Wir untersuchen nun, was für Symmetrieeigenschaften die Wellenfunktionen von *zusammengesetzten Teilchen* haben. Als Beispiel studieren wir die Wellenfunktion von 2 *Wasserstoffatomen* $\psi(e_1, p_1, e_2, p_2)$. Darin bezeichnet e_1 den Ort und Spin des Elektrons im ersten Atom, p_1 den Ort und Spin des Protons im ersten Atom, usw. ψ muss bei Austausch der beiden Elektronen (Protonen) das Vorzeichen wechseln. ψ braucht aber bei Vertauschung der Koordinaten eines Elektrons mit den Koordinaten eines Protons das Vorzeichen nicht zu wechseln, da Elektronen und Protonen unterscheidbar sind. Wie ändert sich nun die

Wellenfunktion unter Austausch der beiden Wasserstoffatome? Wegen

$$\psi(e_2, p_2, e_1, p_1) = -\psi(e_1, p_2, e_2, p_1) = \psi(e_1, p_1, e_2, p_2) \tag{2.38}$$

ändert sich ψ nicht. Dies bedeutet, dass Wasserstoffatome sich wie Bosonen verhalten – es sind Bosonen. Man überzeugt sich nun leicht davon, dass Teilchen bestehend aus einer geraden Anzahl Fermionen und irgendeiner Anzahl Bosonen sich wie Bosonen verhalten, während Teilchen bestehend aus einer ungeraden Anzahl Fermionen und irgendeiner Anzahl Bosonen sich wie Fermionen verhalten. Zum Beispiel sind He^4-Atome (mit je zwei Protonen, Neutronen und Elektronen) Bosonen, während He^3-Atome (nur ein Neutron) Fermionen sind.

Aus der Antisymmetrie der Wellenfunktion von identischen Fermionen folgt unmittelbar das *Ausschliessungsprinzip*. Wegen $\psi(\xi_1, \xi_2, \dots) = -\psi(\xi_2, \xi_1, \dots)$ ist $\psi(\xi_1, \xi_1, \dots) = 0$. Nach diesem Prinzip von *Wolfgang Pauli* ist die Amplitude dafür, zwei identische Fermionen im selben Zustand zu finden, gleich Null. Insbesondere müssen zwei Elektronen am selben Ort verschiedene Spineinstellungen aufweisen oder können sich zwei Elektronen mit derselben Spineinstellung nicht am selben Ort aufhalten

2.2.2 Nichtwechselwirkende identische Teilchen

Die exakte Behandlung von realistischen Vielkörperproblemen ist nicht möglich. In einigen Fällen können aber wichtige Eigenschaften mit Hilfe einer Störungsentwicklungen erklärt werden. In nullter Näherung behandelt man die Teilchen oft als unabhängig. Im nächsten Schritt wird ihre Wechselwirkung als Störung berücksichtigt. In nullter Näherung ist der Hamilton-Operator die Summe von *identischen* Einteilchen-Operatoren,

$$H_0 = \sum_{i=1}^{N} h(i), \tag{2.39}$$

wobei diese Summe auf dem gesamten Hilbertraum in (2.9) erklärt wurde. Die orthonormierten Einteilchen-Zustände $|\xi\rangle$ seien Eigenzustände von h mit Energien ε_n,

$$h|\xi\rangle = \varepsilon_n|\xi\rangle, \qquad |\xi\rangle = |\varepsilon_n a\rangle. \tag{2.40}$$

Dann sind die Lösungen der stationären Schrödingergleichung

$$H_0|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{2.41}$$

offensichtlich die Produkt-Wellenfunktionen

$$|\xi_1\xi_2\ldots\xi_N\rangle = |\xi_1\rangle \otimes |\xi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\xi_N\rangle. \tag{2.42}$$

Die Energien dieser Zustände sind nach (2.12) gleich die Summe der Einteilchen-Energien,

$$E = \varepsilon_{n_1} + \cdots + \varepsilon_{n_N}. \tag{2.43}$$

In der Lösung (2.42) ist das erste Teilchen im Zustand $|\xi_1\rangle$ mit Energie ε_{n_1}, das zweite Teilchen im Zustand $|\xi_2\rangle$ mit Energie ε_{n_2} usw. Wegen der Austauschentartung gibt es weitere Lösungen von (2.41) mit gleicher Energie: Alle Produktzustände

$$P(\pi)|\xi_1\xi_2\cdots\xi_N\rangle \tag{2.44}$$

haben die gleiche Energie wie der Zustand in (2.42). Aber weder der Zustand (2.42) noch eine der anderen vermittels Permutation der Argumente gewonnene Lösung ist für identische Teilchen zugelassen. Wir müssen diejenigen Linearkombinationen der nicht erlaubten Lösungen konstruieren die (anti)symmetrisch in den Argumenten sind. Für *identische Bosonen* sind dies die symmetrischen Zustandsvektoren

$$|\xi_1\ldots\xi_N\rangle_s \approx \sum_\pi |\xi_{\pi(1)}\ldots\xi_{\pi(N)}\rangle. \tag{2.45}$$

Die Summe erstreckt sich über alle $N!$ Permutationen der Indizes $1,\ldots,N$. Die Energie dieses Zustandes ist gerade (2.43). Der Zustand $|\ldots\rangle_s$ ist vollständig symmetrisch, da eine Vertauschung zweier Argumente einer Umordnung der Summanden auf der rechten Seite entspricht, aber die Summe nicht ändert.

Für *identische Fermionen* müssen wir vollständig antisymmetrische Zustandsvektoren konstruieren. Wie man leicht einsieht, ist

$$|\xi_1\ldots\xi_N\rangle_a = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_\pi \operatorname{sign}(\pi)|\xi_{\pi(1)}\ldots\xi_{\pi(N)}\rangle \tag{2.46}$$

vollständig antisymmetrisch, genauso wie die zugehörige Wellenfunktion,

$$\begin{aligned}\psi^{\mathrm{SD}}_{n_1\ldots n_N}(\xi_1,\ldots,\xi_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_\pi \operatorname{sign}(\pi)\big\langle\xi_{\pi(1)}\ldots\xi_{\pi(N)}|\psi_{n_1}\ldots\psi_{n_N}\big\rangle\\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_\pi \operatorname{sign}(\pi)\psi_{\pi(n_1)}(\xi_1)\cdot\cdots\cdot\psi_{\pi(n_N)}(\xi_N).\end{aligned} \tag{2.47}$$

Die Energie dieser Zustände ist ebenfalls durch (2.43) gegeben.

Diese alternierende Summe kann auch als Determinante geschrieben werden:

$$\psi^{\mathrm{SD}}_{n_1\dots n_N}(\xi_1,\dots,\xi_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\det\begin{pmatrix}\psi_{n_1}(\xi_1) & \psi_{n_1}(\xi_2) & \dots & \psi_{n_1}(\xi_N)\\ \psi_{n_2}(\xi_1) & \psi_{n_2}(\xi_2) & \dots & \psi_{n_2}(\xi_N)\\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots\\ \psi_{n_N}(\xi_1) & \psi_{n_N}(\xi_2) & \dots & \psi_{n_N}(\xi_N)\end{pmatrix}. \tag{2.48}$$

Für orthonormierte Einteilchenfunktionen ψ_n ist diese sogenannte *Slater-Determinante* auf Eins normiert.

Neben der symmetrischen und antisymmetrischen Darstellung gibt es noch viele andere irreduzible Darstellungen der nicht-Abelschen Permutationsgruppe. In 3 Raumdimensionen sind aber nur die (anti)symmetrischen erlaubt und in der Natur realisiert. In tieferen Dimensionen sind auch andere Darstellungen kompatibel mit einer lokalen Feldtheorie (Anyonen).

In der nichtrelativistischen Näherung enthält der Hamilton-Operator keine Spinoperatoren, zumindest wenn kein Magnetfeld vorhanden ist. Die Einteilchen-Wellenfunktionen (und damit die Wellenfunktion des Gesamtsystems) können daher als Produkt einer reinen Bahnfunktion und einer Funktion geschrieben werden, die nur von der Spinvariablen abhängt, $\psi_n(\xi)=\phi_n(\boldsymbol{x})|sm_s\rangle$. Der Bahnanteil $\phi_{n_1}(\boldsymbol{x}_1)\dots\phi_{n_N}(\boldsymbol{x}_N)$ der Wellenfunktion des Gesamtsystem braucht nicht (anti)symmetrisch in den Orten sein. Nur beim gleichzeitigen Austausch aller Koordinaten von zwei identischen Teilchen, also ihrer Orts- *und* Spinvariablen, muss sie (anti)symmetrisch sein.

Wie sieht nun der Grundzustand für ein System von nicht wechselwirkenden Elektronen aus? Offensichtlich verschwindet die Slater-Determinante, wenn nur zwei n_i gleich sind. Wir ordnen die Quantenzahlen n_i der Einteilchenzustände, so dass die Einteilchenenergien der Größe nach geordnet sind,

$$\varepsilon_1\le\varepsilon_2\le\varepsilon_3\le\dots. \tag{2.49}$$

Die Grundzustandsenergie für nicht-wechselwirkende Fermionen ist offenbar

$$E_0=\sum_{i=1}^N\varepsilon_i, \tag{2.50}$$

und der *Grundzustand* hat die Form

$$\psi_0^{\mathrm{SD}}(\xi_1,\dots,\xi_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\det\begin{pmatrix}\psi_1(\xi_1) & \psi_1(\xi_2) & \dots & \psi_1(\xi_N)\\ \psi_2(\xi_1) & \psi_2(\xi_2) & \dots & \psi_2(\xi_N)\\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots\\ \psi_N(\xi_1) & \psi_N(\xi_2) & \dots & \psi_N(\xi_N)\end{pmatrix}. \tag{2.51}$$

Im nichtrelativistischen Grenzfall ist der Einteilchen-Hamilton-Operator spinunabhängig und jede Einteilchenenergie ist mindestens doppelt entartet, da die Zustände mit Spin $\frac{1}{2}$ und $-\frac{1}{2}$ dieselbe Energie haben. Für N nichtwechselwirkende identische Teilchen im Grundzustand sind die $[N/2]$ tiefsten Zustände des Einteilchen-Hamilton-Operators H doppelt besetzt.

2.2.3 Ideales Fermigas

Wir wollen nun als einfache Anwendung den Grundzustand eines Gases von nicht wechselwirkenden Fermionen in einer Box mit Kantenlänge L und Volumen $V=L^3$ bestimmen. Ein kaltes Fermigas im Gleichgewicht ist in sehr guter Näherung in seinem Grundzustand. Wegen des Pauliprinzips können zwei identische Fermionen des Gases nie denselben quantenmechanischen Zustand einnehmen. Das führt dazu, dass nur wenige Teilchen die Einteilchenzustände mit niedrigen Energien besetzen können. Die anderen müssen Zustände mit höherer Energie einnehmen. So kommt es, dass selbst in einem extrem kalten Fermigas Teilchen unter Umständen eine sehr hohe Energie haben.

Vernachlässigen wir Oberflächeneffekte (d.h. die genaue Form der Randbedingungen), dann können wir als Eigenfunktionen des freien Einteilchen-Hamilton-Operators $H=\boldsymbol{p}^2/2m$ ebene Wellen wählen,

$$\psi_k(\boldsymbol{x},m_s)=\frac{1}{\sqrt{V}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}|sm_s\rangle,\quad \text{mit Energien}\quad \varepsilon(\boldsymbol{k})=\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{k}^2. \tag{2.52}$$

Wegen der Periodizität der Wellenfunktion sind die Wellenzahlvektoren quantisiert,

$$\boldsymbol{k}\in\frac{2\pi}{L}\boldsymbol{\nu},\quad \boldsymbol{\nu}\in\mathbb{Z}^3. \tag{2.53}$$

Die dritte Komponente m_s des Spins in der Spinwellenfunktion nimmt für Teilchen mit Spin s folgende $2s+1$ Werte an,

$$m_s\in\{-s,-s+1,\dots,s\}, \tag{2.54}$$

insbesondere für Elektronen oder Protonen die Werte $\pm\frac{1}{2}$. Die mittlere Dichte der Einteilchenniveaus im $\boldsymbol{k}$-Raum beträgt demnach

$$dN = (2s+1)\frac{V}{(2\pi)^3}\,\mathrm{d}^3k, \tag{2.55}$$

wobei der Faktor $(2s+1)$ berücksichtigt, dass es für jeden Wellenzahlvektor $\boldsymbol{k}$ genau $2s+1$ verschiedene Spin-Zustände gibt. Der Grundzustand des freien Fermigases bei $T=0$ wird, wie oben diskutiert, durch ein antisymmetrisiertes Produkt von Einteilchenfunktionen beschrieben, wobei die energetisch tiefsten Einteilchenzustände besetzt sind. Die Trennungsfläche zwischen besetzten und unbesetzten Zuständen nennt man *Fermifläche*, und die entsprechende *Fermi-Energie* wird mit ε_{F} bezeichnet. Der Wert von ε_{F} folgt aus der Bedingung, dass die Gesamtzahl der besetzten Zustände gleich der Teilchenzahl N ist.

Aus der Dispersionsrelation (2.52) folgt

$$\mathrm{d}\varepsilon(\boldsymbol{k}) = \frac{\hbar^2}{m}k\mathrm{d}k \tag{2.56}$$

was nach Einsetzung in $\mathrm{d}^3k = \mathrm{d}\Omega_k\, k^2dk$ zu folgendem Zusammenhang zwischen dem Volumenelement im $\boldsymbol{k}-$Raum und $\mathrm{d}\varepsilon$ führt,

$$\mathrm{d}^3k = \mathrm{d}\Omega_k\frac{m}{\hbar^2}k\mathrm{d}\varepsilon = \frac{1}{2}\mathrm{d}\Omega_k\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\sqrt{\varepsilon}\,\mathrm{d}\varepsilon. \tag{2.57}$$

Hieraus ergibt nach sich Integration über $\mathrm{d}\Omega_k$ für die Anzahl Zustände pro Volumen und Energieintervall $[\varepsilon,\varepsilon+\mathrm{d}\varepsilon]$ die Formel

$$\frac{\mathrm{d}N}{V} = D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon, \quad \text{wobei} \quad D(\varepsilon) = \frac{2s+1}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\sqrt{\varepsilon} \tag{2.58}$$

die *Spektraldichte* bezeichnet. Nach Integration über ε finden wir folgenden Ausdruck für die Anzahl Zustände pro Volumen mit Energien im Intervall $[0,\varepsilon_{\mathrm{F}}]$,

$$\frac{N}{V} = \int\limits_0^{\varepsilon_{\mathrm{F}}} D(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon \equiv \left(\frac{\varepsilon_{\mathrm{F}}}{\gamma}\right)^{3/2} \quad \text{mit} \quad \gamma = \left(\frac{6\pi^2}{2s+1}\right)^{2/3}\frac{\hbar^2}{2m}. \tag{2.59}$$

Für Elektronen ist die eingeführte Konstante gleich

$$\gamma_{\mathrm{e}} \approx 5.842263 \text{ Joule}\cdot\mathrm{m}^2 \approx 0.364645 \text{ eV}\cdot\mathrm{nm}^2. \tag{2.60}$$

Für ein Fermigas im Grundzustand sind die N Zustände mit Energien bis zur Fermi-Energie besetzt und die Zustände mit größeren Energien bleiben unbesetzt. Deshalb ist N/V gleich die Anzahldichte n des Fermigases im Grundzustand. Die Auflösung nach der Fermi-Energie führt auf

$$\varepsilon_\mathrm{F} \equiv \frac{1}{2m}\, p_\mathrm{F}^2 = \gamma n^{2/3}, \tag{2.61}$$

so dass die Anzahldichte mit der dritten Potenz des Fermi-Impulses zunimmt. Für die Energiedichte des freien Fermigases findet man

$$\frac{E}{V} = \int_0^{\varepsilon_\mathrm{F}} \varepsilon\, D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon = \frac{3}{5}\gamma\, n^{5/3}. \tag{2.62}$$

Dies ist gleich der inneren Energiedichte des Gases bei Temperatur Null. Also ist die *innere Energie* bei Temperatur Null

$$U(T=0) = E = \frac{3}{5}\gamma\, N n^{2/3} = \frac{3}{5} N\varepsilon_\mathrm{F}. \tag{2.63}$$

Ein *ideales Fermigas* im Grundzustand widersetzt sich einer Kompression, da seine Energie mit abnehmendem Volumen zunimmt. Will man ein ultrakaltes Fermigas verdichten dann muss den Teilchen Energie zugeführt werden. Aus der thermodynamischen Definition des Druckes folgt

$$p = -\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_N \overset{(2.63)}{=} \frac{2}{3}\frac{U}{V} = \frac{2}{5}\gamma n^{5/3} \tag{2.64}$$

und man findet für den *Kompressionsmodul*

$$B = -V\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_N = \frac{10}{9}\frac{U}{V} = \frac{2}{3} n\varepsilon_\mathrm{F}. \tag{2.65}$$

Betrachten wir zum Beispiel das kubisch raumzentrierte (bcc) Kalium mit Gitterkonstanten $a = 0.525\,\mathrm{nm}$. Jedes Atom liefert ein Elektron zum freien Elektronengas und damit liefert jede Elementarzelle 2 Elektronen. Für die Anzahldichte, Fermi-Energie und Druck ergeben sich die Werte

$$n = \frac{2}{a^3} = 13.82 \cdot \frac{1}{(\mathrm{nm})^3}, \quad \varepsilon_\mathrm{F} = 2.10\ \mathrm{eV} \quad \text{und} \quad p = 1.85\,\mathrm{GPa}, \tag{2.66}$$

mit $1\mathrm{GPa}{=}10^9\,\mathrm{N/m}^2$. Der isotherme Kompressionsmodul ist

$$B \approx 3.2\ \mathrm{GPa}. \tag{2.67}$$

Einige Kompressionsmodule in Giga-Pascal sind in der folgenden Tabelle festgehalten:

Element	Li	Na	K	Rb	Cs	Cu	Ag	Al
B (freie Elektronen)	23.9	9.23	3.19	2.28	1.54	63.8	34.5	228
B (gemessen)	11.5	6.42	2.18	1.92	1.43	134.3	99.9	76

Die Tabelle macht deutlich, dass das Elektronengas einen wesentlichen Beitrag zum Kompressionsmodul B von Metallen liefert.

Wir wollen eine einfache kernphysikalische Anwendung dieser Formeln diskutieren. Durch Streuexperimente von hochenergetischen Elektronen an Kernen weiß man, dass diese eine annähernd konstante (Protonen)Dichte besitzen. Ihr Volumen ist etwa proportional zur Massenzahl A. Für die Dichte im Zentrum ergibt sich

$$n(0) = 0.17\,\frac{\text{Nukleonen}}{(\text{Fermi})^3}. \tag{2.68}$$

Approximieren wir nun die Protonen und Neutronen im Kern durch ein ideales Fermigas, und setzen wir $n(0) \approx n$ in die Formel (2.61) ein, so findet man für $N = Z = A/2$ etwa folgende maximale kinetische Energie eines Teilchens:

$$\varepsilon_{\text{F}} = \frac{1}{2m}\,p_{\text{F}}^2 \approx 37\,\text{MeV} \tag{2.69}$$

Für die gesamte kinetische Energie des Nukleonen-Gases erhält man gemäß (2.63)

$$E = \frac{3}{5}\big(N\varepsilon_{\text{F}}^n + Z\varepsilon_{\text{F}}^p\big) \approx \frac{3}{5}A\varepsilon_{\text{F}}. \tag{2.70}$$

Aus der Größe der Fermi-Energie folgt, dass der Kern unter normalen Bedingungen als ein stark entartetes Fermi-Gas betrachtet werden kann. Erst bei Anregungsenergien von $A\varepsilon_{\text{F}} \approx$GeV wird ein beträchtlicher Teil der Nukleonen angeregt sein.

Betrachten wir als drittes Beispiel die Elektronen in einem *weissen Zwerg*. In einer ersten Näherung darf man die Kerne und Elektronen jeweils als freie Teilchen betrachten. Würden wir die Elektronen als klassisches ideales Gas mit Temperatur T behandeln, so wäre nach den Gesetzen der klassischen Statistischen Physik ihre Anzahldichte

$$n_{\text{kl,e}}(T) = \frac{2}{h^3}\,(2\pi mkT)^{3/2} = 4.83\cdot 10^{15}\frac{T^{3/2}}{\text{cm}^3},\quad T \text{ in Kelvin.} \tag{2.71}$$

Wir vergleichen mit der Elektronendichte von *Sirius B*, dem Begleitstern von Sirius. Die zentrale Massendichte und Temperatur dieses weissen Zwergs sind

$$\rho_c \approx 3.3 \cdot 10^7 \frac{\mathrm{g}}{\mathrm{cm}^3} \quad , \quad T_c \approx 2.2 \cdot 10^7 \;\mathrm{K} \tag{2.72}$$

und die tatsächliche Elektronendichte

$$n_\mathrm{e} \approx \frac{\rho_c}{m_p} = 2 \cdot 10^{31} \frac{1}{\mathrm{cm}^3} \tag{2.73}$$

ist sehr viel größer als die Dichte eines idealen Gases bei T_c,

$$n_{\mathrm{kl,e}}(T_c) \approx 5 \cdot 10^{26} \frac{1}{\mathrm{cm}^3} \ll n_\mathrm{e}. \tag{2.74}$$

Deshalb sind die Elektronen in Sirius B in guter Näherung vollständig entartet und mit (2.73) ist die Fermienergie etwa $\varepsilon_F \approx 2,7$ MeV. Sie werden durch das Pauli-Verbot zu höheren Impulsen gezwungen als der Maxwell-Boltzmann-Verteilung entspräche. Die klassische Anzahldichte der Protonen

$$n_{\mathrm{kl,p}}(T_c) = \left(\frac{m_p}{m_e}\right)^{3/2} n_{\mathrm{kl,e}}(T_c) \approx 4.5 \cdot 10^{31} \frac{1}{\mathrm{cm}^3} \tag{2.75}$$

ist dagegen größer als $n_\mathrm{p} = n_\mathrm{e}$ und man darf die Protonen als nicht-entartetes ideales Gas behandeln. Man kann leicht abschätzen, dass im Innern des Sirius-Begleiters $p_\mathrm{F} \approx mc$ ist. Also bilden die Elektronen im Zentrum ein *relativistisches* und entartetes Fermigas.

2.2.4 Thomas-Fermi Näherung

Zur Bestimmung der Elektronenverteilung in großen Atomen verwendet man oft das *statistische Verfahren von* THOMAS *und* FERMI [1, 2]. Mit dieser Methode kann man allgemeine Eigenschaften von Atomen wie *Ionisierungsenergie* oder *Polarisierbarkeit* verstehen. Sie kann auch auf Moleküle, Kristalle, Atomkerne, das Elektronengas in weißen Zwergen oder andere Vielteilchensysteme angewandt werden. Wegen der großen Anzahl Elektronen spürt jedes Elektron etwa dasselbe mittlere Potential, erzeugt durch die anderen Elektronen und den Kern. Die meisten Elektronen besetzen hochenergetische Zustände mit großen Hauptquantenzahlen. Deshalb ist ihre Wellenlänge klein verglichen mit den atomaren Dimensionen und das Potential ändert sich nur unwesentlich über eine Elektronenwellenlänge. Es ist also plausibel anzunehmen, dass in Volumenelementen mit nahezu konstantem Potential viele Elektronen enthalten sind. Deren Zustände werden dann durch *lokal ebene Wellen* approximiert und die kinetische Energie des Gases wird dann in guter

Näherung durch (2.62) beschrieben. Allerdings wird seine Dichte, oder wegen (2.55) seine Fermi-Energie, auch ortsabhängig sein.

Sei nun $n(\boldsymbol{x})$ die Dichte des Elektronengases im Feld des Kerns der Kernladungszahl Z. Die Energie des Gases ist näherungsweise

$$E[n] = \frac{3\gamma}{5}\int \mathrm{d}^3x\, n^{5/3}(\boldsymbol{x}) - Ze^2\int \mathrm{d}^3x\,\frac{n(\boldsymbol{x})}{|\boldsymbol{x}|} + \frac{e^2}{2}\int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3y\,\frac{n(\boldsymbol{x})n(\boldsymbol{y})}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}. \tag{2.76}$$

Der erste Term ist die Energie des freien Elektronengases, der zweite die Coulombenergie im Feld des Atomkerns und der letzte die Elektron-Elektron Wechselwirkungsenergie. Bei der späteren Diskussion der genaueren *Hartree-Fock-Näherung* werden wir besser verstehen, welche Terme in $E[n]$ vernachlässigt wurden.

Es ist nun zu erwarten, dass die tatsächlich realisierte Elektronendichte n die Energie minimiert. Wegen der Teilchenerhaltung (bzw. Ladungsneutralität) darf sich bei der Variation von n die Teilchenzahl nicht ändern. Wir haben bei der Minimierung der Energie die *Nebenbedingung*

$$\int \mathrm{d}^3x\; n(\boldsymbol{x}) = N \tag{2.77}$$

zu beachten. Diese kann mit Hilfe eines Lagrangeschen Multiplikators μ berücksichtigt werden. Also minimieren wir

$$E[n] - \mu\left(\int \mathrm{d}^3x\; n(\boldsymbol{x}) - N\right). \tag{2.78}$$

Bei einer Variationen der Elektronendichte ändert sich die Energie gemäß

$$\delta E[n] = \int \mathrm{d}^3x\,\delta n(\boldsymbol{x})\left(\gamma n^{2/3}(\boldsymbol{x}) - \frac{Ze^2}{|\boldsymbol{x}|} + e^2\int \mathrm{d}^3y\frac{n(\boldsymbol{y})}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\right), \tag{2.79}$$

und wir finden folgende Bestimmungsgleichung für die minimierende Elektronendichte,

$$\gamma n^{2/3}(\boldsymbol{x}) - \frac{Ze^2}{|\boldsymbol{x}|} + e^2\int \mathrm{d}^3y\frac{n(\boldsymbol{y})}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|} = \mu. \tag{2.80}$$

Dies ist die gesuchte *Thomas-Fermi-Gleichung* für $n(\boldsymbol{x})$. Der erste Term ist die ortsabhängige Fermi-Energie eines Elektrons, der zweite die Coulomb-Energie im Kernfeld und der letzte die Coulombwechselwirkung mit dem mittleren Feld der restlichen Elektronen. Der Multiplikator μ ist die Gesamtenergie eines Elektrons. Diese darf nicht positiv sein. Andernfalls würde das Elektron ins Unendliche verschwinden. Im Folgenden setzen wir

$\mu = -e\phi_0$.

Das *Thomas-Fermi-Potential* ϕ ist das von Kern und Elektronenwolke erzeugte elektrische Potential,

$$\phi(\boldsymbol{x}) = \frac{Ze}{|\boldsymbol{x}|} - e\int \mathrm{d}^3y\, \frac{n(\boldsymbol{y})}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}. \tag{2.81}$$

Damit nimmt die Thomas-Fermi-Gleichung folgende einsichtige Form an,

$$\gamma n^{2/3}(\boldsymbol{x}) = \varepsilon_{\mathrm{F}}(\boldsymbol{x}) = e\phi(\boldsymbol{x}) - e\phi_0. \tag{2.82}$$

Sie beschreibt wie die kinetische Energie eines Elektrons $\varepsilon_{\mathrm{F}}(\boldsymbol{x})$ vom Ort abhängen muss, damit die Energiebilanz (inklusive Coulombenergien) stimmt.

Das Thomas-Fermi Potential ϕ erfüllt die Poisson-Gleichung

$$\Delta\phi(\boldsymbol{x}) = -4\pi\big(Ze\delta(\boldsymbol{x}) - en(\boldsymbol{x})\big) = 4\pi e n(\boldsymbol{x}) \qquad \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}. \tag{2.83}$$

Setzen wir diese Gleichung in (2.82) ein, dann finden wir

$$\Delta\phi = 4\pi e\left(\frac{e}{\gamma}\right)^{3/2}(\phi-\phi_0)^{3/2}. \tag{2.84}$$

Wegen (2.82) verschwindet die Elektronendichte n für $\phi(\boldsymbol{x}) = \phi_0$ und deshalb bestimmt diese Gleichung den Rand des Atoms. An Orten mit $\phi(\boldsymbol{x}) < \phi_0$ wird $n(\boldsymbol{x})$ Null gesetzt, damit die Elektronen dort keine negative kinetische Energie haben. Für ein *neutrales Atom* verschwindet das Potential am 'Rande' des Atoms und deshalb verschwindet die Konstante ϕ_0. Umgekehrt ist sie für ein Ion ungleich Null. Wir suchen nun *radialsymmetrische Lösungen* der Thomas-Fermi Gleichung für neutrale Atome. Dazu spalten wir das Coulombfeld des Kerns ab und schreiben

$$\phi(r) = \frac{Ze}{r}\chi(r), \tag{2.85}$$

wobei χ die *Abschirmung* des Kernpotentials durch das Elektronengas beschreibt. Einsetzen in (2.84) mit $\phi_0 = 0$ führt unmittelbar auf die Radialgleichung

$$\frac{Ze}{r}\chi'' = 4\pi e\left(\frac{Ze^2}{\gamma r}\chi\right)^{3/2}. \tag{2.86}$$

Nun reskalieren wir noch den Abstand zum Kern gemäß

$$r = \frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3} Z^{-1/3} \cdot a_0 \cdot s = 0.88\,\frac{a_0}{Z^{1/3}}\,s \quad \text{wobei} \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \tag{2.87}$$

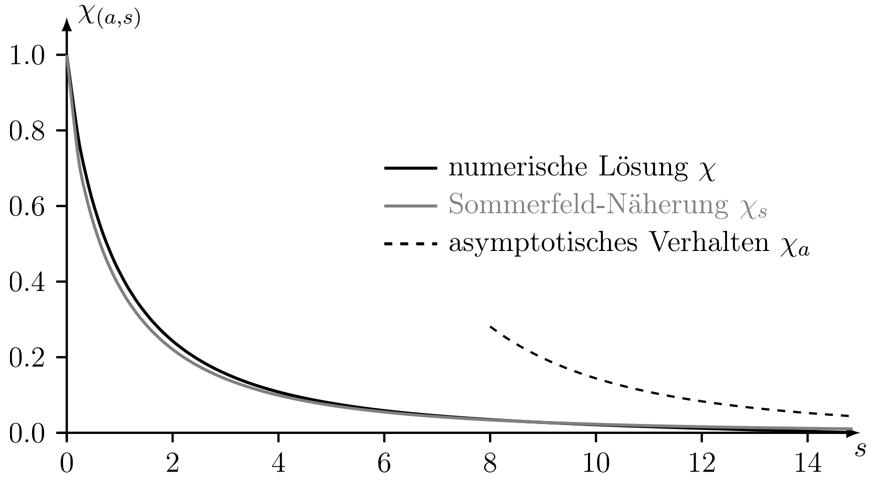
den Bohrschen Radius bezeichnet, und finden folgende *universelle Gleichung* für χ:

$$\frac{\mathrm{d}^2}{ds^2}\chi = s^{-1/2}\chi^{3/2} \qquad \text{mit} \quad \chi(\infty) = 0 \quad \text{und} \quad \chi(0) = 1. \tag{2.88}$$

Für großes s muss χ verschwinden, da das Elektronengas an den Kern gebunden ist. Für kleine Radien spüren die Elektronen nur noch das Kernpotential, so dass $\phi \to Ze/r$ bzw. $\chi \to 1$ gelten muss für $r \to 0$. Diese nichtlineare Gleichung muss numerisch gelöst werden und die Lösung hat die asymptotische Form[1]

$$\begin{aligned}
\chi(s) &\approx \chi_a(s) = \frac{144}{s^3} && \text{für} \quad s \to \infty \\
\chi(s) &\approx 1 - 1.5881\,s + \frac{4}{3}\,s^{3/2} + \dots && \text{für} \quad s \to 0.
\end{aligned} \tag{2.89}$$

Die numerische Lösung ist in der folgenden Abbildung zu sehen.



Die Thomas-Fermi-Gleichung (2.88) hat die spezielle und am Ursprung singuläre Lösung

$$\chi(s) = \frac{144}{s^3}, \tag{2.90}$$

die als gestrichelte Linie in der Abbildung gezeigt ist. Mithilfe von asymptotischen Me-

[1] Ein genauerer Wert für die Steigung am Ursprung ist $\chi'(0) = -1.588\,071\,022\,611\,375\,321\,718\,685$, siehe [7].

thoden erzeugte Sommerfeld folgende analytische Näherung der exakten Lösung [3]

$$\chi_s(s) = \frac{x}{(1+x^{1/\lambda})^\lambda}, \qquad x = \frac{144}{s^3}, \quad \lambda = 3,886\,. \tag{2.91}$$

Diese hat offensichtlich das korrekte asymptotische Verhalten für große s in (2.89). Wie man in der Abbildung sieht, unterschätzt sie aber die exakte Lösung für kleine Argumente.

Für die Elektronendichte $n \approx \Delta\phi$ findet man die asymptotische Form

$$\begin{aligned} n(s) &\approx s^{-6} \quad &\text{für} \quad s \to \infty \\ n(s) &\approx s^{-3/2} \quad &\text{für} \quad s \to 0. \end{aligned} \tag{2.92}$$

In der Thomas-Fermi-Approximation ist die Ausdehnung der Atome unendlich, was nicht ganz der Realität entspricht.

In einer der Aufgaben in Abschnitt 2.3 wird gezeigt, dass für die das Energiefunktional minimierende Elektronendichte $n_{\min}$ ein Virialtheorem gilt. Die bedeutet, dass die (negative) potentielle Energie $V = V_{ne} + V_{ee}$ dem Betrage nach doppelt so groß wie die kinetische Energie ist,

$$2T[n_{\min}] + V[n_{\min}] = 0\,. \tag{2.93}$$

Ebenda wird argumentiert, dass die kinetische Energie, die Coulomb-Energie der Elektronen im Feld des Kerns V_{ke} und die potentielle Energie aufgrund der Abstoßung zwischen den Elektronen V_{ee} folgende Form haben,

$$T = \frac{3B}{7}, \quad V_{ke} = -B, \quad V_{ee} = \frac{B}{7}\,. \tag{2.94}$$

Dabei ist

$$B = -\frac{(Ze)^2}{b}\,\chi'(0) \approx 48.8\,\text{eV} \cdot Z^{7/3}\,. \tag{2.95}$$

Die Konstante b mit der Dimension einer Länge ist die in $r = bs$ eingeführte Längeneinheit. Beim Beweis muß die interessante Konsistenzbedingung

$$\int_0^\infty \mathrm{d}s \left(\frac{\mathrm{d}\chi}{\mathrm{d}s}\right)^2 = -\frac{2}{7}\chi'(0) \tag{2.96}$$

für die Lösung der TF-Gleichung (2.88) angenommen werden. Ohne diese Relation könnte das Virialtheorem nicht gelten. Mit den bekannten Werten von b und $\chi'(0)$ findet man nun für die totale Bindungsenergie eines Atoms der Kernladungszahl Z den Wert

$$E_B = T + V_{ne} + V_{ee} \approx -20.9\,\mathrm{eV}\,Z^{7/3}\,. \tag{2.97}$$

Sie reproduziert die Z-Abhängigkeit der „empirische Beziehung“ $E_B \approx -16\,\mathrm{eV}\cdot Z^{7/3}$.

Das Thomas-Fermi-Modell macht einige einfache Vorhersagen über die Atomstruktur: Da χ keine atomaren Parameter enthält ist das Profil aller Atome bis auf eine Skalierung identisch. Die Abhängigkeit der Parameter findet man leicht wenn man s durch r ersetzt. Da $s \approx Z^{1/3} r$ ist, werden die Atome mit wachsendem Z kleiner. Für ein festes s wächst die Amplitude des Potentials ϕ wie $Z^{4/3}$ und die Elektronendichte skaliert bei festem s wie Z^2. Daraus schließt man, dass der mittlere Elektronenimpuls wie $Z^{2/3}$ anwächst.

Ein grundsätzlicher Fehler, den man bei der Pulverisierung der Atomelektronen begeht, besteht in Folgendem: In der Elektron-Elektron Wechselwirkungs-Energie

$$V_{ee} = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\frac{e^2}{r_{ij}} \tag{2.98}$$

werden die der *Selbstenergie* entsprechenden Terme mit $i = j$ nicht mitgezählt. Rechnen wir mit pulverisierten Ladungsverteilungen statt mit Punktteilchen, so wird diese Wechselwirkung zu

$$V_{ee} = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\int \frac{n_i(\boldsymbol{x})n_j(\boldsymbol{y})}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3y. \tag{2.99}$$

In der Thomas-Fermi-Approximation kennen wir aber nicht die jedem einzelnen Elektron zugeordnete Dichte-Verteilung, sondern nur die mittlere Gesamtdichte n. Wir wissen also nicht, wie wir die Selbstenergie der Elektronen weglassen sollen. Man rechnet also die Rückwirkung der Ladungen auf sich selbst mit. Die Frage ist nun, wie man diese Rückwirkung ausschalten kann. Den Weg dazu hat Fock gezeigt, indem er den Austausch-Effekt berücksichtigte [4].

2.2.5 Thomas-Fermi Atome

In der Thomas-Fermi-Approximation behandelt man die Elektronen als unabhängige Teilchen, die sich im radial-symmetrischen Thomas-Fermi-Potential bewegen:

$$H_0 = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m} + V_{\mathrm{TF}}(r_i)\right) \quad \text{mit} \quad V_{\mathrm{TF}}(r) = \frac{Ze^2}{r}\chi(s). \tag{2.100}$$

Die Wechselwirkung eines Elektrons mit den anderen Elektronen und dem Kern wird also durch die Wechselwirkung des Elektrons mit dem durch diese Teilchen erzeugten mittleren Feld approximiert. Die resultierende effektive Einteilchentheorie haben wir im letzten Semester ausführlich untersucht. Die Einteilchenzustände sind

$$\psi_{n\ell m_\ell}(\boldsymbol{x}, m_s) = \frac{u_{n\ell}(r)}{r} Y_{\ell m_\ell}(\theta, \varphi)\chi_{m_s}, \tag{2.101}$$

wobei $n = 1, 2, \dots$ die Hauptquantenzahl, $\ell = 0, \dots, n-1$ die Drehimpulsquantenzahl, $-\ell \leq m_\ell \leq \ell$ die magnetische Quantenzahl und $m_s = \pm\frac{1}{2}$ die dritte Komponente des Elektronenspins ist. Im Gegensatz zum Wasserstoffatom hängen die Einteilchenenergien nun auch vom Drehimpuls ab, da V_{TF} kein Coulombpotential ist,

$$\text{Energie} = \varepsilon_{n\ell} \quad , \quad \text{Entartung} = 2(2\ell + 1). \tag{2.102}$$

Wie sieht nun der Grundzustand in der TF-Approximation aus? Betrachten wir zum Beispiel Stickstoff, $N = 7$. Die numerische Auswertung der Schrödingergleichung mit Potential V_{TF} zeigt, dass

$$\varepsilon_{1s} < \varepsilon_{2s} < \varepsilon_{2p} < \dots \tag{2.103}$$

gilt. Im Grundzustand sind die 7 tiefsten Niveaus besetzt. Wegen der Spinentartung sind also folgende Niveaus besetzt:

$$(1s)^2(2s)^2(2p)^3. \tag{2.104}$$

Der Exponent soll andeuten, wie viele Elektronen im Stickstoffatom die entsprechende Hauptquantenzahl und den entsprechenden Bahndrehimpuls besitzen. Also sind 2 Elektronen im $1s$-Zustand und damit ist die entsprechende Schale, die K-Schale, gefüllt. Genauso ist die Schale der $2s$-Elektronen, die L-Schale, gefüllt. Dagegen ist die M-Schale der $2p$-Zustände nur halb gefüllt, denn diese Schale kann $2 \cdot 3 = 6$ Elektronen aufnehmen. Der Entartungsgrad und die Parität des Grundzustandes sind

$$\binom{6}{3} = 20 \quad \text{und} \quad 1^2 \cdot 1^2 \cdot (-1)^3 = -1. \tag{2.105}$$

Offensichtlich sind die Konfigurationen mit lauter vollbesetzten Teilschalen nicht entartet. Daraus folgt aber auch, dass der Gesamtbahndrehimpuls und Gesamtspin der vollen Teilschalen verschwinden muss (andernfalls gäbe es eine Entartung). Man braucht also die vollen Schalen bei der Bestimmung von Bahndrehimpuls, Spin und Parität des Atoms nicht zu berücksichtigen.

Latter hat die Einteilchenenergien im Thomas-Fermi-Potential (bei großen Z muss man V_{TF} noch korrigieren, da relativistische Effekte wichtig werden) bestimmt [5]. Die folgende

Tabelle vergleicht die Resultate für die Thomas-Fermi-Atome mit qualitativen experimentellen Fakten:

Z	Thomas-Fermi	Experiment
1-18	$1s\,2s\,2p\,3s\,3p$	$L = S = 0$ für $Z = 2, 4, 10, 12, 18$
19-20	$\varepsilon_{4s} < \varepsilon_{3d}$	$L = 0$ für $Z = 19$; $L = S = 0$ für $Z = 20$
23	$\varepsilon_{4s} \approx \varepsilon_{3d}$	Anomalie Cr
31	$\varepsilon_{4p} < \varepsilon_{5s}$	$L = 1$
39	$\varepsilon_{5s} < \varepsilon_{4d}$	$Z = 41 \dots 45$: beide Schalen nicht voll besetzt
49	$\varepsilon_{5p} < \varepsilon_{4f}$	$5p$ wird zuerst gefüllt, $L = 1$
60	$\varepsilon_{4f} \approx \varepsilon_{5d}$	$Z > 57$: $4f$-Schale wird gefüllt
>60	$\varepsilon_{4f} < \varepsilon_{5d}$	

Allerdings können Thomas-Fermi-Atome keine chemische Bindung eingehen, da die Energie zunimmt wenn sich zwei „Thomas-Fermi-Atome“ nähern!

2.2.6 Hartree-Fock-Näherung

Als eine von vielen Anwendungen des Variationsprinzips von Rayleigh und Ritz wollen wir die Hartree-Fock-Näherung besprechen. Hier sucht man die beste Approximation des Grundzustandes durch Wellenfunktionen vom Typ

$$\psi^{\mathrm{SD}}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \psi_1(\xi_1) & \psi_1(\xi_2) & \dots & \psi_1(\xi_N) \\ \psi_2(\xi_1) & \psi_2(\xi_2) & \dots & \psi_2(\xi_N) \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \psi_N(\xi_1) & \psi_N(\xi_2) & \dots & \psi_N(\xi_N) \end{pmatrix}, \tag{2.106}$$

wobei die ψ_i orthonormierte Einteilchenwellenfunktionen sind. Genau genommen ist die Wellenfunktion eines wechselwirkenden Systems von Elektronen natürlich kein antisymmetrisiertes Produkt von Einteilchen-Wellenfunktionen – im Allgemeinen kann sie nur durch eine *unendliche* Summe von Produktzuständen approximiert werden. Die Hartree-Fock-Methode des selbstkonsistenten Feldes berücksichtigt nur den Hauptanteil der Wechselwirkung zwischen Elektronen, und hier insbesondere die Austauschterme.

Nach dem Variationsprinzip müssen wir nun diejenige Produktfunktion finden, die $\langle\psi|H|\psi\rangle$ unter der Nebenbedingung $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ minimiert.

Wir wollen uns zuerst überlegen, was der Erwartungswert eines *Einteilchenoperators*

$$A^{(1)} = \sum_i A(i), \tag{2.107}$$

in diesen antisymmetrischen Produktzuständen ist. Dabei soll $A(i)$ nur auf das i'te Teilchen wirken. Die kinetische Energie der Elektronen ist ein derartiger Operator. Für 2 Fermionen ist

$$A^{(1)}|\psi^{\rm SD}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|A\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle + |\psi_1\rangle \otimes |A\psi_2\rangle - |A\psi_2\rangle \otimes |\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle \otimes |A\psi_1\rangle\Big) \tag{2.108}$$

und für orthonormierte Einteilchenzustände ergibt sich dann für den Erwartungswert

$$\langle\psi^{\rm SD}|A^{(1)}|\psi^{\rm SD}\rangle = \langle\psi_1|A|\psi_1\rangle + \langle\psi_2|A|\psi_2\rangle. \tag{2.109}$$

Auf einen antisymmetrisierten Produktzustand für N identische Fermionen

$$|\psi^{\rm SD}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_\pi \mathrm{sign}(\pi)\,|\psi_{\pi(1)}\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_{\pi(N)}\rangle \tag{2.110}$$

wirkt ein Einteilchenoperator $A^{(1)}$ folgendermaßen:

$$A^{(1)}|\psi^{\rm SD}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{i,\pi} \mathrm{sign}(\pi)\,|\psi_{\pi(1)}\rangle \otimes \cdots \otimes |A\psi_{\pi(i)}\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_{\pi(N)}\rangle. \tag{2.111}$$

Für orthonormierte Einteilchenvektoren $|\psi_i\rangle$ verschwinden die Erwartungswerte $\langle\psi^{\rm SD}|A|\psi^{\rm SD}\rangle$ falls die Permutationen in $\psi^{\rm SD}$ und $A\psi^{\rm SD}$ verschieden sind. Deshalb ist

$$\langle\psi^{\rm SD}|A^{(1)}|\psi^{\rm SD}\rangle = \frac{1}{N!}\sum_\pi\sum_i \langle\psi_{\pi(i)}|A|\psi_{\pi(i)}\rangle \tag{2.112}$$

Für jede Permutation π ist $\{\pi(1),\dots,\pi(N)\}$ nur eine Umordnung von $\{1,\dots,N\}$ und wir erhalten $N!$ identische Beiträge. Deshalb finden wir für den Erwartungswert von $A^{(1)}$

$$\langle\psi^{\rm SD}|A^{(1)}|\psi^{\rm SD}\rangle = \sum_{i=1}\langle\psi_i|A|\psi_i\rangle\,. \tag{2.113}$$

Der Erwartungswert eines Einteilchenoperators $A^{(1)}: \mathfrak{h}\otimes\cdots\otimes\mathfrak{h} \to \mathfrak{h}\otimes\cdots\otimes\mathfrak{h}$ in einem antisymmetrisierten Produktzustand $|\psi^{\rm SD}\rangle$ ist die Summe der Erwartungswerte in den beteiligten Einteilchenzuständen.

Für N Fermionen entwickeln wir die Einteilchenzustandsvektoren nach der Eigenbasis von Ort und Spin,

$$|\psi_i\rangle = \sum_{m_s} \int \mathrm{d}^3x\, \psi_i(\boldsymbol{x}, m_s)|\boldsymbol{x}, m_s\rangle \quad \langle\psi_i|\psi_j\rangle = \sum_{m_s} \int \mathrm{d}^3x\, \psi_i^*(\boldsymbol{x}, m_s)\psi_j(\boldsymbol{x}, m_s)\,. \tag{2.114}$$

Für Elektronen ist der Eigenwert m_s der dritten Komponente des Spins zweiwertig. Dann schreibt sich wird der Erwartungswert der kinetischen Energie $T = \sum \boldsymbol{p}_i^2/2m$ gemäß

$$\langle\psi^{\mathrm{SD}}|T|\psi^{\mathrm{SD}}\rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\sum_i\sum_{m_s}\int \mathrm{d}^3x\,\big|\nabla\psi_i(\boldsymbol{x}, m_s)\big|^2, \tag{2.115}$$

und der Erwartungswert der potentiellen Energie V_c aufgrund der Wechselwirkung der Elektronen mit dem Kern ($A = -Ze^2/r$) ist

$$\langle\psi^{\mathrm{SD}}|V_c|\psi^{\mathrm{SD}}\rangle = -Ze^2\sum_i\sum_{m_s}\int \mathrm{d}^3x\,\frac{|\psi_i(\boldsymbol{x}, m_s)|^2}{r}. \tag{2.116}$$

Nun wenden wir uns der Elektron-Elektron-Wechselwirkung

$$V_{ee} = \frac{e^2}{2}\sum_{i\neq j}\frac{1}{r_{ij}} \tag{2.117}$$

zu. r_{ij} ist ein *Zweiteilchenoperator* der auf die Freiheitsgrade zweier Teilchen wirkt. Ein allgemeiner Zweiteilchenoperator hat die Form

$$A^{(2)} = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} A(i,j), \tag{2.118}$$

wobei $A(i,j)$ nur auf die Teilchen i und j einwirkt. Deshalb wirkt er auf einen antisymmetrisierten Produktzustand gemäß

$$\begin{aligned} A^{(2)}|\psi^{\mathrm{SD}}\rangle = \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{i\neq j}\sum_{\pi}\mathrm{sign}(\pi)\,A(i,j)\Big(|\psi_{\pi(1)}\rangle\otimes\cdots\otimes|\psi_{\pi(i)}\rangle\otimes \\ \cdots\otimes|\psi_{\pi(j)}\rangle\otimes\cdots\otimes|\psi_{\pi(N)}\rangle\Big)\,, \end{aligned} \tag{2.119}$$

wobei $A(i,j)$ nur auf $|\psi_{\pi(i)}\rangle$ und $|\psi_{\pi(j)}\rangle$ in dem i'ten und j'ten Faktor des Hilbert-Raums $\mathfrak{h}\otimes\cdots\otimes\mathfrak{h}$ nicht-trivial wirkt. Für orthonormierte Einteilchenzustände ist das Skalarprodukt des Vektors (2.110) mit dem Bildvektor (2.119) nur ungleich Null, wenn die beiden Permutationen in Vektor und Bildvektor bis auf eine mögliche Transposition von i und j

übereinstimmen. Entsprechend ergibt sich

$$\langle\psi^{\rm SD}|A^{(2)}|\psi^{\rm SD}\rangle = \frac{1}{2}\frac{1}{N!}\sum_\pi\sum_{i\neq j}\big\langle\psi_{\pi(i)}\otimes\psi_{\pi(j)} - \psi_{\pi(j)}\otimes\psi_{\pi(i)}\big|A\big|\psi_{\pi(i)}\otimes\psi_{\pi(j)}\big\rangle$$

Für jedes feste π durchlaufen $\{\pi(i),\pi(j)\}$ all möglichen Paare von ungleichen Indizes, so dass jede Permutation denselben Beitrag liefert und schlussendlich gilt

$$\begin{aligned}\langle\psi^{\rm SD}|A^{(2)}|\psi^{\rm SD}\rangle &= \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\big\langle\psi_i\otimes\psi_j\big|A\big|\psi_i\otimes\psi_j\big\rangle\\ &-\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\big\langle\psi_j\otimes\psi_i\big|A\big|\psi_i\otimes\psi_j\big\rangle.\end{aligned}\tag{2.120}$$

Dieses allgemeine Resultat können wir auf den Potentialterm V_{ee} für die Elektron-Elektron-Wechselwirkung anwenden. Sammeln wir nun alle Terme ein, so finden wir für den Erwartungswert des Hamilton-Operators für N identische nicht-relativistische Fermionen in einem antisymmetrisierten Produktzustand den Ausdruck

$$\begin{aligned}\langle\psi^{\rm SD}|H|\psi^{SD}\rangle &= \sum_{i,m_s}\int \mathrm{d}^3x\left(\frac{\hbar^2}{2m}|\nabla\psi_i(\boldsymbol{x},m_s)|^2 - Ze^2\,\frac{n_i(\boldsymbol{x},m_s)}{r}\right)\\ &+\frac{e^2}{2}\sum_{(i,m_s)\neq(j,m_s')}\int \mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3y\left(\frac{n_i(\boldsymbol{x},m_s)n_j(\boldsymbol{y},m_s')}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\right.\\ &\qquad\left.-\frac{\psi_i^\dagger(\boldsymbol{x},m_s)\psi_i(\boldsymbol{y},m_s')\psi_j^\dagger(\boldsymbol{y},m_s')\psi_j(\boldsymbol{x},m_s)}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\right),\end{aligned}\tag{2.121}$$

wobei wir die Abkürzung

$$n_i(\boldsymbol{x},m_s) = |\psi_i(\boldsymbol{x},m_s)|^2\tag{2.122}$$

benutzten. Bevor wir die optimalen Einteilchen-Wellenfunktionen charakterisieren, wollen wir prüfen, unter welchen weitergehenden Annahmen die Hartree-Fock-Näherung in die Thomas-Fermi-Näherung übergeht. Nimmt man an, dass die ψ_i lokal ebene Wellen sind, dann vereinfacht sich der kinetische Term in (2.115) zur kinetischen Energie eines idealen Fermigases mit ortsabhängiger Fermienergie. Nimmt man weiter an, dass die $n_i = n$ alle gleich sind und vernachlässigt zudem den letzten Term, den sogenannten Austauschterm, dann vereinfacht sich der Erwartungswert (2.121) zum Thomas-Fermi-Funktional, dessen Variation auf die Thomas-Fermi-Gleichung führt.

Geschlossene-Schalen in Hartree-Fock-Näherung

Man beachte, dass $i \neq j$ nicht bedeutet, dass ψ_i und ψ_j verschiedene Funktionen im Ortsraum sein müssen. Zum Beispiel könnte $\psi_1(\xi) = \phi(\boldsymbol{x})\chi_{m_s}$ und $\psi_2(\xi) = \phi(\boldsymbol{x})\chi_{m'_s}$ mit $m_s \neq m'_s$ sein. Wir wollen der Einfachheit halber alle Spins als gepaart annehmen, was natürlich nur bei einer geraden Anzahl von Elektronen möglich ist. Die Wellenfunktionen haben dann die Form

$$\begin{aligned} \psi_1(\xi) = \phi_1(\boldsymbol{x})\chi_\uparrow \quad &, \quad \psi_2(\xi) = \phi_1(\boldsymbol{x})\chi_\downarrow \\ &\vdots \\ \psi_{N-1}(\xi) = \phi_{\frac{N}{2}}(\boldsymbol{x})\chi_\uparrow \quad &, \quad \psi_N(\xi) = \phi_{\frac{N}{2}}(\boldsymbol{x})\chi_\downarrow\,. \end{aligned} \tag{2.123}$$

Um den Erwartungswert der Energie im antisymmetrisierten Produktzustand aufzuschreiben, führen wir die mittlere „kinetische Energie" und Dichte der p'ten Einteilchen-Wellenfunktion im Ortsraum ϕ_p ein

$$t_p(\boldsymbol{x}) = |\nabla\phi_p(\boldsymbol{x})|^2 \quad \text{und} \quad n_p(\boldsymbol{x}) = |\phi_p(\boldsymbol{x})|^2, \quad p = 1, 2\ldots, \frac{N}{2}\,. \tag{2.124}$$

Eine sorgfältige Behandlung der Spinfreiheitsgrade ergibt den Erwartungswert des Hamilton-Operators für Atome mit geschlossene Schalen:

$$\begin{aligned} \langle\psi^{\mathrm{SD}}|H|\psi^{\mathrm{SD}}\rangle = 2\sum_p \int \mathrm{d}^3x \left(\frac{\hbar^2}{2m} t_p(\boldsymbol{x}) - Ze^2\frac{n_p(\boldsymbol{x})}{r}\right) \\ + e^2 \sum_p \int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3y\,\frac{n_p(\boldsymbol{x})n_p(\boldsymbol{y})}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|} + 4e^2\sum_{p<q}\int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3y\,\frac{n_p(\boldsymbol{x})n_q(\boldsymbol{y})}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|} \\ - 2e^2\sum_{p<q}\int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3y\,\frac{\phi_p^\dagger(\boldsymbol{x})\phi_q(\boldsymbol{x})\phi_q^\dagger(\boldsymbol{y})\phi_p(\boldsymbol{y})}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}, \end{aligned} \tag{2.125}$$

wobei die letzte Summe die so-genannte *Austauschenergie* ist. Zum Beispiel enthält die Austauschenergie des Beryllium-Atoms mit 4 Elektronen nur einen Term. Die „optimalen" Einteilchenfunktionen minimieren nun $\langle\psi^{\mathrm{SD}}|H|\psi^{\mathrm{SD}}\rangle$ unter der Nebenbedingung $\langle\psi^{\mathrm{SD}}|\psi^{\mathrm{SD}}\rangle = 1$.

Hartree-Fock-Gleichungen

Wir kommen nun zur Herleitung der Hartree-Fock-Gleichungen. Die Variation des Erwartungswertes (2.121) ist

$$\begin{aligned}\delta\langle\psi^{\mathrm{SD}}|H|\psi^{\mathrm{SD}}\rangle = \sum_{i,m_s}\int \mathrm{d}^3x\,\delta\psi_i^\dagger(\xi)\Bigg\{\bigg(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta-\frac{Ze^2}{r}+e^2\sum_{m_s',j\neq i}\int \mathrm{d}^3y\frac{n_j(\boldsymbol{y},m_s')}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\bigg)\psi_i(\boldsymbol{x},m_s)\\ -e^2\sum_{m_s',j\neq i}\int \mathrm{d}^3y\,\frac{\psi_i(\boldsymbol{y},m_s')\psi_j^\dagger(\boldsymbol{y},m_s')}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\,\psi_j(\boldsymbol{x},m_s)\Bigg\}\,. \qquad (2.126)\end{aligned}$$

Die Nebenbedingungen $\int|\psi_i|^2=1$ berücksichtigen wir durch Einführung von N Lagrangeschen Multiplikatoren ε_i, ähnlich wie bei der Herleitung der Thomas-Fermi-Gleichung. Damit wird die Energie eines antisymmetrischen Produktzustandes minimal, falls folgende *Hartree-Fock-Gleichungen* erfüllt sind:

$$\begin{aligned}\bigg(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta-\frac{Ze^2}{r}+e^2\sum_{m_s',j\neq i}\int \mathrm{d}^3y\,\frac{n_j(\boldsymbol{y},m_s')}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}-\varepsilon_i\bigg)\,\psi_i(\boldsymbol{x},m_s)\\ =e^2\sum_{m_s',j\neq i}\int \mathrm{d}^3y\,\frac{\psi_i(\boldsymbol{y},m_s')\psi_j^\dagger(\boldsymbol{y},m_s')}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\,\psi_j(\boldsymbol{x},m_s)\,. \qquad (2.127)\end{aligned}$$

Bei der numerischen Lösung dieser gekoppelten nichtlinearen Integro-Differentialgleichungen verwendet man die Methode der sukzessiven Approximation. Als nullte Näherung wählt man die Eigenfunktionen ψ_i^0 des wasserstoffähnlichen Atoms mit Kernladungszahl Z und berechnet damit die Integrale in (2.127). Diese Werte für die Integrale setzt man nun in (2.127) ein und löst die resultierenden linearen Gleichungen zur Bestimmung der ersten Näherung ψ_i^1. Nun werden die Integrale mit der ersten Näherung berechnet und daraus kann man die zweite Näherung für die Einteilchenwellenfunktion ermitteln usw. Dieses Verfahren wird solange iteriert, bis es (hoffentlich) konvergiert. Für das Lithium und das Natrium-Atom sind die Gleichungen in der Arbeit von Fock und Petraschen gelöst worden [6]. Die Ergebnisse dieser Rechnungen stimmen mit dem Experiment gut überein. Seither ist das Verfahren vielfach zur Berechnung von Eigenfunktionen und Energien von komplizierteren Atomen verwendet worden. Die Lösung des Integrodifferentialgleichungssystems (2.127) ist eine numerische Herausforderung und die Konvergenz des iterativen Verfahrens hängt von den Ausgangsfunktionen ψ_i^0 ab.

2.3 Aufgaben zu Kapitel 2

Aufgabe 2.1: Relativistische Effekte

Wir wollen die aus der Vorlesung Quantenmechanik bekannte stationäre Störungstheorie anwenden. Rufen Sie sich diese wieder in Erinnerung (mit Hilfe Ihrer Notizen oder eines Lehrbuchs).

Der nicht-relativistische Hamilton-Operator eines Elektrons mit Masse m im sphärisch symmetrischen Coulomb Potential ist

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \,.$$

Berücksichtigen Sie nun in vereinfachter Weise relativistische Effekte mit Hilfe des folgenden Hamilton-Operators, der durch die relativistische Energie-Impuls-Beziehung motiviert werden kann,

$$H' = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} - \frac{e^2}{r} \,.$$

- Entwickeln Sie den kinetischen Term $\sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$ in Potenzen von $x = p^2/(m^2c^2)$ bis zur zweiten Ordnung und behandeln Sie die Terme, die von H_0 abweichen, als Störung. (Hinweis: Konstante Terme können Sie ignorieren.)
- Berechnen Sie die Änderung der Grundzustandsenergie in erster Ordnung in Störungstheorie. Verwenden Sie dazu Ihre Kenntnisse über das Wasserstoff-Atom.

Aufgabe 2.2: Reelle Vektoren und Tensoren

Betrachten Sie einen reellen d-dimensionalen Vektorraum. Jeder Vektor $\boldsymbol{v}$ aus diesem Vektorraum lässt sich bezüglich einer Orthonormalbasis $\{\boldsymbol{e}_\mu\}$, mit $\boldsymbol{e}_\mu \cdot \boldsymbol{e}_\nu = \delta_{\mu\nu}$, entwickeln:

$$\boldsymbol{v} = v_\mu \boldsymbol{e}_\mu \,.$$

Wir bezeichnen diesen linearen Vektorraum als G_1.

Ändern wir die Notation:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{v} &\longrightarrow |v\rangle \,, && \text{ein beliebiger Vektor;} \\ \boldsymbol{e}_\mu &\longrightarrow |\mu\rangle \,, && \text{ein Basisvektor;} \\ \boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{v} &\longrightarrow \langle u|v\rangle \,, && \text{inneres Produkt.} \end{aligned}$$

Betrachten wir nun den Tensor

$$\sigma = \sum_{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu} \boldsymbol{e}_\mu \otimes \boldsymbol{e}_\nu \ .$$

Die Tensoren G_2 werden aufgespannt von der Basis $\{\boldsymbol{e}_\mu \otimes \boldsymbol{e}_\nu\}$. In der neuen Notation schreiben wir:

$$|\sigma\rangle = \sum_{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu} |\mu\rangle \otimes |\nu\rangle = \sum_{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu} |\mu, \nu\rangle \ .$$

Das Skalarprodukt in G_2 ist definiert über:

$$(\boldsymbol{e}_\mu \otimes \boldsymbol{e}_\nu) \cdot (\boldsymbol{e}_\rho \otimes \boldsymbol{e}_\tau) = (\langle\mu| \otimes \langle\nu|)(|\rho\rangle \otimes |\tau\rangle) = \langle\mu|\rho\rangle\langle\nu|\tau\rangle = \delta_{\mu\rho}\delta_{\nu\tau} \ .$$

1. Drücken Sie $\langle\sigma|\omega\rangle$ durch $\sigma_{\mu\nu}$ und $\omega_{\mu\nu}$ aus.
2. Wie viele reelle Zahlen benötigt man, um die Tensoren von G_2 zu parametrisieren?
3. Symmetrische Tensoren aus G_2 sind definiert über $\sigma_{\mu\nu} = \sigma_{\nu\mu}$. Wie viele reelle Zahlen werden benötigt um einen beliebigen symmetrischen Tensor zu parametrisieren?
4. Aus wie viele Tensoren besteht eine Basis für die symmetrischen Tensoren?
5. Geben Sie eine Basis für symmetrische Tensoren in $d = 3$ mit Hilfe der Tensoren $|\mu, \nu\rangle$ an.
6. Zeigen Sie, dass ein beliebiger Tensor aus G_2 in einen symmetrischen und antisymmetrischen Anteil zerlegt werden kann. Kann dies für ein beliebiges Element aus G_3 gemacht werden, wobei G_3 die natürliche Erweiterung von G_1 und G_2 ist?

Aufgabe 2.3: Permutationen

Zeigen Sie, dass die Permutationsgruppe S_3 von drei Elementen isomorph zu den Decktransformationen eines gleichseitigen Dreiecks sind. Gilt dies auch für S_4 und die Decktransformationen eines Quadrates?

Aufgabe 2.4: Mehrkörpersysteme

Gegeben sei ein 2-Teilchen-Operator

$$A = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} A(i, j) \tag{2.128}$$

und eine Produktwellenfunktion

$$\psi = \psi_1(1)\psi_2(2)\psi_3(3) \tag{2.129}$$

mit orthonormierten ψ_i. Berechne explizit das Matrixelement $(\psi, A\psi)$ für symmetrisierte und antisymmetrisierte Wellenfunktionen und symmetrische $A(i,j)$.

Aufgabe 2.5: Dreikörperproblem

Wir betrachten ein System von drei Teilchen mit gleichen Massen m und Paarwechselwirkungen

$$V = V(r_{12}) + V(r_{13}) + V(r_{23}), \quad r_{ij} = \|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j\|. \tag{2.130}$$

Zeige, dass der Hamilton-Operator

$$H^{(3)} = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{3} \boldsymbol{p}_i^2 + V \tag{2.131}$$

folgende Form hat:

$$H^{(3)} = H_{\text{cm}} + H_{\text{rel}}^{(3)} \quad \text{mit} \quad H_{\text{cm}} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2M}\,. \tag{2.132}$$

Der Hamilton-Operator für die Schwerpunktsbewegung enthält den Gesamtimpuls $\boldsymbol{p} = \boldsymbol{p}_1+\boldsymbol{p}_2+\boldsymbol{p}_3$ und die gesamte Masse M und der Hamilton-Operator für die Relativbewegung ist die Summe von Zweiteilchen-Operatoren,

$$H_{\text{rel}}^{(3)} = H_{12} + H_{13} + H_{23}. \tag{2.133}$$

Bestimme diese Operatoren inklusive der reduzierten Masse.
Kommutiert H_{cm} mit den H_{ij}? Kommutieren die H_{ij} im Allgemeinen? Was schließen Sie, wenn sie kommutieren würden?

Aufgabe 2.6: Wechselwirkungsfreie Teilchen

Ein quantenmechanisches Einteilchensystem wird durch einen dreidimensionalen Hilbertraum beschrieben. Die Basis des Hilbertraumes sei $|1\rangle$, $|2\rangle$ und $|3\rangle$. Drei Teilchen besetzen diese Zustände. Wie viele verschiedene physikalische Zustände gibt es, in folgenden Fällen:

1. drei identische Fermionen
2. drei identische Bosonen
3. zwei identische Fermionen und ein Boson
4. zwei identische Bosonen und ein Fermion

5. drei verschiedene Fermionen
6. drei verschiedene Bosonen

Aufgabe 2.7: Zwei Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen

Behandeln Sie das (eindimensionale) Problem zweier identischer Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen für das Potential

$$V(x_1, x_2) = A(x_1^2 + x_2^2) + B(x_1 - x_2)^2$$

(A, B: nichtnegative Konstanten).
Bestimmen Sie die möglichen stationären Zustände mit zugehörigen Energieeigenwerten.

Aufgabe 2.8: Thomas-Fermi Atoms: test functions

We seek the optimal solution for the electron density $n(\boldsymbol{x})$ of a Thomas-Fermi atom within a family of test function. More precisely, we consider the following family of test functions,

$$n(\boldsymbol{x}) = A\,\frac{\mathrm{e}^{-y}}{y^3}, \qquad y = \sqrt{\frac{r}{\lambda}}\,,$$

where λ is a variational parameter and the constant A is fixed by the normalization $\int \mathrm{d}^3x\, n = N$. For a neutral atom we have $N = Z$.

1. Calculate the energy of the atom (ion) as function of λ.
2. Find the minimizing values of the variational parameter.
3. Calculate the corresponding energy as function of N and Z. What do you obtain for an (neutral) atom.

Hints: express the result as function of the TF-parameter γ entering the expression for the kinetic energy. The most demanding part is the calculation of the Coulomb interaction between the electrons,

$$V_{ee} = \frac{e^2}{2}\int \frac{n(\boldsymbol{x})n(\boldsymbol{y})}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\,\mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3y = -\frac{e}{2}\int \varphi(\boldsymbol{x})n(\boldsymbol{x})\mathrm{d}^3x \quad \text{with} \quad \Delta\varphi = -4\pi e n\,.$$

When solving the equation $\Delta\,\varphi = -4\pi e n$ for φ, for the given ansatz for $n(\boldsymbol{x})$, you arrive at the differential equation

$$\frac{1}{4\lambda^2 y^3}\left(y\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2} + 3\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y}\right)\varphi = -4\pi e A\frac{\mathrm{e}^{-y}}{y^3}$$

The solution regular at the origin is

$$\varphi = \frac{\text{const}}{y^2}\left(1-(1+y)\mathrm{e}^{-y}\right) .$$

Check that this is a solution and fix the constant.

Aufgabe 2.9: Thomas-Fermi atoms: virial theorems

We consider a atom in the Thomas-Fermi (TF) approximation. The electron density is denoted by $n(\boldsymbol{x})$. The universal function $\chi(s)$ of the dimensionless radial variable s has the properties

$$J \equiv \int_0^\infty \mathrm{d}s \left(\frac{\mathrm{d}\chi}{\mathrm{d}s}\right)^2 = -\frac{2}{7}\,\chi'(0) \approx 0.454 \quad \text{and} \quad \chi(0) = 1\,.$$

From the information given in the lecture one obtains

$$\gamma n^{2/3} = Ze^2\frac{\chi(r)}{r}, \quad n = \frac{Z}{4\pi}\frac{\chi''(r)}{r}\,. \tag{2.134}$$

1. Derive the Virial theorem relating the kinetic and potential energies in the TF approximation.
   Hint: Compute the kinetic, potential and total energies of the TF atom, first for the generic density $n(\boldsymbol{x})$, and then for the rescaled density $n_\lambda(\boldsymbol{x}) = \lambda^3 n(\lambda\boldsymbol{x})$. Then compare the two. Assuming that $n(\boldsymbol{x})$ is a physical solution, according to the variational principle it must correspond to n_λ at the value of λ_* that minimizes the total TF energy. What is λ_*? Write this stationarity condition at λ_*.
2. Use the definition of the screening function χ given in the lecture, as well as the Poisson equation fulfilled by the TF potential ϕ, to prove the second equation in (2.134).
3. Show that the kinetic energy T, interaction energy between nucleus and electrons V_{ne} and the interaction energy between the electrons are given by

$$T = \alpha\, J, \quad V_{en} = -\frac{7}{3}T, \quad V_{ee} = \frac{1}{3}T$$

   Express the constant α in terms the constant length b in $r = bs$, the charge Ze of the nucleus and the integral J. Assume that the atom is neutral such that the constant ϕ_0 in the treatment of the TF-atom vanishes.
   Hint: observe that $n^{5/3} = n^{2/3}\cdot n$ and use Eq. (2.134). For the computation of V_{ee}

start from the formula

$$V_{ee} = \frac{e^2}{2}\int \mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3y\,\frac{n(\boldsymbol{x})n(\boldsymbol{y})}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|} = -\frac{e}{2}\int \mathrm{d}^3x\,n(\boldsymbol{x})\phi(\boldsymbol{x}) + \frac{Ze^2}{2}\int \mathrm{d}^3x\,\frac{n(\boldsymbol{x})}{|\boldsymbol{x}|}\,,$$

which follows from

$$\phi(x) = \frac{Ze}{|\boldsymbol{x}|} - e\int \mathrm{d}^3y\,\frac{n(\boldsymbol{y})}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\,.$$

Aufgabe 2.10: Slater Determinante

Es sei $\psi_\alpha(\xi)$ ein Einteilchenzustand mit Quantenzahlen α. Dabei steht das Argument ξ für die Freiheitsgrade des Teilchens (oft Ort und Spin). Begründen Sie, dass der N-Teilchen Produktzustand, definiert durch die Slater-Determinante

$$\psi_{\alpha_1,\dots,\alpha_N}(\xi_1,\xi_2,\dots\xi_N) = \det\begin{pmatrix} \psi_{\alpha_1}(\xi_1) & \psi_{\alpha_1}(\xi_2) & \dots & \psi_{\alpha_1}(\xi_N) \\ \psi_{\alpha_2}(\xi_1) & \psi_{\alpha_2}(\xi_2) & \dots & \psi_{\alpha_2}(\xi_N) \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \psi_{\alpha_N}(\xi_1) & \psi_{\alpha_N}(\xi_2) & \dots & \psi_{\alpha_N}(\xi_N) \end{pmatrix}$$

vollständig anti-symmetrisch ist, wenn zwei Teilchen vertauscht werden. Zeigen Sie auch, dass die Slater-Determinante verschwindet, wenn die Funktionen $\psi_{\alpha_1},\dots,\psi_{\alpha_N}$ linear abhängig sind (zum Beispiel, wenn $\psi_{\alpha_1}=\psi_{\alpha_2}$ ist).

Aufgabe 2.11: Vielteilchensysteme und Hartree-Fock

Ein System bestehe aus drei spinlosen identische Fermionen auf der reellen Achse und habe den Hamiltonoperator $H = H^{(1)} + H^{(2)}$. Dabei ist

$$H^{(1)} = \sum_{i=1}^{3} h_i = \sum_{i=1}^{3}\left(\frac{p_i^2}{2m} + W(x_i^2)\right)$$

die Summe von drei Einteilchen-Hamilton-Operatoren mit beliebigem symmetrischen Potential. Der Zweiteilchen-Operator dagegen beschreibt eine Wechselwirkung zwischen den Teilchen mit

$$H^{(2)} = \frac{\lambda}{2}\sum_{i\neq j}^{3}\delta(x_i + x_j).$$

- Berechnen Sie innerhalb der Hartree-Fock-Näherung das HF-Energiefunktional (Erwartungswert $\langle H\rangle$) für das anti-symmetrisiertes Produkt von allgemeinen Einteilchen-Wellenfunktionen ψ_1, ψ_2, ψ_3.

- Leiten Sie aus dem vorherigen Ergebnis die zugehörige Hartree-Fock-Gleichung her, die jedes ψ_i erfüllen muss.

Aufgabe 2.12: Hartree-Fock für Beryllium-Atom

Beryllium hat die Kernladungszahl $Z = 4$ und 4 Hüllenelektronen. Im Folgenden nehmen wir an, dass im Grundzustand die $1s$ und $2s$ Orbitale gefüllt sind. Das Atom wurde übrigens 1797 von Vauquelin entdeckt.

1. Was ist die Slater-Determinante für den Grundzustand des Atoms? Bezeichnen Sie z.B. den $1s$ Zustand des 'ersten Elektrons' mit Spin nach oben mit $\psi_{100}(\boldsymbol{x}_1)\chi_{1\uparrow}$.
2. Finden Sie den Ausdruck für den (genäherten) Erwartungswert der Grundzustandsenergie, ausgedrückt durch die noch unbekannten Einteilchen-Wellenfunktionen ψ_{100} und ψ_{200}.
3. Nun kann man sofort die selbstkonsistenten Hartree-Fock Gleichungen für die Einteilchen-Wellenfunktionen angeben. Bei einer iterativen Lösung wählt man oft die Wasserstoff-Wellenfunktionen (mit Z=0) als Startwerte. Bestimmen Sie die Grundzustandsenergie für die Slater-Determinante gebildet mit den Wasserstoff-Wellenfunktionen. Wie nahe kommen Sie an den exakten Wert $-14.57\, e^2/a$?

Hinweise: Die gesuchte Slater-Determinante setzt sich aus den vier Einteilchen-Wellenfunktionen $\psi_{n00}(\boldsymbol{x}_a)\chi_{a,s}$ zusammen. Hierin bezeichnet $n \in \{1,2\}$ die Hauptquantenzahl, $s \in \{\uparrow,\downarrow\}$ die 3-Komponenten der Spins und $a \in \{1,2,3,4\}$ nummeriert die Elektronen. Kennzeichnen Sie in Ihrer Lösung bitte das 'dritte Elektron' mit Hauptquantenzahl 1 und Spin nach oben mit $\psi_{100}(\boldsymbol{x}_3)\chi_{3,\uparrow}$.

In der letzten Teilaufgabe benötigen Sie folgende Integrale für die Berechnung der mittleren kinetischen Energie sowie Kern-Elektron Wechselwirkung für Wasserstoff-Wellenfunktionen,

$$\int \mathrm{d}^3x\, |\nabla\psi_{100}(\boldsymbol{x})|^2 = \frac{Z^2}{a^2} \quad , \quad \int \mathrm{d}^3x\, |\nabla\psi_{200}(\boldsymbol{x})|^2 = \frac{1}{4}\frac{Z^2}{a^2}$$
$$\int \mathrm{d}^3x\, \frac{|\psi_{100}(\boldsymbol{x})|^2}{|\boldsymbol{x}|} = \frac{Z}{a} \quad , \quad \int \mathrm{d}^3x\, \frac{|\psi_{200}(\boldsymbol{x})|^2}{|\boldsymbol{x}|} = \frac{1}{4}\frac{Z}{a}\,,$$

und folgende Integrale zur Berechnung des Hartree- und Fock-Terms (direkter Term und

Austausch-Term):

$$\int \mathrm{d}^3x \int \mathrm{d}^3y \, \frac{|\psi_{100}(\boldsymbol{x})|^2 |\psi_{100}(\boldsymbol{y})|^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|} = \frac{5}{8}\frac{Z}{a}$$

$$\int \mathrm{d}^3x \int \mathrm{d}^3y \, \frac{|\psi_{200}(\boldsymbol{x})|^2 |\psi_{200}(\boldsymbol{y})|^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|} = \frac{77}{512}\frac{Z}{a}$$

$$\int \mathrm{d}^3x \int \mathrm{d}^3y \, \frac{|\psi_{100}(\boldsymbol{x})|^2 |\psi_{200}(\boldsymbol{y})|^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|} = \frac{17}{81}\frac{Z}{a}$$

$$\int \mathrm{d}^3x \int \mathrm{d}^3y \, \frac{\psi^*_{100}(\boldsymbol{x})\psi^*_{100}(\boldsymbol{y})\psi_{200}(\boldsymbol{x})\psi_{200}(\boldsymbol{y})}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|} = \frac{16}{729}\frac{Z}{a} \,.$$

Denken Sie daran, dass $\hbar^2/m = ae^2$ ist.

Zur Information: Die oben angegebenen Integrale können mit Hilfe einer Fouriertransformation berechnet werden. Es sei

$$\mathcal{F}(f)(\boldsymbol{k}) = \hat{f}(\boldsymbol{k}) = \int_{\mathbb{R}^3} f(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\mathrm{d}^3x$$

die Fouriertransformierte von f. Dann gilt

$$\int \mathrm{d}^3x \int \mathrm{d}^3y \, \frac{f^*(\boldsymbol{x})g(\boldsymbol{y})}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|} = \frac{1}{2\pi^2}\int \mathrm{d}^3k \, \frac{\hat{f}^*(\boldsymbol{k})\hat{g}(\boldsymbol{k})}{|\boldsymbol{k}|^2} \,.$$

Wählt man zum Beispiel $f = \psi^*_{001}\psi_{001}$ und $g = \psi^*_{200}\psi_{200}$, dann kann man mit Hilfe von

$$\mathcal{F}(\psi^*_{100}\psi_{100})(\boldsymbol{k}) = \frac{16Z^4}{(2Z^2 + |\boldsymbol{k}|^2)^2}$$

und der Fourier-Transformierten von $\psi^*_{200}\psi_{200}$ das für den Hartree-Term benötigte Integral berechnen.

Kapitel 3

Addition von Drehimpulsen mit Anwendungen

Der Hamilton-Operator eines Mehrkörpersystems vertauscht nur bei Vernachlässigung der spinabhängigen Terme mit dem gesamten Bahndrehimpuls $\boldsymbol{L}$. Bei Berücksichtigung der Spinterme vertauscht er nur noch mit dem Gesamtdrehimpuls $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$. Wir wollen uns daher der Frage zuwenden, wie die Eigenzustände des gesamten Drehimpulses aus den Eigenzuständen der Drehimpulse der Teilsysteme zusammengesetzt sind. Es bezeichne $\boldsymbol{J}$ den gesamten Drehimpuls und $\boldsymbol{J}_1$, $\boldsymbol{J}_2$ die kommutierenden Drehimpulse der Teilsysteme. Die Komponenten aller Drehimpulse erfüllen die Drehimpuls-Algebra

$$[J_x, J_y] = \mathrm{i}\hbar J_z \quad \text{und zyklisch.} \tag{3.1}$$

Bei der Diskussion des Drehimpulses haben wir gezeigt, dass $\boldsymbol{J}^2$ und J_z gleichzeitig diagonalisiert werden können[1]

$$\boldsymbol{J}^2|jm\rangle = j(j+1)|jm\rangle, \quad J_z|jm\rangle = m|jm\rangle, \qquad j \in \tfrac{1}{2}\mathbb{N}_0, \;\; m = -j, \dots, j. \tag{3.2}$$

In den Formeln haben wir $\hbar = 1$ gesetzt. Es ist eine lehrreiche Übung, in den folgenden Ergebnissen die $\hbar$-Abhängigkeit wieder herzustellen. Die nicht-hermiteschen *Leiteroperatoren* (Auf- und Absteigeoperatoren, Stufenoperatoren)

$$J_\pm = J_x \pm \mathrm{i}J_y, \quad \text{mit} \quad J_-^\dagger = J_+, \tag{3.3}$$

[1]In diesem Abschnitt bezeichnet V_z die Projektion von $\boldsymbol{V}$ auf die 3-Achse.

wirken auf diese Drehimpuls-Eigenzustände gemäß

$$J_\pm|jm\rangle = c^\pm_{jm}\,|j, m\pm 1\rangle \quad \text{mit} \quad c^\pm_{jm} = \sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}. \tag{3.4}$$

Für jedes halbganze j gibt es eine $2j+1$-dimensionale irreduzible Darstellung der Drehimpulsalgebra. Der von den $|jm\rangle$ aufgespannte Unterraum (der Darstellungsraum) wird mit $\mathfrak{h}_j$ bezeichnet. Zu jedem j gehört also der Unterraum $\mathfrak{h}_j$, den man auch Darstellungsraum nennt. Er ist invariant unter der Wirkung des Drehimpulses. Dies bedeutet, dass die drei Komponenten des Drehimpulsoperators jeden Unterraum $\mathfrak{h}_j$ in sich abbildet.

3.1 Addition von Drehimpulsen

Es habe nun ein Teilsystem den Drehimpuls j_1 und ein zweites Teilsystem den Drehimpuls j_2. Was können wir über den Drehimpuls des Gesamtsystems in dieser Situation aussagen? Leider ist die Antwort auf diese Frage nicht ganz so einfach wie in der klassischen Mechanik, wo die Drehimpulse der Teilsysteme nur vektoriell addiert werden. Da für abgeschlossene Systeme im Allgemeinen der Hamilton-Operator nur mit dem *gesamten Drehimpuls* (und nicht den einzelnen Drehimpulsen) vertauscht, ist die Beantwortung dieser Frage wichtig bei der Berechnung von Energie-Eigenwerten.

Der Zustandsraum des Gesamtsystems $\mathfrak{h}_{j_1j_2} = \mathfrak{h}_{j_1}\otimes\mathfrak{h}_{j_2}$ wird durch die Produkte der orthonormierten Eigenzustände der individuellen Drehimpulse aufgespannt,

$$|j_1m_1j_2m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \tag{3.5}$$

und hat die Dimension

$$\dim(\mathfrak{h}_{j_1j_2})) = \dim(\mathfrak{h}_{j_1})\cdot\dim(\mathfrak{h}_{j_2}) = (2j_1+1)(2j_2+1). \tag{3.6}$$

Die *Produktzustände* sind Eigenzustände der kommutierenden Operatoren $\boldsymbol{J}_1^2, \boldsymbol{J}_2^2, J_{1z}, J_{2z}$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{J}_1^2|j_1m_1j_2m_2\rangle &= j_1(j_1+1)|j_1m_1j_2m_2\rangle\ ,\ J_{1z}|j_1m_1j_2m_2\rangle = m_1|j_1m_1j_2m_2\rangle\\
\boldsymbol{J}_2^2|j_1m_1j_2m_2\rangle &= j_2(j_2+1)|j_1m_1j_2m_2\rangle\ ,\ J_{2z}|j_1m_1j_2m_2\rangle = m_2|j_1m_1j_2m_2\rangle.
\end{aligned} \tag{3.7}$$

Der Gesamtdrehimpuls

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}_1 + \boldsymbol{J}_2 \tag{3.8}$$

erfüllt ebenfalls die Drehimpulsalgebra, und wir können die gemeinsamen Eigenzustände von $\boldsymbol{J}^2$ und J_z suchen. Da weiterhin $\boldsymbol{J}_1^2$ und $\boldsymbol{J}_2^2$ mit $\boldsymbol{J}$ vertauschen, sind $\boldsymbol{J}^2$, J_z, $\boldsymbol{J}_1^2$ und $\boldsymbol{J}_2^2$ verträgliche Observablen und können gleichzeitig diagonalisiert werden. Wir bezeichnen die entsprechenden orthonormierten Zustände mit $|j_1j_2jm\rangle$:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{J}^2|j_1j_2jm\rangle &= j(j+1)|j_1j_2jm\rangle\ ,\ J_z|j_1j_2jm\rangle = m|j_1j_2jm\rangle \\ \boldsymbol{J}_1^2|j_1j_2jm\rangle &= j_1(j_1+1)|j_1j_2jm\rangle\ ,\ \boldsymbol{J}_2^2|j_1j_2jm\rangle = j_2(j_2+1)|j_1j_2jm\rangle. \end{aligned} \tag{3.9}$$

Die Zustände $|j_1m_1j_2m_2\rangle$ bzw. $|j_1j_2jm\rangle$ bilden zwei orthonormierte Basissysteme von $\mathfrak{h}_{j_1j_2}$. Wir wollen herausfinden, wie man die Vektoren $|j_1j_2jm\rangle$ als Linearkombination der Vektoren $|j_1m_1j_2m_2\rangle$ ausdrücken kann,

$$|j_1j_2jm\rangle = \sum_{m_1,m_2} \langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm\rangle\,|j_1m_1j_2m_2\rangle. \tag{3.10}$$

Wir haben berücksichtigt, dass *alle* Zustände Eigenzustände von $\boldsymbol{J}_1^2$ und $\boldsymbol{J}_2^2$ sind. Deshalb müssen die zugehörigen Eigenwerte gleich sein, damit die Skalarprodukte nicht verschwinden. Die Matrixelemente

$$\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm\rangle \tag{3.11}$$

sind die bekannten *Clebsch-Gordan-Koeffizienten* (CG-Koeffizienten). Die wichtigsten Koeffizienten findet man im Buch von E. Condon und G. Shortley tabelliert [11]. Dabei muss man beachten, dass die Bezeichnungen für die Koeffizienten nicht einheitlich sind. Häufig verwendete Symbole sind

$$\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm\rangle = \langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle = C^{jm}_{j_1m_1j_2m_2}. \tag{3.12}$$

Wir wählen in den meisten Fällen die erste Bezeichnung. In expliziten Rechnungen, bei denen die $j's$ und $m's$ durch Zahlen ersetzt werden, ist allerdings die zweite Bezeichnung vorzuziehen.

Wir wollen wichtige Eigenschaften der CG-Koeffizienten ableiten. Da J_z ein hermitischer Operator ist, gilt

$$\langle j_1m_1j_2m_2|J_z|j_1j_2jm\rangle = m\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm\rangle = (m_1+m_2)\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm\rangle \tag{3.13}$$

und die Koeffizienten können nur ungleich Null sein, wenn die Auswahlregel

$$m = m_1 + m_2 \tag{3.14}$$

erfüllt ist. Damit gilt

$$|j_1j_2jm\rangle = \sum_{m_1+m_2=m} \langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm\rangle\ |j_1m_1j_2m_2\rangle. \tag{3.15}$$

Wir wollen nun die Entartung der Eigenwerte m von J_z bestimmen. Wegen der Summenregel (3.14) ist diese gleich der Anzahl Paare (m_1, m_2) mit $m_1 + m_2 = m$. Wir wollen $j_1 \geq j_2$ annehmen. Dann sind die Anzahl Paare mit festem $m = m_1 + m_2$ aus der folgenden Figur ersichtlich. Es gibt genau einen Eigenzustand mit $m = j_1 + j_2$, nämlich

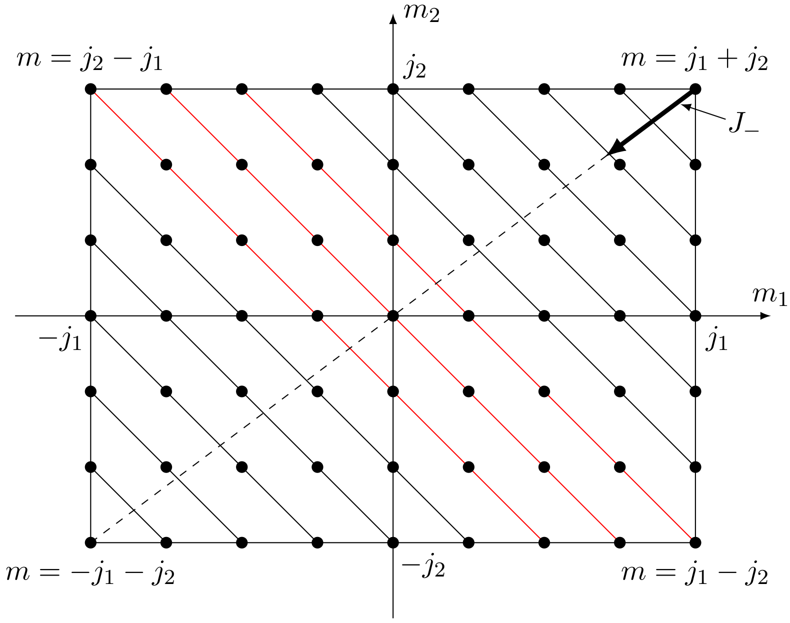


Abbildung 3.1: *Mögliche Werte von m_1, m_2 und Wirkung von J_-. Die Punkte charakterisieren Produktzustände und Zustände auf derselben absteigenden Gerade haben gleiche magnetische Quantenzahl $m = m_1 + m_2$. In der Figur ist $j_1 = 4$ und $j_2 = 3$.*

den Produktzustand $|j_1j_1\rangle \otimes |j_2j_2\rangle$ mit maximalen J_{iz}-Eigenwerten. Dieser wird von den beiden Aufsteigeoperatoren J_{i+} vernichtet. Wegen

$$\begin{aligned} \boldsymbol{J}^2 &= (\boldsymbol{J}_1 + \boldsymbol{J}_2)^2 = \boldsymbol{J}_1^2 + \boldsymbol{J}_2^2 + 2\boldsymbol{J}_1 \cdot \boldsymbol{J}_2 \\ &= \boldsymbol{J}_1^2 + \boldsymbol{J}_2^2 + 2J_{1z}J_{2z} + J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+} \end{aligned} \tag{3.16}$$

ist er auch Eigenzustand von $\boldsymbol{J}^2$ mit Eigenwert

$$j_1(j_1 + 1) + j_2(j_2 + 1) + 2j_1j_2 = (j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1). \tag{3.17}$$

Damit haben wir einen Eigenzustand des gesamten Drehimpulses mit $j = j_1 + j_2$ und magnetischen Quantenzahl $m = j$ gefunden. Durch mehrmaliges Anwenden des Absteigeoperator J_- auf diesen Zustand erzeugen wir die $2j+1$ Eigenzustände

$$|j_1 j_2 j m\rangle \quad \text{mit} \quad j = j_1 + j_2, \quad -j \le m \le j. \tag{3.18}$$

Das Gesamtsystem enthält demnach ein Multiplett mit Drehimpuls $j_1 + j_2$. Was bleibt nun übrig? Das größte übrig bleibende m ist $j_1 + j_2 - 1$. Also existiert ein Multiplett mit $j = j_1 + j_2 - 1$, da nur dieses ein solches maximales m hat. Nun fährt man auf diese Weise fort und folgert, dass j die Werte $j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|$ annimmt. Es gilt also eine weitere Auswahlregel, die *Dreiecksregel*, für die möglichen Werte des Gesamtdrehimpulses von zwei Systemen mit Drehimpulsen j_1 und j_2:

$$|j_1 - j_2| \le j \le j_1 + j_2 \qquad \text{(Dreiecksregel).} \tag{3.19}$$

Man sieht, dass die Addition eines ganzen und eines halbganzen Drehimpulses nur halbganze Drehimpulse ergibt. Man prüft leicht nach, dass man alle Zustände erhält,

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j+1) = (2j_1+1)(2j_2+1). \tag{3.20}$$

Wir haben bewiesen, dass das Tensorprodukt zweier Darstellungen $\mathfrak{h}_{j_1}$ und $\mathfrak{h}_{j_2}$ der individuellen Drehimpulse folgende Darstellungen des Gesamtdrehimpulses enthält:

$$\mathfrak{h}_{j_1} \otimes \mathfrak{h}_{j_2} = \mathfrak{h}_{j_1+j_2} \oplus \mathfrak{h}_{j_1+j_2-1} \oplus \cdots \oplus \mathfrak{h}_{|j_1-j_2|}. \tag{3.21}$$

In der Gruppentheorie bezeichnet man die Multipletts oft mit ihrer Dimension, zum Beispiel den vom Triplett aufgespannten Unterraum $\mathfrak{h}_1$ mit $\mathbf{3}$. Mit dieser Übereinkunft zerfällt zum Beispiel der 9-dimensionale Raum $\mathbf{3} \otimes \mathbf{3}$ in Zustände mit Gesamtdrehimpuls 0, 1 und 2, also ein Singlett, Triplett und Quintett,

$$\mathbf{3} \otimes \mathbf{3} = \mathbf{1} \oplus \mathbf{3} \oplus \mathbf{5}, \tag{3.22}$$

Entsprechend ist das Produkt von zwei unabhängigen Spin $\frac{1}{2}$-Zuständen eine Linearkombination eines Singletts und Tripletts,

$$\mathbf{2} \otimes \mathbf{2} = \mathbf{1} \oplus \mathbf{3}. \tag{3.23}$$

3.2 Clebsch-Gordan Koeffizienten

Wir wenden uns den Eigenschaften der Entwicklungskoeffizienten (3.12) und ihrer Berechnung zu. Statt die $|j_1 j_2 jm\rangle$ nach den $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$ zu entwickeln, wie oben, können wir umgekehrt auch die $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$ nach den $|j_1 j_2 jm\rangle$ entwickeln,

$$|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = \sum_{j,m=m_1+m_2} \langle j_1 j_2 jm|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \, |j_1 j_2 jm\rangle. \tag{3.24}$$

Die Matrixelemente

$$\langle j_1 j_2 jm|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \tag{3.25}$$

nennt man *inverse Clebsch-Gordan-Koeffizienten.* Wie diese erfüllen sie Orthogonalitätsrelationen, da sie den Basiswechsel zwischen zwei orthonormierten Basen vermitteln,

$$\sum_{j,m} \langle j_1 m_1' j_2 m_2'|j_1 j_2 jm\rangle\langle j_1 j_2 jm|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = \delta_{m_1 m_1'}\delta_{m_2 m_2'}. \tag{3.26}$$

Dabei wird über alle mit der Dreiecksungleichung (3.19) verträglichen j und zugehörigen m summiert. Die CG-Koeffizienten erfüllen

$$\sum_{m_1+m_2=m} \langle j_1 j_2 jm|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle\langle j_1 m_1 j_2 m_2|j_1 j_2 j' m'\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'}. \tag{3.27}$$

Wir werden später sehen, dass alle Koeffizienten reell gewählt werden können. Dann gilt

$$\langle j_1 j_2 jm|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = \langle j_1 m_1 j_2 m_2|j_1 j_2 jm\rangle, \tag{3.28}$$

und (3.27) wird für $j = j'$ und $m = m'$ zu

$$\sum_{m_1+m_2=m} \langle j_1 j_2 jm|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle^2 = 1. \tag{3.29}$$

Die Koeffizienten sind nun rekursiv berechenbar. Dazu wirkt man mit den Auf- und Absteigeoperatoren $J_\pm = J_{1\pm} + J_{2\pm}$ im folgenden Matrixelement auf den Ket- und Bra-Vektor

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2|J_\pm|j_1 j_2 jm\rangle \tag{3.30}$$

und benutzt $J_\pm^\dagger = J_\mp$. Die Wirkung auf den Ket-Vektor ergibt

$$c^\pm_{jm}\, \langle j_1 m_1 j_2 m_2|j_1 j_1 j, m \pm 1\rangle \tag{3.31}$$

und die Wirkung auf den Bra-Vektor

$$c^{\mp}_{j_1m_1}\langle j_1, m_1 \mp 1, j_2m_2|j_1j_2jm\rangle + c^{\mp}_{j_2m_2}\,\langle j_1m_1j_2, m_2 \mp 1|j_1j_2jm\rangle. \tag{3.32}$$

Dies ergibt die beiden Rekursionsformeln

$$\begin{aligned}&c^{\pm}_{jm}\,\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2j, m \pm 1\rangle\\ &= c^{\mp}_{j_1m_1}\,\langle j_1, m_1 \mp 1, j_2m_2|j_1j_2jm\rangle + c^{\mp}_{j_2m_2}\,\langle j_1m_1j_2, m_2 \mp 1|j_1j_2jm\rangle\end{aligned} \tag{3.33}$$

für die Clebsch-Gordan Koeffizienten oder die Rekursionsrelationen

$$\begin{aligned}&c^{\pm}_{jm}\,\langle j_1j_2j, m \pm 1|j_1m_1j_2m_2\rangle\\ &= c^{\mp}_{j_1m_1}\,\langle j_1j_2jm|j_1, m_1 \mp 1, j_2m_2\rangle + c^{\mp}_{j_2m_2}\,\langle j_1j_2jm|j_1m_1j_2, m_2 \mp 1\rangle\end{aligned} \tag{3.34}$$

für die inversen Koeffizienten. Zusammen mit (3.29) gestatten uns diese Relationen die Berechnung der Koeffizienten.

Als wichtige Anwendung betrachten wir die Addition von Spin und Bahndrehimpuls eines Elektrons. In diesem Beispiel bezeichnen wir die Eigenzustände des Gesamtdrehimpuls mit $|jm\rangle$ und nicht mit $|j_1j_2jm\rangle$, um sie von den Produktzuständen besser unterscheiden zu können. Es sei $j_1 = \ell$ der Bahndrehimpuls und $j_2 = \frac{1}{2}$ der Spin. Wegen

$$\mathfrak{h}_0 \otimes \mathfrak{h}_{\frac{1}{2}} = \mathfrak{h}_{\frac{1}{2}} \quad \text{und} \quad \mathfrak{h}_\ell \otimes \mathfrak{h}_{\frac{1}{2}} = \mathfrak{h}_{\ell-\frac{1}{2}} \oplus \mathfrak{h}_{\ell+\frac{1}{2}} \tag{3.35}$$

ist der Gesamtdrehimpuls j eines s-Elektrons gleich $\frac{1}{2}$, eines p-Elektrons gleich $\frac{1}{2}$ oder $\frac{3}{2}$, eines d-Elektrons gleich $\frac{3}{2}$ oder $\frac{5}{2}$, und so weiter.

Für $\ell = 0$ ist offensichtlich

$$\langle 00\tfrac{1}{2}m_s|\tfrac{1}{2}m\rangle = \delta_{m,m_s}. \tag{3.36}$$

Für $\ell \geq 1$ kann j die Werte $\ell \pm \frac{1}{2}$ annehmen. Nur der Produktzustand $|\ell\ell\rangle \otimes |\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle$ hat die maximale magnetische Quantenzahl $m = \ell + \frac{1}{2}$ und deshalb gilt

$$\left\langle \ell\ell\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}|\ell + \tfrac{1}{2}, \ell + \tfrac{1}{2}\right\rangle = 1. \tag{3.37}$$

Hier benutzen wir (3.33) mit dem unteren Vorzeichen und mit $j_2 = m_2 = \frac{1}{2}$,

$$c^{-}_{jm}\,\langle \ell m_\ell\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}|j, m{-}1\rangle = c^{+}_{\ell m_\ell}\,\langle \ell, m_\ell{+}1, \tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}|jm\rangle \tag{3.38}$$

wobei die Auswahlregeln (3.14) und (3.19) für die Drehimpulsquantenzahlen zu beachten sind. Wir schließen mit $m \to m+1$ und $j = \ell + \frac{1}{2}$

$$\begin{aligned}&\sqrt{(\ell+\tfrac{1}{2})(\ell+\tfrac{3}{2})-(m+1)m}\,\big\langle \ell, m-\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}|\ell+\tfrac{1}{2}, m\big\rangle \\ &= \sqrt{\ell(\ell+1)-(m-\tfrac{1}{2})(m+\tfrac{1}{2})}\,\big\langle \ell, m+\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}|\ell+\tfrac{1}{2}, m+1\big\rangle .\end{aligned}$$

Wir machten von der Auswahlregel $m_\ell + \frac{1}{2} = m$ Gebrauch. Kürzt man den gemeinsamen Faktor $(\ell - m + \frac{1}{2})^{1/2}$ auf beiden Seiten, so ergibt sich

$$\langle \ell, m-\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}|\ell+\tfrac{1}{2}, m\rangle = \sqrt{\frac{\ell+m+\frac{1}{2}}{\ell+m+\frac{3}{2}}}\;\big\langle \ell, m+\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}|\ell+\tfrac{1}{2}, m+1\big\rangle\,. \tag{3.39}$$

Vermittels Iteration dieser Relation und unter Benutzung von (3.37) findet man dann

$$\langle \ell, m-\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}|\ell+\tfrac{1}{2}, m\rangle = \sqrt{\frac{\ell+m+\frac{1}{2}}{2\ell+1}}. \tag{3.40}$$

Die verbleibenden Clebsch-Gordan Koeffizienten für die Spin-Bahn Kopplung werden analog berechnet. Das Resultat ist in der Tabelle 3.1 für die Koeffizienten $(\ell m_\ell \frac{1}{2} m_s|jm)$ mit $m_\ell = m - m_s$, zusammengestellt. Die entsprechenden Clebsch-Gordan Koeffizienten

$j\backslash m_s$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
$\ell+\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{\ell+m+1/2}{2\ell+1}}$	$\sqrt{\frac{\ell-m+1/2}{2\ell+1}}$
$\ell-\frac{1}{2}$	$-\sqrt{\frac{\ell-m+1/2}{2\ell+1}}$	$\sqrt{\frac{\ell+m+1/2}{2\ell+1}}$

Tabelle 3.1: Clebsch-Gordon Koeffizienten für die Kopplung des orbitalen Drehimpulses mit dem Spin.

$(\ell m_\ell 1 m_2|jm)$ für die Kopplung zweier Systeme mit Drehimpulsen ℓ und 1 finden sich in der Tabelle 3.2.

In Anwendungen ist es oft notwendig j_1 und j_2 zu vertauschen. Dazu gibt es verschiedene Identitäten für die CG-Koeffizienten. Aber die Benutzung dieser Identitäten führt leicht zu Fehlern und es ist angenehmer, die so-genannten $3j$-*Symbole* von Wigner zu benutzen, bei denen die drei Drehimpulse $\boldsymbol{J}$, $\boldsymbol{J}_1$ und $\boldsymbol{J}_2$ symmetrisch behandelt werden. Diese sind folgendermaßen mit den Clebsch-Gordan Koeffizienten verbunden,

$j\backslash m_2$	1	0	-1
$\ell+1$	$\sqrt{\frac{(\ell+m)(\ell+m+1)}{(2\ell+1)(2\ell+2)}}$	$\sqrt{\frac{(\ell-m+1)(\ell+m+1)}{(2\ell+1)(\ell+1)}}$	$\sqrt{\frac{(\ell-m)(\ell-m+1)}{(2\ell+1)(2\ell+2)}}$
ℓ	$-\sqrt{\frac{(\ell+m)(\ell-m+1)}{2\ell(\ell+1)}}$	$\frac{m}{\sqrt{\ell(\ell+1)}}$	$\sqrt{\frac{(\ell-m)(\ell+m+1)}{2\ell(\ell+1)}}$
$\ell-1$	$\sqrt{\frac{(\ell-m)(\ell-m+1)}{2\ell(2\ell+1)}}$	$-\sqrt{\frac{(\ell-m)(\ell+m)}{\ell(2\ell+1)}}$	$\sqrt{\frac{(\ell+m)(\ell+m+1)}{2\ell(2\ell+1)}}$

Tabelle 3.2: Clebsch-Gordon Koeffizienten für die Kopplung von Drehimpls ℓ mit Drehimpuls 1.

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1-j_2-m_3}}{\sqrt{2j_3+1}} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_3, -m_3 \rangle. \tag{3.41}$$

Die $3j$-Symbole ändern nicht bei einer zyklischen Permutation der Kolonnen. Bei einer nicht-zyklischen Permutation ändern sie gemäß

$$\begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \tag{3.42}$$

3.3 Tensoroperatoren

Tensoroperatoren treten in vielen Anwendungen auf. Oft benötigt man ihre Matrixelemente zwischen Eigenzuständen des Drehimpulses. Wir beginnen mit skalaren Operatoren und diskutieren danach die Matrixelemente für allgemeine Tensoroperatoren.

3.3.1 Skalare Operatoren

Skalare Operatoren sind drehinvariant und vertauschen mit dem Drehimpuls. Wichtige Vertreter sind der Hamilton-Operator, die kinetische Energie oder $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$. Es sei also S ein Skalar,

$$\Gamma(U) S \Gamma(U^{-1}) = S \quad \text{oder} \quad [\boldsymbol{J}, S] = 0, \tag{3.43}$$

wobei $U \in SU(2)$ eine quantenmechanische Drehung ist. Lassen wir in den Gleichungen

$$\langle jm|[\boldsymbol{J}^2, S]|j'm'\rangle = 0 \quad \text{und} \quad \langle jm|[J_z, S]|j'm'\rangle = 0 \tag{3.44}$$

die Drehimpulse einmal auf den Ket und dann auf das Bra wirken, dann folgt die einfache *Auswahlregel*

$$\langle jm|S|j'm'\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'}\langle jm|S|jm\rangle. \tag{3.45}$$

Die Matrixelemente eines skalaren Operators zwischen Zuständen mit verschiedenen Drehimpulsquantenzahlen verschwinden also. Wir unterdrücken in unserer Notation weitere Quantenzahlen die notwendig wären um Zustände vollständig zu charakterisieren.

Wegen $[J_\pm, S] = 0$ hängen die Matrixelemente gar nicht von m ab. Zum Beweis berechnen wir die Matrixelemente von J_+SJ_- auf zwei Arten. Zuerst wirken wir mit J_- auf den Ket und mit J_+ auf das Bra,

$$\langle jm|J_+SJ_-|jm\rangle \overset{(3.4)}{=} (c^-_{jm})^2\langle j, m{-}1|S|j, m{-}1\rangle. \tag{3.46}$$

Da der Aufsteigeoperator J_+ mit dem skalaren Operator vertauscht ist dies auch

$$\langle jm|SJ_+J_-|jm\rangle \overset{(3.4)}{=} c^+_{j,m-1}c^-_{jm}\langle jm|S|jm\rangle = (c^-_{jm})^2\langle jm|S|jm\rangle. \tag{3.47}$$

Mit den linken stimmen auch die rechten Seiten der beiden letzten Gleichungen überein und deshalb müssen sind die Matrixelemente $\langle jm|S|jm\rangle$ unabhängig von m sein,

$$\langle jm|S|j'm'\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'}\langle j\|S\|j\rangle. \tag{3.48}$$

Das reduzierte Matrixelement $\langle j\|S\|j\rangle$ bestimmt man indem man die linke Seite zum Beispiel für $m = j$ berechnet. Ähnliche Methoden können auch für Vektoroperatoren oder allgemeinere Tensoroperatoren angewandt werden.

3.3.2 Tensoroperatoren

Die Auswahlregeln für *Matrixelemente von Tensoroperatoren* spielen in Anwendungen der Quantenmechanik eine herausragende Rolle. So wird das Verhalten von Atomen und Molekülen bei Emission, Absorption und Streuung von elektromagnetischer Strahlung durch den wichtigen Dipol-Vektoroperator bestimmt. Weitere Beispiele für Vektoroperatoren sind der Impuls, Drehimpuls oder Spin. Beispiele für höhere Tensoroperatoren sind die atomaren Multipolmomente.

Wir erinnern an das Transformationsverhalten der Eigenzustände des Drehimpulses bei quantenmechanischen Drehungen,

$$\Gamma(U)|jm\rangle = \sum_{m'=-j}^{j} D^j_{m'm}(U)|jm'\rangle, \qquad D^j_{m'm}(U) = \langle jm'|\Gamma(U)|jm\rangle. \tag{3.49}$$

Die D^j bilden eine $2j+1$-dimensionale unitäre Darstellung von $SU(2)$ auf dem Unterraum $\mathfrak{h}_j$. Die Produktzustände (3.5) transformieren gemäß

$$\Gamma(U)\,|j_1m_1j_2m_2\rangle = \sum_{m_1',m_2'} D^{j_1}_{m_1'm_1}(U)D^{j_2}_{m_2'm_2}(U)|j_1m_1'j_2m_2'\rangle. \tag{3.50}$$

Wir definieren die $2j+1$ *Normalkomponenten* T^J_M eines (irreduziblen) *Tensoroperators* T^J der Stufe J, oft auch *sphärische Komponenten* genannt, als Operatoren, die unter Drehungen wie folgt transformieren

$$\Gamma(U)T^J_M\Gamma^{-1}(U) = \sum_{M'} D^J_{M'M}(U)T^J_{M'}, \quad U\in SU(2). \tag{3.51}$$

Die Zustände $T^J_M|jm\rangle$ transformieren dann unter Drehungen genauso wie die Produktzustände $|JMjm\rangle$, wie man leicht nachweist,

$$\Gamma(U)\,T^J_M|jm\rangle = \Gamma(U)T^J_M\,\underbrace{\Gamma(U)^{-1}\Gamma(U)}_{\mathbb{1}}\,|jm\rangle = \sum_{M',m'} D^J_{M'M}(U)\,D^j_{m'm}(U)\,T^J_{M'}|jm'\rangle. \tag{3.52}$$

Sie sollten sich also in Multipletts mit Drehimpulsen zwischen $J+j$ und $|J-j|$ gruppieren. Um die infinitesimale Version von (3.51) zu erhalten, setzen wir auf der linken Seite dieser Gleichung $\Gamma(U) = \exp(-i\boldsymbol{\alpha J})$ und bemerken, dass die Normalkomponenten T^J_M genauso transformieren wie die Eigenzustände $|JM\rangle$. Damit ergeben sich folgende Kommutatoren für die Drehimpulse und Normalkomponenten eines Tensoroperators,

$$[J_\pm, T^J_M] = c^\pm_{JM}T^J_{M\pm1} \quad \text{und} \quad [J_3, T^J_M] = MT^J_M. \tag{3.53}$$

Mit Hilfe des letzten Kommutators finden wir

$$J_3T^J_M|jm\rangle = \left(T^J_MJ_3 + MT^J_M\right)|jm\rangle = (m+M)\,T^J_M|jm\rangle. \tag{3.54}$$

Die Normalkomponente T^J_M eines Vektoroperators erhöht den J_z-Eigenwert um M und es folgt eine *erste Auswahlregel*

$$m \neq M + m' \Longrightarrow \langle jm|T^J_M|j'm'\rangle = 0. \tag{3.55}$$

Die Zustände $T^J_M|jm\rangle$ sind im Allgemeinen keine Eigenvektoren von $\boldsymbol{J}^2$.

Nun betrachten wir Matrixelemente der ersten Vertauschungrelation in (3.53)

$$\big\langle jm\big|J_\mp T^J_M - T^J_M J_\mp - c^\mp_{JM} T^J_{M\mp1}\big|j'm'\big\rangle = 0 \tag{3.56}$$

und finden die Rekursionsrelationen

$$\begin{aligned} &c^\pm_{jm}\langle j, m\pm 1|T^J_M|j'm'\rangle \\ &= c^\mp_{JM}\langle jm|T^J_{M\mp1}|j'm'\rangle + c^\mp_{j'm'}\langle jm|T^J_M|j', m'\mp 1\rangle \end{aligned} \tag{3.57}$$

Diese Gleichungen sind identisch zu den Rekursionrelationen (3.34) für die inversen Clebsch-Gordan Koeffizienten und dies beweist das

Wigner-Eckart Theorem: *Sind $\langle jm|T^J_M|j'm'\rangle$ die Matrixelemente der Normalkomponenten eines Tensoroperators der Ordnung J und $|jm\rangle$ und $|j'm'\rangle$ die Eigenvektoren des Drehimpuls-Operators, dann gilt*

$$\langle jm|T^J_M|j'm'\rangle = \langle jm|JMj'm'\rangle\,\langle j||T^J||j'\rangle \tag{3.58}$$

mit einem von m, m' und M unabhängigen reduzierten Matrixelement $\langle j||T^J||j'\rangle$.

Das Theorem impliziert die *zweite Auswahlregel*

$$\langle jm|T^J_M|j'm'\rangle = 0 \quad \text{für} \quad j \notin \big\{j'+J, j'+J-1, \dots, |\,j'-J|\,\big\}. \tag{3.59}$$

Für ganzzahlige j ist $\Gamma(U)$ eine Darstellung der Drehgruppe $SO(3)$ und wir dürfen $\Gamma(U) = \Gamma(R)$ mit $R \in SO(3)$ schreiben. In diesem Fall kann man die kartesischen Komponenten $T_{i_1\dots i_j}$ eines Tensors der Stufe j einführen. Diese transformieren unter Drehungen im Raum wie das j-fache Tensorprodukt $\mathbf{3}\otimes\cdots\otimes\mathbf{3}$ der dreidimensionalen Darstellung:

$$\Gamma(R)T_{i_1\dots i_j}\Gamma(R^{-1}) = R_{i_1'i_1}\dots R_{i_j'i_j}T_{i_1'\dots i_j'}, \quad R \in SO(3). \tag{3.60}$$

Die 3^j kartesischen Komponenten des Tensors T gruppieren sich im Allgemeinen in sphärische Komponenten von verschiedenen irreduziblen Tensoren. Zum Beispiel kann ein zweistufiger Tensor mit kartesischen Komponenten T_{ij} in drei Anteile zerlegt werden,

$$T_{ij} = \left(T_{(ij)} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\,\mathrm{Sp}\,T\right) + T_{[ij]} + \frac{1}{3}\delta_{ij}\,\mathrm{Sp}\,T\,, \tag{3.61}$$

wobei $T_{(ij)}$ und $T_{[ij]}$ den symmetrischen und antisymmetrischen Anteil von T_{ij} bezeichnen und $\mathrm{Sp}\,T$ die Summe über die Elemente auf der Diagonalen ist. Die Zerlegung (3.61) ist invariant unter Drehungen. Zum Beispiel bleibt eine symmetrischer und spurloser Tensor bei Drehungen symmetrisch und spurlos. Der erste Anteil hat 5 unabhängige Komponenten, der zweite Anteil hat 3 und der dritte Anteil 1 Komponente. Die Anteile transformieren nach den Darstellungen **5**, **3** und **1**.

3.3.3 Vektoroperatoren

Für einen Vektoroperator entspricht der Übergang von kartesischen zu Normalkomponenten dem Übergang von den Koordinaten (x, y, z) zu den Kugelflächenfunktionen Y_{1m},

$$Y_{11} = -\frac{c}{\sqrt{2}}\,(x + \mathrm{i}y)\,, \quad Y_{10} = c\cdot z, \quad Y_{1-1} = \frac{c}{\sqrt{2}}\,(x - \mathrm{i}y)\,, \tag{3.62}$$

da die Kugelflächenfunktionen wie die $|1m\rangle$ transformieren. Damit sind die Normalkomponenten eines Vektoroperators

$$V_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}\,(V_x + \mathrm{i}V_y)\,, \qquad V_0 = V_z, \qquad V_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(V_x - \mathrm{i}V_y)\,. \tag{3.63}$$

Die Vertauschungrelationen $[J_i, V_j] = i\epsilon_{ijk}V_k$ für die kartesischen Komponenten sind äquivalent zu den Vertauschungsrelationen (3.53) mit $j = 1$ für die Normalkomponenten V_m. Für einen Vektoroperator lautet das Wigner-Eckart-Theorem

$$\langle jm|V_M|j'm'\rangle = \langle jm|1Mj'm'\rangle\;\langle j||V||j'\rangle. \tag{3.64}$$

Als erste Anwendung berechnen wir die reduzierten Matrixelemente für den Drehimpuls. Seine Normalkomponenten lauten

$$J_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}J_+, \quad J_0 = J_z, \quad J_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}J_-. \tag{3.65}$$

Die linke Seite von

$$\langle jm|J_M|j'm'\rangle = \langle jm|1Mj'm'\rangle\;\langle j||J||j'\rangle \tag{3.66}$$

verschwindet offensichtlich für $j \neq j'$ und wir finden

$$\langle j||J||j'\rangle = 0 \quad \text{für} \quad j \neq j'. \tag{3.67}$$

Für $j' = j$ können wir $M = 0$ und $m = m' = j$ wählen und erhalten

$$\langle jj|J_0|jj\rangle = \langle jj|10jj\rangle \, \langle j||J||j\rangle. \tag{3.68}$$

Das Matrixelement auf der linken Seite ist j und der Clebsch-Gordan Koeffizient ist gleich dem Element in der zweiten Spalte und zweiten Zeile der Tabelle 3.2 auf Seite 47. Es ergibt sich das reduzierte Matrixelement

$$\langle j||J||j\rangle = \sqrt{j(j+1},\tag{3.69}$$

und (3.66) nimmt folgende Form an

$$\langle jm|1Mjm'\rangle = \frac{\langle jm|J_M|jm'\rangle}{\sqrt{j(j+1)}}. \tag{3.70}$$

Wir können dieses Resultat in (3.64) mit $j = j'$ verwerten,

$$\langle jm|V_M|jm'\rangle = \langle jm|J_M|jm'\rangle \, \frac{\langle j||V||j\rangle}{\sqrt{j(j+1)}}. \tag{3.71}$$

Da die kartesischen Komponenten linear von den Normalkomponenten abhängen, gilt auch

$$\langle jm|\boldsymbol{V}|jm'\rangle = \langle jm|\boldsymbol{J}|jm'\rangle \, \frac{\langle j||V||j\rangle}{\sqrt{j(j+1)}}. \tag{3.72}$$

Um eine einfache Formel für das reduzierte Matrixelement zu gewinnen, multiplizieren wir skalar mit $\langle jm'|\boldsymbol{J}|jm''\rangle$ und summieren über m'. Wir finden

$$\langle jm|\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{J}|jm''\rangle = \langle jm|\boldsymbol{J}^2|jm''\rangle \, \frac{\langle j||V||j\rangle}{\sqrt{j(j+1)}} = \delta_{mm''}\sqrt{j(j+1)}\,\langle j||V||j\rangle \tag{3.73}$$

und eingesetzt in (3.72) die Formel

$$\langle jm|\boldsymbol{V}|jm'\rangle = \langle jm|\boldsymbol{J}|jm'\rangle \, \frac{\langle j\|\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{J}\|j\rangle}{j(j+1)}. \tag{3.74}$$

Da $\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{J}$ ein skalarer Operator ist, konnten wir im letzten Schritt die Formel (3.48) anwenden. Bis auf eine nur j-abhängige Konstante sind die Matrixelemente von $\boldsymbol{V}$ und $\boldsymbol{J}$

auf dem Unterraum $\mathfrak{h}_j$ gleich. Dies bedeutet nicht, dass die Operatoren proportional sind. Im Gegensatz zu $\boldsymbol{J}$ wird ein allgemeiner Vektoroperator nicht-verschwindende Matrixelemente $\langle jm|\boldsymbol{V}|j\pm 1, m'\rangle$ haben. Aber man kann die Formel (3.73) benutzen, um das reduzierte Matrixelement von $\boldsymbol{V}$ für ein Multiplett zu berechnen. Wir erinnern daran, dass Matrixelemente des skalaren Operators $\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{J}$ nur für $m=m'$ ungleich Null sind.

3.3.4 Berechnung von Landé-Faktoren

Wir werden mit Hilfe des Wigner-Eckart-Theorems den Einfluss eine magnetischen Feldes $\boldsymbol{B}$ auf die Energieniveaus eines Atoms mit mehreren Elektronen berechnen. Ein schwaches Magnetfeld hebt Entartungen auf und erzeugt stattdessen äquidistante Energieniveaus. Die Energiedifferenz dieser Zustände ist proportional zum Betrag B des Feldes und einer Konstanten g_J, dem Landé-Faktor, den wir berechnen werden.

Es sei $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{L}_1+\dots+\boldsymbol{L}_N$ der Gesamtbahndrehimpuls der N Atomelektronen und $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_1+\dots+\boldsymbol{S}_N$ ihr Gesamtspin. Für einen verschwindenden Kernspin ist der gesamte Drehimpuls des Atoms

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}\,. \tag{3.75}$$

Ohne äußere Feldern ist er eine Erhaltungsgröße des Systems. Den entsprechenden Hamilton-Operator bezeichnen wir mit H_0. Er vertauscht mit dem gesamten Drehimpuls. Wir nehmen an, die verträglichen Observablen $H_0, \boldsymbol{L}^2, \boldsymbol{S}^2, \boldsymbol{J}^2$ und J_z bilden einen *vollständigen* Satz und bezeichnen die gemeinsamen Eigenfunktionen mit $|E_0LSJM\rangle$,

$$H_0\to E_0\;,\;\boldsymbol{L}^2\to L(L+1)\;,\;\boldsymbol{S}^2\to S(S+1)\;,\;\boldsymbol{J}^2\to J(J+1)\;,\;J_3\to M. \tag{3.76}$$

Für das drehinvariante System ist $[H_0,\boldsymbol{J}]=0$ und alle $2J+1$ Zustände

$$|E_0LSJM\rangle \quad\text{mit}\quad M=-J,\dots,J-1,J \tag{3.77}$$

in einem irreduziblen $\boldsymbol{J}$-Multiplett haben dieselbe Energie. Den von den Vektoren $|E_0LSJM\rangle$ aufgespannten Eigenraum bezeichnen wir mit $\mathcal{H}(E_0,L,S,J)$.

Für leichte Atome in schwachen äußeren Magnetfeldfeldern ist die LS-Kopplung (Russell-Saunders Kopplung) proportional zu skalaren Operator $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ die dominante Störung (für schwere Edelgase ist dies nicht mehr wahr). In Gegenwart eines Magnetfeldes $\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_z$ kommutiert der gesamte Hamilton-Operator

$$H=H_0+H_1,\qquad H_1=\omega_L(L_z+2S_z)\,, \tag{3.78}$$

nicht mehr mit allen Komponenten von $\boldsymbol{J}$. Der Faktor 2 vor S_z rührt vom gyromagnetischen Verhältnis des Elektronenspins her. Wir haben die *Larmor-Frequenz* ω_L des Elektrons eingeführt,

$$\omega_L = -\frac{qB}{2m} = -\frac{\mu_B}{\hbar}B, \tag{3.79}$$

worin μ_B das Bohr-Magneton bezeichnet. Wir berechnen nun den Einfluss des Magnetfeldes in erster Ordnung Störungstheorie. Dazu müssen wir die Eigenwerte von H_1 auf dem Eigenraum $\mathcal{H}(E_0, L, S, J)$ des ungestörten Hamilton-Operators H_0 bestimmen. Auf diesem Unterraum gilt nach dem Projektionssatz (3.74)

$$\boldsymbol{L} = \frac{\langle \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{J}\rangle_{E_0LSJ}}{J(J+1)}\,\boldsymbol{J} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{S} = \frac{\langle \boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J}\rangle_{E_0LSJ}}{J(J+1)}\,\boldsymbol{J}\,, \tag{3.80}$$

mit den reduzierten Matrixelementen der skalaren Operatoren $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{J}$ und $\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J}$. Diese hängen nicht von der magnetischen Quantenzahl M ab. Mit

$$\begin{aligned}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{J} &= \boldsymbol{L}\cdot(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}) = \boldsymbol{L}^2 + \tfrac{1}{2}\left(\boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{L}^2 - \boldsymbol{S}^2\right)\\ \boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J} &= \boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}) = \boldsymbol{S}^2 + \tfrac{1}{2}\left(\boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{L}^2 - \boldsymbol{S}^2\right)\end{aligned} \tag{3.81}$$

ergeben sich folgende reduzierten Matrixelemente,

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{J}\rangle_{E_0LSJ} &= L(L+1) + \tfrac{1}{2}\big(J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\big)\\ \langle \boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J}\rangle_{E_0LSJ} &= S(S+1) + \tfrac{1}{2}\big(J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\big).\end{aligned} \tag{3.82}$$

Setzt man dies in (3.80) und dann in (3.78) ein, so wird der Störoperator H_1 im Unterraum $\mathcal{H}(E_0, L, S, J)$ durch

$$H_1 = g_J\omega_L J_z \tag{3.83}$$

ersetzt, mit folgendem Landé-Faktor g_J für das betrachtete Multiplett

$$g_J = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \tag{3.84}$$

Aus Gleichung (3.83) folgt, dass im betrachteten Unterraum die Eigenzustände von H_1 die Basisvektoren $|E_0LSJM\rangle$ mit den Eigenwerten

$$\Delta E_1 = \hbar\omega_L g_J\, M \tag{3.85}$$

sind. Das Magnetfeld hebt die Entartung des Multipletts vollständig auf. Für kleine Magnetfelder findet man also einen Satz von $2J+1$ äquidistanten Energieniveaus, die zu den verschiedenen Eigenwerten M von J_z gehören. Dies verallgemeinert unsere früheren Resultate über den Zeeman-Effekt im Wasserstoffatom.

3.4 Das reale Wasserstoffatom

In der Vorlesung Quantenmechanik I haben wir nicht-relativistische und idealisierte wasserstoffähnliche Atome behandelt. Der Behandlung lag der Hamilton-Operator

$$H_0 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r} \quad \text{mit Energien} \quad E_n = -\frac{1}{2}\mu c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \tag{3.86}$$

zugrunde. Nach Abspaltung der Schwerpunktsbewegung wurde im Ausdruck für die Relativbewegung die Elektronenmasse m_e durch die reduzierte Masse μ ersetzt. Diese unterscheidet sich kaum von der Elektronenmasse,

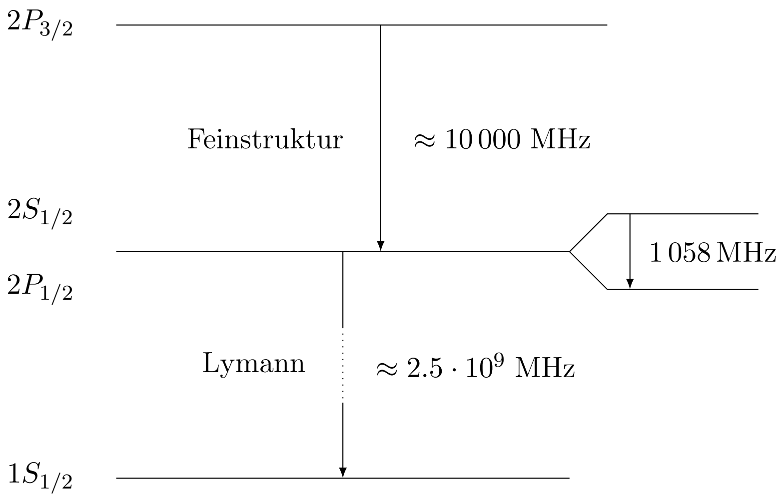
$$\frac{\mu}{m_e} \approx 1 - \frac{m_e}{\mu} \approx 1 - 5.4 \cdot 10^{-4}. \tag{3.87}$$

Schon 1887 hat Michelson mit Hilfe der Interferometer-Methode gesehen, dass die Balmer-Linien in Dubletts von konstanter Wellenzahldifferenz aufspalten [21]. Eine genaue Bestimmung der Dublett-Abstände gelang G. Hansen, der mit Mitteln der Zeiss-Werke 1925 folgende Werte für die Aufspaltung Balmer-Linien fand [22]

für	H_α	H_β	H_γ	H_δ	H_ϵ
$\Delta\nu$ [GHz]	9.473	9.503	9.833	9.653	9.713

(3.88)

Bereits 1916 gelang Arnold Sommerfeld eine Deutung dieser Aufspaltung auf Grund des Bohrschen Atommodells. Die Aufspaltung der Linien rührt von der Aufspaltung der Zustände mit Hauptquantenzahl 2 und Bahndrehimpulsen 0 und 1.



Durch Anwendung der Radiowellenmethode auf einen Wasserstoffmolekularstrahl fanden Lamb und Retherford 1947 eine weitere, sehr kleine Aufspaltung der $2S_{1/2}$ und $2P_{1/2}$ Niveaus von etwa 1058 MHz. Im Gegensatz zur Feinstrukturaufspaltung werden wir diese Lamb-Verschiebung von 1058 MHz hier leider nicht weiter untersuchen. Ihr Berechnung verlangt Grundkenntnisse über quantisierte Felder.

3.4.1 Feinstruktur des Wasserstoffatoms

In einer realistischen Behandlung von Atomen müssen wir mehrere, teilweise spinabhängige, Korrekturen berücksichtigen. Dies sind die relativistische Korrektur der nichtrelativistischen kinetischen Energie in (3.86), die Spin-Bahn-Wechselwirkung und der Darwin-Term. Zusammen sind diese drei Terme verantwortlich für die *Feinstruktur* des Wasserstoffatoms, die eine sehr einfache Form hat und auch aus der Dirac-Gleichung für das Elektron folgt.

Korrektur der kinetischen Energie

Für die kinetische Energie des Elektrons sollten wir den relativistischen Ausdruck

$$T = \sqrt{(\boldsymbol{p}c)^2 + (m_e c^2)^2} - m_e c^2 \approx \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e} - \frac{1}{8}\frac{(\boldsymbol{p}^2)^2}{m_e^3 c^2} + \dots = T_0 + T_1 + \dots \tag{3.89}$$

benutzen. Den zweiten Term T_1 kann man mit Hilfe der Störungstheorie abschätzen. Mit

$$T_1 = -\frac{1}{2m_ec^2}\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e}\right)^2 = -\frac{1}{2m_ec^2}\left(H_0 + \frac{Ze^2}{r}\right)\left(H_0 + \frac{Ze^2}{r}\right), \tag{3.90}$$

wobei in H_0 die Elektronenmasse zu verwenden ist, findet man für wasserstoffähnliche Atome im Zustand $|n\ell m\rangle$ die spinunabhängige Energieverschiebung

$$\begin{aligned}\langle n\ell m|T_1|n\ell m\rangle &= -\frac{1}{2m_ec^2}\left(E_n^2 + 2E_nZe^2\langle n\ell m|\frac{1}{r}|n\ell m\rangle + Z^2e^4\langle n\ell m|\frac{1}{r^2}|n\ell m\rangle\right)\\ &= E_n\,(Z\alpha)^2\left(\frac{1}{n(\ell+\frac{1}{2})} - \frac{3}{4n^2}\right), \qquad E_n = -\frac{m_ec^2}{2}\frac{(Z\alpha)^2}{n^2}.\end{aligned} \tag{3.91}$$

Wir haben die bei der Behandlung des nichtrelativistischen Wasserstoffatom berechneten Erwartungswerte von $1/r$ und $1/r^2$ eingesetzt. Damit ist die von T_1 herrührende relative Energieverschiebung $(Z\alpha)^2 \approx (0.5 \cdot 10^{-4})Z^2$ etwa um eine Größenordnung kleiner als diejenige aufgrund der Ersetzung von m_e durch die reduzierte Masse μ.

Spin-Bahn-Kopplung

Das mit dem Elektronenspin einhergehende magnetische Moment

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{eg}{2m_ec}\boldsymbol{S} \tag{3.92}$$

ist für eine weitere Korrektur verantwortlich. Diese rührt von der Bewegung des Elektron um den Atomkern. Ein relativ zum Kern ruhendes Elektron „sieht“ nur dessen elektrisches Coulombfeld $\boldsymbol{E} = -\nabla\phi(r)$. Nach der speziellen Relativitätstheorie sieht ein mit der Geschwindigkeit $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{p}/m_e$ relativ zum Kern bewegtes Elektron neben dem Coulombfeld ein Magnetfeld, das zur ersten Ordnung in v/c gleich $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{E}/c$ ist. Die Energie des magnetischen Moments in diesem Magnetfeld ist

$$\begin{aligned}-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B} &= \frac{eg}{2m_ec}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B} \overset{g\approx 2}{=} \frac{e}{m_ec^2}\boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{E}) = \frac{e}{m_e^2c^2}\boldsymbol{S}\cdot\big(\boldsymbol{p}\times\nabla\phi(r)\big)\\ &= \frac{e}{m_e^2c^2}\boldsymbol{S}\cdot\big(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{r}\big)\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}r} = -\frac{e}{m_e^2c^2}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}\,\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}r}\end{aligned} \tag{3.93}$$

Hier ist $\phi(r)$ das Potential der Kernladung und wir haben $g = 2$ gesetzt. Unser Resultat ist beinahe richtig. Es zeigt sich, dass relativistische Effekte zusammen mit der nichtgeradlinigen Bewegung des Elektrons (*Thomas-Präzession*) das Resultat um den Faktor 2 reduzieren. Der korrekte Ausdruck für den Spin-Bahn-Term lautet demnach

$$H_{\mathrm{SB}} = -\frac{e}{2m_e^2c^2}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}\,\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}\phi(r)}{\mathrm{d}r}. \tag{3.94}$$

Er beschreibt die Wechselwirkung zwischen dem magnetischen Moment des Elektrons und dem aufgrund der Bewegung des Atomkerns relativ zum Elektron vom Letzteren „gesehenen“ magnetischen Feld. Für das Wasserstoffatom folgt die Form von H_{SB} auch aus der relativistischen Diracgleichung.

Für wasserstoffähnliche Atome mit Spin-Bahn-Kopplung vertauscht der Hamilton-Operator

$$H = H_0 + H_{\mathrm{SB}} = H_0 + \frac{Ze^2}{2m_e^2c^2}\frac{\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}}{r^3} \tag{3.95}$$

weder mit dem Bahndrehimpuls noch dem Spin sondern nur mit dem gesamten Drehimpuls $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$. Bevor wir die Feinstrukturaufspaltung der Spektrallinien berechnen, wollen wir die Größe der Aufspaltung abschätzen. Da $\boldsymbol{L}$ und $\boldsymbol{S}$ beide etwa $\hbar$ sind, ist

$$\langle H_{\mathrm{SB}}\rangle \approx \frac{Ze^2}{2m_e^2c^2}\frac{\hbar^2}{a_0^3} = Z\alpha^4 m_e c^2 = 13.6\,\mathrm{eV}\,Z\alpha^2. \tag{3.96}$$

Die Korrekturen aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung sind also vergleichbar mit denjenigen von T_1. Zur Berechnung der Aufspaltung in erster Ordnung Störungstheorie bestimmen wir die Erwartungswerte von H_{SB} mit Hilfe von

$$\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L} = \tfrac{1}{2}\left(\boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{L}^2 - \boldsymbol{S}^2\right). \tag{3.97}$$

Die letzte Beziehung impliziert, dass die gemeinsamen Eigenzustände von $\boldsymbol{L}^2, \boldsymbol{S}^2, \boldsymbol{J}^2$ und J_z automatisch Eigenvektoren von H_{SB} sind und die Diagonalisierung von H_{SB} entsprechend einfach ist. Die Kopplung von Elektronenspin und Bahndrehimpuls führt wegen

$$\mathfrak{h}_\ell \otimes \mathfrak{h}_{\frac{1}{2}} = \mathfrak{h}_{\ell+\frac{1}{2}} \oplus \mathfrak{h}_{\ell-\frac{1}{2}}, \qquad \ell > 0\,, \tag{3.98}$$

auf die Gesamtdrehimpulse $\ell \pm \frac{1}{2}$ mit den entsprechenden Eigenzuständen

$$|n\ell\tfrac{1}{2}jm\rangle \quad \text{mit} \quad j = \ell \pm \tfrac{1}{2}. \tag{3.99}$$

Hier ist n die Hauptquantenzahl des Wasserstoffatoms. Für den Erwartungswert der Störung H_{SB} in diesen Eigenzuständen ergibt sich

$$\langle n\ell\tfrac{1}{2}jm|H_{\mathrm{SB}}|n\ell\tfrac{1}{2}jm\rangle = \frac{Ze^2}{2m_e^2c^2}\langle \ell\tfrac{1}{2}jm|\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}|\ell\tfrac{1}{2}jm\rangle \int \mathrm{d}r r^2 f_{n\ell}^2(r)\frac{1}{r^3}. \tag{3.100}$$

Wir können das letzte Integral berechnen. Das Ergebnis lautet für $\ell > 0$

$$\int \mathrm{d}r r^2 f_{n\ell}^2(r)\frac{1}{r^3} = \frac{Z^3}{a_0^3}\frac{1}{n^3\ell(\ell+\frac{1}{2})(\ell+1)}, \tag{3.101}$$

und führt auf folgenden Ausdruck für das gesuchte Matrixelement

$$\langle n\ell\tfrac{1}{2}jm|H_{\mathrm{SB}}|n\ell\tfrac{1}{2}jm\rangle = -E_n\left(\frac{Z\alpha}{\hbar}\right)^2\frac{\langle\ell\frac{1}{2}jm|\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}|\ell\frac{1}{2}jm\rangle}{n\ell(\ell+\frac{1}{2})(\ell+1)} \tag{3.102}$$

für positive ℓ. Je nachdem ob $j = \ell + \frac{1}{2}$ oder $j = \ell - \frac{1}{2}$ ist findet man mit Hilfe von (3.97)

$$\begin{aligned}\Delta E_{\mathrm{SB}} &= -E_n\frac{Z^2\alpha^2}{2n}\frac{1}{(\ell+\frac{1}{2})(\ell+1)} && \text{für } j = \ell + \tfrac{1}{2}\\ \Delta E_{\mathrm{SB}} &= E_n\frac{Z^2\alpha^2}{2n}\frac{1}{\ell(\ell+\frac{1}{2})} && \text{für } j = \ell - \tfrac{1}{2}.\end{aligned} \tag{3.103}$$

Feinstruktur

Kombinieren wir die Effekte von T_1 und H_{SB}, so erhalten wir eine sehr einfache Formel für die Energieverschiebungen

$$\Delta E_{\mathrm{FS}} = E_n(Z\alpha)^2\frac{1}{n}\left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right) \tag{3.104}$$

für beide Werte von $\ell = j \pm \frac{1}{2}$. In unserer Herleitung haben wir $\ell > 0$ angenommen, da für $\ell = 0$ das Integral (3.101) divergiert. Unser Endergebnis ist allerdings auch richtig für $\ell = 0$, wenn man noch den hier nicht besprochenen *Darwin-Term* berücksichtigt. Dies folgt auch aus der relativistischen Dirac-Gleichung für das Wasserstoffatom. Bemerkenswert an dieser einfachen Formel ist, dass die Feinstrukturaufspaltung nicht mehr von der Bahndrehimpulsquantenzahl ℓ abhängt, also zum Beispiel die $2s_{1/2}$ und $2p_{1/2}$ Zustände energetisch gleich liegen. Die Feinstrukturaufspaltung nimmt mit wachsendem n und j ab und ist proportional zum Produkt Z^2E_n. Das entsprechende Termschema ist in Abbildung (3.2) gezeigt. Es ist ersichtlich, dass der Übergang von $n = 2$ nach $n = 1$ (Lyman-Serie) aus zwei Komponenten besteht. Für die Balmer-Serie (von $n = 3$ nach $n = 2$) ergeben sich 7 Komponenten. Wegen der Entartung in ℓ fallen jedoch zweimal je zwei Komponenten zusammen.

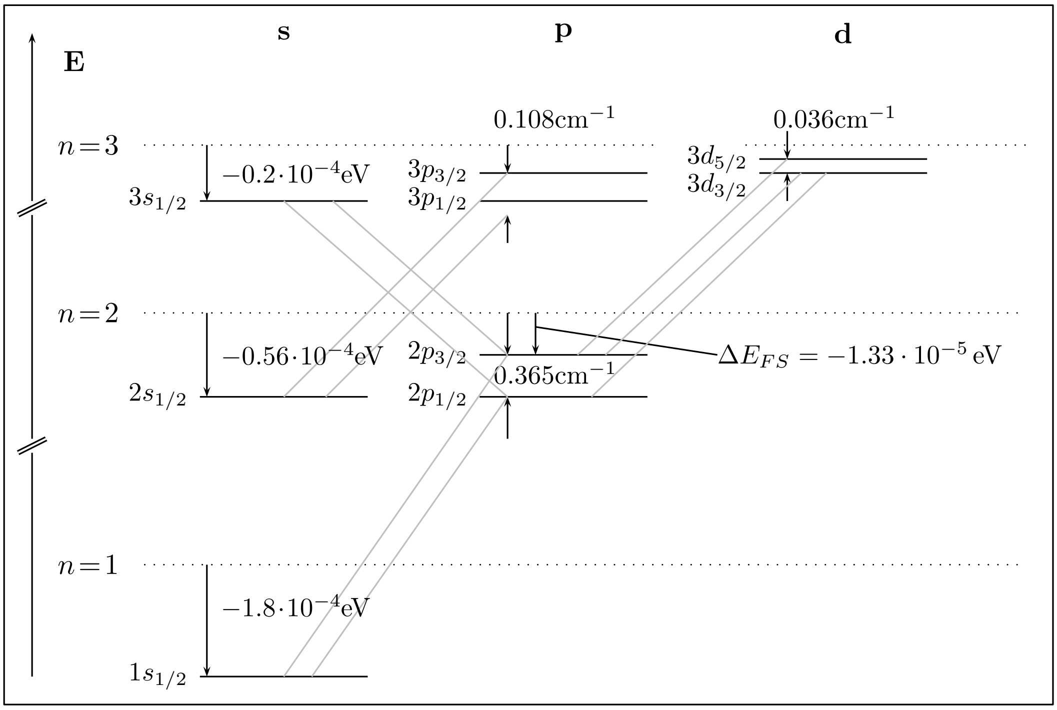


Abbildung 3.2: *Termschema des Wasserstoffatoms bei Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung und der relativistischen Massenzunahme. Die gestrichelte Linien geben die Lage der Energieniveaus E_n ohne Korrekturterme an.*

3.4.2 Die Hyperfeinstruktur

Bisher haben wir das Proton im Wasserstoffatom als Massenpunkt mit Masse m_p und Ladung $q = |e|$ behandelt. Tatsächlich aber ist es wie das Elektron ein Spin$-1/2$-Teilchen mit Spin $\boldsymbol{I}$ und magnetischen Dipolmoment

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{2m_p c}\, g_p \boldsymbol{I}, \quad \text{mit} \quad g_p \approx 5.585. \tag{3.105}$$

Obwohl der Protonen- und Elektronenspin gleich sind, ist wegen des Massenunterschieds das Kernmagneton sehr viel kleiner als das Bohr-Magneton. Der Kernmagnetismus ist viel unbedeutender als der elektronische Magnetismus. Aber die Wechselwirkung zwischen den Momenten des Protons und Elektrons führt zu einem Zusatzterm im Hamilton-Operator und dieser Term bedingt eine weitere Aufspaltung der Spektrallinien. In der Tat, untersucht man die Feinstruktur des Wasserstoffatoms mit sehr hoher Auflösung, so stellt man fest, dass die Feinstrukturkomponenten ihrerseits eine Substruktur besitzen. Diese sehr kleine Aufspaltung, die man nur mit dopplerfreien spektroskopischen Methoden auflösen kann, nennt man *Hyperfeinstruktur* der Spektrallinien.

Wir wollen etwas allgemeiner den Einfluss des magnetischen Moments eines Kerns der Ladung Zq, Masse m_N und dem gyromagnetischen Verhältnis g_N,

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{Zq}{2m_N c}\, g_N \boldsymbol{I}, \tag{3.106}$$

untersuchen. Dieser Zusatzterm ist verantwortlich für die Hyperfeinstruktur der atomaren Spektren. Das Vektorpotential eines punktförmigen Dipols kennen wir aus der Magnetostatik,

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{4\pi}\left(\boldsymbol{\mu}\times\nabla\right)\frac{1}{r} = \frac{1}{4\pi}\frac{\boldsymbol{\mu}\times\boldsymbol{x}}{r^3} \tag{3.107}$$

und berechnen daraus das Magnetfeld,

$$\boldsymbol{B} = \nabla\times\boldsymbol{A} = -\frac{1}{4\pi}\boldsymbol{\mu}\,\Delta\frac{1}{r} + \frac{1}{4\pi}\nabla\left(\boldsymbol{\mu}\cdot\nabla\right)\frac{1}{r} \tag{3.108}$$

oder in Komponenten

$$B_i = \mu_i\delta(r) + \frac{1}{4\pi}\mu_j\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_j}\frac{1}{r}. \tag{3.109}$$

Der Beitrag zur Energie ist

$$H_{\mathrm{HF}} = -\boldsymbol{\mu}_e\cdot\boldsymbol{B} \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{\mu}_e = \frac{e}{2m_e c}\, g_e\boldsymbol{S} \approx \frac{e}{m_e c}\boldsymbol{S}, \tag{3.110}$$

und nach Einsetzen des vom Kernspin erzeugten Magnetfeldes (3.109) führt dies auf

$$H_{\mathrm{HF}} = -\boldsymbol{\mu}_e\cdot\boldsymbol{\mu}\,\delta(r) - \frac{1}{4\pi}\mu_{ei}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_j}\frac{1}{r}\right)\mu_j \tag{3.111}$$

Wir berechnen die Aufspaltung der s-Zustände des Wasserstoffatoms in erster Ordnung Störungstheorie. Dazu benötigen wir die Erwartungswerte des ersten Terms auf der rechten Seite in den Zuständen mit verschwindendem Bahndrehimpuls,

$$-\boldsymbol{\mu}_e\cdot\boldsymbol{\mu}\,\langle n00|\delta(r)|n00\rangle = -\boldsymbol{\mu}_e\cdot\boldsymbol{\mu}\, f_{n0}^2(0)\,. \tag{3.112}$$

Der Erwartungswert des zweiten Terms in (3.111) ist proportional zu

$$\int \mathrm{d}^3x f_{n0}^2(r)\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_j}\frac{1}{r} = \frac{1}{3}\delta_{ij}\int \mathrm{d}^3x f_{n0}^2(r)\Delta\left(\frac{1}{r}\right) = -\frac{4\pi}{3}\delta_{ij}f_{n0}^2(0) \tag{3.113}$$

Wir brauchen noch den Wert der quadrierten s-Wellen am Ursprung,

$$f_{n0}^2(0) = 4\left(\frac{Z}{a_0 n}\right)^3 . \tag{3.114}$$

Addieren wir nun die Beträge dann ergibt sich

$$\langle n00|H_{\mathrm{HF}}|n00\rangle = -\frac{2}{3}\cdot\frac{4}{n^3}\frac{Z^3}{a_0^3}\boldsymbol{\mu}_e\cdot\boldsymbol{\mu} = \frac{4}{3}\left(\frac{e^2}{a_0}\right) g_N \left(\frac{m_e}{m_N}\right)\left(\frac{\alpha^2}{n^3}\right) Z^4 \left(\frac{\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{I}}{\hbar^2}\right) . \tag{3.115}$$

Nun führen wir noch den Gesamtspin des Kern-Elektron-Systems ein,

$$\boldsymbol{F} = \boldsymbol{S} + \boldsymbol{I} . \tag{3.116}$$

Mit der schon öfter benutzten Identität

$$\begin{aligned}\frac{2}{\hbar^2}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{I} = \frac{1}{\hbar^2}(\boldsymbol{F}^2 - \boldsymbol{S}^2 - \boldsymbol{I}^2) &= F(F+1) - 3/4 - I(I+1)\\ &= \begin{cases} I & \text{für } F = I + \frac{1}{2}\\ -I-1 & \text{für } F = I - \frac{1}{2}\end{cases}\end{aligned}$$

ergibt sich Hyperfein-Aufspaltung der Energieniveaus mit *Bahndrehimpuls Null*:

$$\Delta E = \frac{4}{3}\left(\frac{e^2}{a_0}\right) g_N \left(\frac{m_e}{m_N}\right)\left(\frac{\alpha^2}{n^3}\right) Z^4\big(I + \tfrac{1}{2}\big). \tag{3.117}$$

Für das *Wasserstoffatom* mit $g_N = g_p$, $I = 1/2$ ist die Hyperfein-Aufspaltung des Grundzustandes

$$\Delta E = \frac{4}{3}\left(\frac{e^2}{a_0}\right) g_p \left(\frac{m_e}{m_N}\right)\alpha^2. \tag{3.118}$$

Sie entspricht einer Wellenlänge von 21 cm, die im Mikrowellenbereich liegt. Die 21 cm-Linie beim Übergang vom Triplett-Zustand mit $F = 1$ zum tieferliegenden Singlett-Zustand mit $F = 0$ machen sich die Radioastronomen bei der Beobachtung von neutralen Gaswolken erfolgreich zunutze.

3.5 Aufgaben zu Kapitel 3

Aufgabe 3.1: Kopplung von zwei Spin-1-Teilchen

Zwei unterscheidbare Spin-1-Teilchen ohne Bahndrehimpuls, d.h. beide Teilchen besetzen ein s-Niveau, können ein Gesamtsystem mit Gesamtspin $S = 0, 1, 2$ bilden. Was gilt jedoch für zwei identische Spin-1-Teilchen? Welche Einschränkungen gibt es?

Aufgabe 3.2: Drei Teilchen mit Spin $1/2$

Für ein System bestehend aus drei Teilchen mit Spin $1/2$ existieren acht Spinzustände. Klassifiziere diese nach ihrem Gesamtspin. Bestimmen Sie alle Eigenvektoren (Spinfunktionen) $|SS_3\rangle$, beschrieben durch die Werte S und S_3 des Gesamtspins $\boldsymbol{S} = \boldsymbol{s}^{(1)} + \boldsymbol{s}^{(2)} + \boldsymbol{s}^{(3)}$. (1 Punkt für die Klassifikation, 2 für das Multiplett mit größtem Spin und 1+1 für die verbleibenden Multipletts).

Aufgabe 3.3: Two particles with total angular momentum zero

Given two particles, each with angular momentum j. Prove, that the wave function of the total two-particle system with vanishing total angular momentum (the singlet) can be written as

$$|\Psi_0^0\rangle = \frac{1}{2j+1} \sum_{m=-j}^{j} (-1)^{m+1/2} |\psi_j^m\rangle \otimes |\psi_j^{-m}\rangle, \quad j \in \mathbb{N}_0 + \frac{1}{2},$$

$$|\Psi_0^0\rangle = \frac{1}{2j+1} \sum_{m=-j}^{j} (-1)^{m} |\psi_j^m\rangle \otimes |\psi_j^{-m}\rangle, \qquad j \in \mathbb{N}_0 .$$

Hint: Recall how the the step operators $J_\pm = J_x \pm \mathrm{i} J_y$ and the component J_z of the total angular momentum $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}^{(1)} + \boldsymbol{J}^{(2)}$ act on a product state $|\psi_j^m\rangle \otimes |\psi_j^{m'}\rangle$ and use that, for example, $c_{jm}^+ = c_{jm'}^+$ for certain m, m'. It is sufficient to prove the result for an integer (or a half-integer) value of j.

Aufgabe 3.4: Vektoroperator

Die kartesischen Komponenten eines Vektoroperators $\boldsymbol{V}$ erfüllen die Kommutationsregeln

$$[L_i, V_j] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk} V_k \, . \tag{3.119}$$

Zeigen Sie, dass dann die Normalkomponenten

$$T_0^{(1)} := V_3 \quad \text{und} \quad T_{\pm 1}^{(1)} := \mp\frac{1}{\sqrt{2}} (V_1 \pm \mathrm{i} V_2)$$

folgende Kommutatorrelationen erfüllen

$$\begin{aligned}
[L_3, T_q^{(1)}] &= \hbar q\, T_q^{(1)} \quad q \in \{0, \pm 1\} \quad \text{und} \\
[L_\pm, T_q^{(1)}] &= \hbar\sqrt{(1 \mp q)(1 \pm q + 1)}\, T_{q\pm 1}^{(1)}.
\end{aligned}$$

Aufgabe 3.5: Tensoroperatoren

Es seien (V_x, V_y, V_z) und (W_x, W_y, W_z) die kartesischen Komponenten zweier miteinander kommutierender Vektoroperatoren. Aus den neun Operatoren $\{V_x W_x, V_x W_y, \dots\}$ kann man wie folgt Tensoroperatoren der Stufe null (Skalar), Stufe eins (Vektor) und Stufe zwei gewinnen

$$\begin{aligned}
S &= \boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{W} = T^{(0)} \\
\boldsymbol{U} &= \boldsymbol{V} \times \boldsymbol{W} = T^{(1)} \\
T_{ij}^{(2)} &= V_i W_j + V_j W_i - \frac{2}{3}\delta_{ij} S.
\end{aligned}$$

a) Für alle drei Operatoren $(S, \boldsymbol{U}, T^{(2)})$ kann man die jeweiligen Normalkomponenten $T_m^{(j)}$ mit maximalen m angeben. Zeigen Sie:

$$\begin{aligned}
T_0^{(0)} &\propto V_0 W_0 - (V_1 W_{-1} + V_{-1} W_1) \\
T_1^{(1)} &\propto V_0 W_1 - V_1 W_0 \\
T_2^{(2)} &\propto V_1 W_1.
\end{aligned}$$

b) Berechnen Sie die verbleibenden Normalkomponenten von $T^{(1)}$ und $T^{(2)}$.

Aufgabe 3.6: Kopplung von drei Drehimpulsen

Wir betrachten Eigenzustände des gesamten Drehimpulses

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}_1 + \boldsymbol{J}_2 + \boldsymbol{J}_3, \tag{3.120}$$

wobei die einzelnen Drehimpulse den Wert 1 haben. Es sei $j(j+1)$ der Eigenwert von $\boldsymbol{J}^2$.

- Was sind die möglichen Werte für j? Wieviel linear unabhängige Zustände gibt es für jeden erlaubten j-Wert?
- Konstruiere den Zustand mit $j = 0$ explizit. Sind $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ und $\boldsymbol{c}$ gewöhnliche 3-er Vektoren, dann gibt es genau einen multilinearen Skalar, nämlich $\boldsymbol{a} \cdot (\boldsymbol{b} \times \boldsymbol{c})$. Finde einen Zusammenhang zwischen dieser Tatsache und Ihrem Resultat für den Zustand

mit $j = 0$.

Aufgabe 3.7: Wigner-Eckart Theorem für skalare Operatoren
Sei $A^{(0)}$ ein skalarer Operator, d.h. er kommutiert mit allen Drehimpulsen:

$$[L_i, A^{(0)}] = 0 \;, \qquad i = 1, 2, 3 \;.$$

Weiterhin ist ein vollständiges Orthonormalsystem $\{|n\ell m\rangle\}$ gegeben mit

$$\begin{aligned} \boldsymbol{L}^2 |n\ell m\rangle &= \hbar^2 \ell(\ell+1)|n\ell m\rangle \\ L_3|n\ell m\rangle &= \hbar m|n\ell m\rangle \end{aligned}$$

und n bezeichnet alle verbleibenden Quantenzahlen. Zeigen Sie, dass

1. $\langle n'\ell' m'|A^{(0)}|n\ell m\rangle = 0$ für $m' \neq m$.
2. $\langle n'\ell' m|A^{(0)}|n\ell m\rangle = 0$ für $l' \neq l$.
3. $\langle n'\ell m|A^{(0)}|n\ell m\rangle = \langle n'\ell m'|A^{(0)}|n\ell m'\rangle$ für alle $-\ell \leq m, m' \leq \ell$.

Aufgabe 3.8: Spinwellenfunktion von Para-Helium
Begründen Sie, dass der bei der Behandlung des Helium-Atoms aufgetretene Parazustand mit Spinwellenfunktion

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_\uparrow \otimes \chi_\downarrow - \chi_\downarrow \otimes \chi_\uparrow\right)$$

einen verschwindenden Gesamtspin hat.
Tipp: Drücken Sie die y- und z-Komponenten der individuellen Spins in

$$\boldsymbol{s}^2 = (\boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2)^2 = \boldsymbol{s}_1^2 + \boldsymbol{s}_2^2 + 2\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2 = \frac{3\hbar^2}{2} + 2\left(s_{1x}s_{2x} + s_{1y}s_{2y} + s_{1z}s_{2z}\right)$$

durch die Aufsteige- und Absteigeoperatoren $s_{1,\pm}$ und $s_{2,\pm}$ aus und benutzen Sie zum Beispiel, dass $s_+\chi_\uparrow = 0$ und $s_+\chi_\downarrow = \hbar\chi_\uparrow$ gelten.

Aufgabe 3.9: Clebsch-Gordan-Koeffizienten
Betrachten Sie eine System aus zwei Drehimpulsen $j_1 = 1$ und $j_2 = 1$. Die Eigenwerte der z-Komponente dieser einzelnen Drehimpulse seien m_1 bzw. m_2. Die Zustände des gesamten Systems seien mit den Quantenzahlen des Gesamtdrehimpulses j und m bezeichnet. Berechnen Sie die Clebsch-Gordan-Koeffizienten für die Quantenzahlen in den folgenden Tabellen (für die Fälle $m = 0$ und $m = 1$) und zusätzlich für den Fall $m = 2$.

$m=0$	$j=2$	$j=1$	$j=0$
$m_1=1,\, m_2=-1$			
$m_1=0,\, m_2=0$			
$m_1=-1,\, m_2=1$			

$m=1$	$j=2$	$j=1$
$m_1=1,\, m_2=0$		
$m_1=0,\, m_2=1$		

Aufgabe 3.10: Drei wechselwirkende Spins

Drei unterschiedliche Atom mit Spin 1/2 seien sehr kalt (effektiv unbeweglich) und wechselwirken nur über ihre intrinsischen magnetischen Momente miteinander, sodass die Energie des Systems näherungsweise durch den folgenden Hamiltonoperator beschrieben werden kann:

$$H = \frac{a}{\hbar^2}\mathbf{s}_1\cdot\mathbf{s}_2 + \frac{b}{\hbar^2}\mathbf{s}_1\cdot\mathbf{s}_3 + \frac{b}{\hbar^2}\mathbf{s}_2\cdot\mathbf{s}_3\ .$$

Welche Energien sind möglich und wie ist deren Entartungsgrad?

Hinweis: Die stationären Zustände sind gleichzeitige Eigenzustände von $\mathbf{s}^2 = (\mathbf{s_1}+\mathbf{s_2}+\mathbf{s_3})^2$, $(\mathbf{s})_z = (\mathbf{s_1}+\mathbf{s_2}+\mathbf{s_3})_z$, $\mathbf{s_{12}}^2 = (\mathbf{s_1}+\mathbf{s_2})^2$, und $\mathbf{s_3}^2$.

Aufgabe 3.11: Quadrupoltensor

Die kartesischen Komponenten des Quadrupoltensors sind

$$Q_{ik} = Q_{ki} = 3x_ix_k - r^2\delta_{ik}, \quad \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix}\sin\vartheta\cos\varphi\\ \sin\vartheta\sin\varphi\\ \cos\vartheta\end{pmatrix}.$$

Der Tensor Q ist symmetrisch und spurlos und hat entsprechend 5 linear unabhängige Komponenten. Bis auf einen Faktor r^2 können sie als Linearkombination der Kugelflächenfunktionen mit $\ell=2$ geschrieben werden.

1. Schreiben Sie die Komponenten Q_{ik} als Linearkombinationen der Y_{2m}.
   Hinweis: Erinnern Sie sich an $Y_{\ell m}\propto \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}$.
2. Was sind die Kommutatoren $[L_k, Y_{\ell m}]$?
   Hinweis: Wenn Sie es nicht wissen, dann wenden Sie den Kommutator auf ein Wellenfunktion im Ortsraum an.
3. Bestimmen Sie die Kommutatoren von L_3 mit den Komponenten Q_{ik}.
4. $-\mathrm{i}[L_3, Q]$ kann als Kommutator einer antisymmetrischen Matrix Ω_3 mit Q geschrieben werden. Bestimmen Sie Ω_3 und begründen Sie diese Beobachtung.

5. Sie sollten zum Beispiel

$$[L_3, Q_{13} + \mathrm{i}Q_{23}] = -Q_{12} + \mathrm{i}(Q_{11} - Q_{33}) \quad \text{und} \quad [L_3, Q_{13} - \mathrm{i}Q_{23}] = -(Q_{13} - \mathrm{i}Q_{23})$$

erhalten. Berechnen Sie nun mit Hilfe der Beziehungen zwischen Q_{ik} und Y_{2m} die Kommutatoren

$$[L_+, Q_{12}] \quad \text{und} \quad [L_-, Q_{12}]\,.$$

Kapitel 4

Zeitabhängige Störungen

Es gibt eine Vielzahl wichtige Probleme, bei denen eine äußere *zeitabhängige Störung* auf ein quantenmechanisches System einwirkt. Wichtige Beispiele sind atomare Strahlungsvorgänge, bei denen Atome mit Licht bestrahlt werden. Die zeitabhängige Störung durch elektromagnetische Strahlung ist verantwortlich für induzierte Absorption und Emission.

4.1 Dysonsche Reihe

Wir betrachten ein ungestörtes System mit zeitunabhängigen Hamilton-Operator H_0, das durch eine zeitabhängige Wechselwirkung, beschrieben durch ein Potential $V(t)$, gestört werde,

$$H(t) = H_0 + V(t). \tag{4.1}$$

Zum Beispiel könnte H_0 ein Atom oder einen Festkörper modellieren und $V(t)$ das Einwirken eines äußeren elektromagnetischen Feldes. Die Lösungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle \tag{4.2}$$

sollen nun in Potenzen des schwachen Störpotentials V entwickelt werden. Da der Großteil der Zeitentwicklung von H_0 herrührt, ist es ratsam ins *Wechselwirkungsbild* (auch Dirac-Bild genannt) zu wechseln. Wir erinnern daran, dass die Zustandsvektoren und die Störung im Wechselwirkungsbild wie folgt aus den entsprechenden Größen im Schrödinger-Bild hervorgehen,

$$|\psi_W\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(t-t_0)H_0/\hbar}|\psi\rangle \quad \text{und} \quad V_W = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(t-t_0)H_0/\hbar}V\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(t-t_0)H_0/\hbar}. \tag{4.3}$$

In diesem Bild sieht die zeitabhängige Schrödingergleichung folgendermaßen aus:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi_W(t)\rangle = V_W(t)|\psi_W(t)\rangle\,. \tag{4.4}$$

Wir wollen annehmen, die Störung werde zu einer Zeit t_a eingeschaltet und zu einer Zeit t_e ausgeschaltet, so dass

$$V(t) = 0 \quad \text{für} \quad t \notin [t_a, t_e]. \tag{4.5}$$

Zu sehr frühen Zeiten ist dann die Wellenfunktion im Wechselwirkungsbild zeitunabhängig. Ihre Zeitentwicklung von $t_0 \ll t_a$ bis zu einer späteren Zeit t wird durch den Propagator S im Wechselwirkungsbild vermittelt,

$$|\psi_W(t)\rangle = S(t,t_0)|\psi_W(t_0)\rangle. \tag{4.6}$$

Der Propagator ist unitär und zur anfänglichen Zeit t_0 gleich dem Einsoperator,

$$S^\dagger(t,t_0)S(t,t_0) = \mathbb{1}_\mathcal{H} \quad , \quad S(t_0,t_0) = \mathbb{1}_\mathcal{H} \quad , \quad S(t,t_0) = S(t,t_1)S(t_1,t_0). \tag{4.7}$$

Die Schrödingergleichung für den Zustandsvektor im Wechselwirkungsbild (4.4) ist äquivalent zur Schrödingergleichung für den Propagator,

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t}(t,t_0) = V_W(t)S(t,t_0)\,. \tag{4.8}$$

Letztere zusammen mit der Anfangsbedingung $S(t_0,t_0) = \mathbb{1}$ sind gleichwertig zur Integralgleichung

$$S(t,t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^t V_W(t_1)S(t_1,t_0)\mathrm{d}t_1. \tag{4.9}$$

Da die Störung erst nach der Zeit t_a wirkt ist $S = \mathbb{1}_\mathcal{H}$ für $t_0 < t < t_a$. Nun iterieren wir diese Integralgleichung mit $S = \mathbb{1}_\mathcal{H}$ als Startwert. In erster Ordnung finden wir

$$S(t,t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^t V_W(t_1)\mathrm{d}t_1, \tag{4.10}$$

und in zweiter Ordnung

$$S(t,t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^t V_W(t_1) + \left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\right)^2\int_{t_0}^t \mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t_2 V_W(t_1)V_W(t_2) \tag{4.11}$$

und entsprechende Formeln für die höheren Ordnungen. Diese wurden in der Quantenmechanik I besprochen.

Wir erinnern an das *zeitgeordnete Produkt* von zeitabhängigen Operatoren $A_1, \dots, A_n$: der Zeitordnungsoperator T ordnet die Faktoren des Produkts dieser Operatoren chronologisch

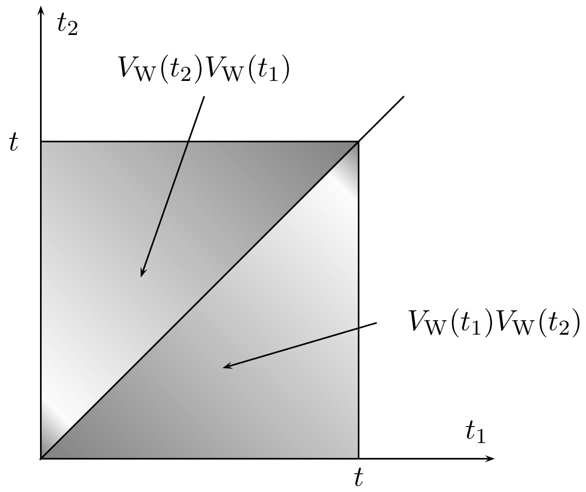
$$T\left(A_1(t_1)\cdots A_n(t_n)\right) = A_{\pi(1)}(t_{\pi(1)})\cdots A_{\pi(n)}(t_{\pi(n)}), \tag{4.12}$$

wobei $\{\pi(1), \dots, \pi(n)\}$ diejenige Permutation von $1, \dots, n$ ist, für welche $t_{\pi(1)} \geq \dots \geq t_{\pi(n)}$ gilt. Im zeitgeordneten Produkt von Operatoren wirkt zuerst der Operator zur frühesten Zeit und zuletzt der Operator zur spätesten Zeit. Insbesondere für zwei Operatoren ist das zeitgeordnete Produkt

$$T\left(A_1(t_1)A_2(t_2)\right) = \theta(t_1 - t_2)A_1(t_1)A_2(t_2) + \theta(t_2 - t_1)A_2(t_2)A_1(t_1). \tag{4.13}$$

Mit der Umformung (vgl. die folgende Abbildung)

$$\begin{aligned} T\left(\int_{t_0}^t V_W(t_1)\right)^2 &= T\left(\int_{t_0}^t \mathrm{d}t_1 V_W(t_2)\int_{t_0}^t \mathrm{d}t_2 V_W(t_2)\right) = \int_{t_0}^t \mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2\, T\big(V_W(t_1)V_W(t_2)\big) \\ &= \int_{t_0}^t \mathrm{d}t_1 V_W(t_1)\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t_2 V_W(t_2) + (t_1 \leftrightarrow t_2) = 2\int_{t_0}^t V_W(t_1)\int_{t_0}^{t_1} V_W(t_2) \end{aligned}$$



und den entsprechenden Umformungen für die Integrale über höhere Potenzen der Wechselwirkung kann die iterative Lösung mit Hilfe des zeitgeordneten Produktes folgendermaßen geschrieben werden:

$$S(t, t_0) = T\left(\sum_{n=0}^\infty \frac{1}{n!}\Big(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\Big)^n \left(\int_{t_0}^t V_W(t_1)\right)^n\right) = T\ \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^t \mathrm{d}t_1 V_W(t_1)\right) \tag{4.14}$$

Diese Dysonsche Reihendarstellung des Propagators in der Wechselwirkungs-Darstellung spielt eine zentrale Rolle in der Streutheorie und insbesondere der störungstheoretischen Berechnung von Streudaten. Falls nämlich der Limes

$$S = \lim_{\substack{t_0 \to -\infty \\ t_1 \to \infty}} S(t_1, t_0) \tag{4.15}$$

existiert und $S^\dagger S = SS^\dagger = \mathbb{1}_{\mathcal{H}}$ ist, dann ist S die sogenannte *Streumatrix* oder kurz S-Matrix. Diese bildet asymptotische Zustände in der Vergangenheit auf asymptotische Zustände in der Zukunft ab,

$$|\psi_{\text{aus}}\rangle = S|\psi_{\text{ein}}\rangle, \quad \text{wobei} \quad |\psi_{\text{ein}}\rangle = |\psi_W(-\infty)\rangle, \quad |\psi_{\text{aus}}\rangle = |\psi_W(\infty)\rangle. \tag{4.16}$$

Wir werden im nächsten Kapitel, das von der Streutheorie handelt, noch mehr über die wichtige S-Matrix zu sagen haben.

4.2 Erste Ordnungs Übergänge und goldene Regel

Das System sei zu einer frühen Zeit t_0 in einem Eigenzustand $|n\rangle$ des ungestörten Hamilton-Operator H_0, $|\psi_{W,n}(t_0)\rangle = |n\rangle$. Wir wollen nun die Wahrscheinlichkeit berechnen, das System zu einer späteren Zeit $t > t_0$, zu der die Störung schon einwirken konnte, in einem anderen Eigenzustand $|m\rangle$ von H_0 zu finden. Wir wollen also die Wahrscheinlichkeit des Übergangs $|n\rangle \longrightarrow |m\rangle$ mit $n \neq m$ bestimmen. In erster Ordnung Störungstheorie nähern wir S in (4.6) durch die Näherungslösung (4.10). Dann ist die Amplitude für den Übergang gegeben durch

$$\begin{aligned} A_{n\to m}(t) &= \langle m_W(t)|\psi_{W,n}(t)\rangle \approx \langle m|n\rangle + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int\limits_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 \big\langle m|V_W(t_1)|n\big\rangle \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int \mathrm{d}t_1 \langle m|\mathrm{e}^{\mathrm{i}(t_1-t_0)H_0/\hbar} V(t_1)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(t_1-t_0)H_0/\hbar}|n\rangle\,, \end{aligned}$$

wobei von $|m_W(t)\rangle = |m\rangle$ und $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$ Gebrauch machten. Benutzen wir nun, dass $|n\rangle$ und $|m\rangle$ Eigenzustände des ungestörten Systems sind, so ergibt sich

$$A_{n\to m}(t) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}E_{mn}(t_1-t_0)/\hbar} V_{mn}(t_1) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{mn}(t_1-t_0)} V_{mn}(t_1), \tag{4.17}$$

mit den Abkürzungen

$$E_{mn} = E_m^{(0)} - E_n^{(0)} = \hbar\omega_{mn} \quad \text{sowie} \quad V_{mn}(t) = \langle m|V(t)|n\rangle \tag{4.18}$$

für die Energiedifferenzen des ungestörten Hamilton-Operators und die Matrixelemente des Störoperators. Deshalb ist die Übergangswahrscheinlichkeit in erster Ordnung Störungstheorie

$$P_{n\to m}(t) = \big|\langle m_W(t)|\psi_{W,n}(t)\rangle\big|^2 = \left|\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{mn}t_1} V_{mn}(t_1)\right|^2 . \tag{4.19}$$

Wir wollen nun die beiden Grenzfälle bei denen die Störung plötzlich (sudden) oder sehr langsam (adiabatisch) eingeschaltet werden, getrennt untersuchen. In der ersten Ordnung Störungstheorie werden wir für beide Grenzfälle auf die gleiche Formel für die Übergangsrate geführt, auf die sogenannte *goldene Regel von Fermi.*

4.2.1 Plötzliches Einschalten

Die Störung $V(t,\boldsymbol{x}) = \theta(t)V(\boldsymbol{x})$ werde zum Zeitpunkt $t = 0$ plötzlich eingeschaltet. Dann ist die Übergangswahrscheinlichkeit in erster Ordnung Störungstheorie

$$P_{n\to m}(t) = \left|\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{mn}t_1} V_{mn}\right|^2 = \frac{4}{\hbar^2}\frac{\sin^2(\frac{1}{2}\omega_{mn}t)}{\omega_{mn}^2}\,\big|V_{mn}\big|^2. \tag{4.20}$$

Das qualitative Verhalten des zeitabhängigen Faktors

$$f_t(\omega) = 4\sin^2(\tfrac{1}{2}\omega t)/\omega^2 \tag{4.21}$$

ist in Abbildung 4.1 gezeigt.

- Für kleine Zeiten $\omega t \ll 1$ strebt der Faktor gegen t^2 und die Übergangswahrscheinlichkeit ist proportional zu t^2.
- Haben Anfangs- und Endzustand die gleiche Energie, dann ist die Übergangswahrscheinlicheit proportional zu t^2. Natürlich verliert die Störungstheorie erster Ordnung ihre Gültigkeit wenn die Übergangswahrscheinlichkeit $P_{n\to m}$ größer als 1 wird.
- Ist das Spektrum diskret, dann oszilliert die Übergangswahrscheinlichkeit $P_{n\to m}$ mit einer Wiederkehrzeit
$$t \approx \frac{2\pi}{\Delta\omega}. \tag{4.22}$$

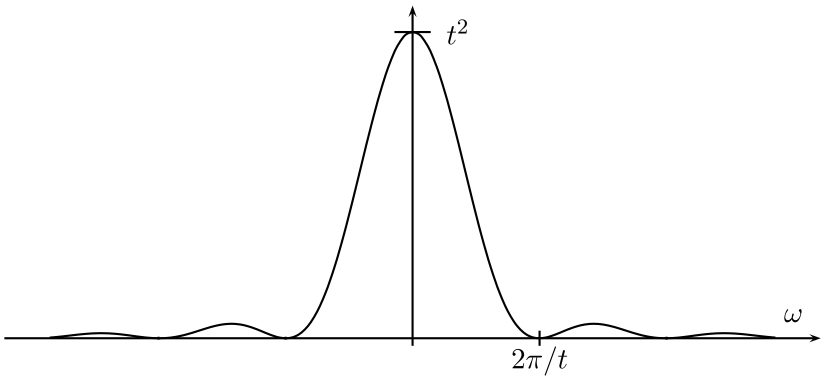


Abbildung 4.1: Die in (4.21) definierte Funktion $f_t(\omega)$ hat zu späten Zeiten ein ausgeprägtes Maximum bei $\omega = 0$.

- Der Faktor $f_t(\omega)$ hat zu sehr späten Zeiten als Funktion von $\omega = \omega_{mn}$ ein ausgeprägtes Maximum am Ursprung, siehe Abbildung 4.1. Es finden nur Übergänge in Zustände statt, deren Energien sehr nahe bei $E_n^{(0)}$ liegen, d.h. für welche
$$t|E_{mn}| \ll 2\pi\hbar \tag{4.23}$$
gilt. Also sind für schnell eingeschaltete Störungen Übergänge am wahrscheinlichsten, für welche die Energie bis auf $2\pi\hbar/t$ erhalten ist.

Wir folgern: in einem System, das sehr lange einer konstanten Störung ausgesetzt wird, werden wegen
$$\lim_{t\to\infty} \frac{4\sin^2(\frac{\omega}{2}t)}{\omega^2 t} \longrightarrow 2\pi\delta(\omega) \tag{4.24}$$
höchstens Übergänge zwischen entarteten Niveaus induziert,
$$P_{n\to m} = \frac{2\pi t}{\hbar^2}\,|V_{mn}|^2\,\delta\big(\omega_{mn}\big) = \frac{2\pi t}{\hbar}\,|V_{mn}|^2\,\delta\big(E_{mn}\big). \tag{4.25}$$
Die δ-Distribution drückt die Energieerhaltung aus. Die *Übergangsrate*, d.h. die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit, ist dann
$$\Gamma_{n\to m}(t) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}P_{n\to m} \approx \frac{2\pi}{\hbar}\,\delta(E_{mn})\,|V_{mn}|^2. \tag{4.26}$$
Diese Formel nennt man nach E. Fermi die *goldene Regel*. Der bemerkenswerte Erfolg dieser Regel ist etwas erstaunlich. Sie kann nicht direkt auf diskrete Zustände angewandt

werden, da für diskrete Niveaus die Wahrscheinlichkeit oszilliert und daher (4.25) nur für nicht allzu lange Zeiten gelten kann. Für entartete Zustände, d.h. für $E_{mn} = 0$, wird die Wahrscheinlichkeit für großes Zeiten größer als Eins und deshalb ist die erste Ordnung Störungstheorie ungültig für derart große Zeiten. Andererseits muss nach (4.26) $E_m^{(0)} \approx E_n^{(0)}$ gelten, damit die Rate nicht verschwindet.

Offensichtlich können wir (4.26) nur anwenden, wenn der Endzustand im Kontinuum liegt, oder die diskreten Niveaus sehr dicht liegen und $t < \infty$ ist. Also muss die Zeit genügend groß sein, damit (4.20) als Funktion der Energie des Endzustandes um die Energie $E_n^{(0)}$ des Anfangzustandes konzentriert ist und die Formel (4.24) anwendbar ist. Gleichzeitig muss ein typischer Niveauabstand δE bei $E_n^{(0)}$ genügend klein sein,

$$\delta E \cdot t \ll 2\pi\hbar, \tag{4.27}$$

damit viele Zustände im Energiebereich um $E_n^{(0)}$ liegen für welche (4.20) von Null verschieden ist. Falls der Endzustand im Kontinuum liegt, ist die zweite Forderung natürlich erfüllt. Die Rate für den Übergang des Zustandes $|n\rangle$ in *irgendeinen* Zustand $|k\rangle$ in der Nähe von $|n\rangle$ ist nun

$$\sum_k P_{n\to k} \approx \sum_k \left|V_{kn}\right|^2 \frac{4\sin^2(E_{kn}t/2\hbar)}{E_{kn}^2}, \tag{4.28}$$

wobei wir über alle Endzustände $|k\rangle$ summieren die nahe bei $|n\rangle$ liegen und Energien im Intervall $2\pi\hbar/t$ um $E_n^{(0)}$ haben. Nehmen wir nun an, dass $V_{kn} \approx V_{mn}$ ist und das Spektrum so dicht ist, dass wir die Summe durch ein Integral approximieren dürfen (d.h. dass die Zeit nicht zu groß ist), dann finden wir die Übergangsrate von $|n\rangle$ in eine Gruppe von Zuständen um $|m\rangle$ die Formel

$$\Gamma_{n\to m} = \dot{P}_{t\to m} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle m|V|n\rangle\right|^2 \rho\left(E_n^{(0)}\right). \tag{4.29}$$

Hier ist $\rho(E)$ die Niveaudichte (Spektraldichte) des ungestörten Hamilton-Operator H_0,

$$\sum_n f(E_n) \approx \int \mathrm{d}E\rho(E)f(E). \tag{4.30}$$

Die Formel (4.29) wird ebenfalls *Fermis goldene Regel* genannt. Sie stammt allerdings von Pauli und nicht von Fermi.

4.2.2 Adiabatische Näherung

Nun betrachten wir den anderen Extremfall, bei dem die Störung sehr langsam eingeschaltet wird. Als Modell für das adiabatisch langsame Einschalten wählen wir

$$V(t,x)=\mathrm{e}^{\eta t}V(x)\quad,\quad \eta>0 \tag{4.31}$$

und lassen am Ende der Rechnung $\eta\to 0$ gehen. Setzen wir dies in die erste Ordnungs-Formel (4.17) für die Amplitude ein, dann erhalten wir

$$A_{n\to m}(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\,\mathrm{e}^{\eta t_1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{mn}(t_1-t_0)}V_{mn}. \tag{4.32}$$

In der Vergangenheit ($t_1\to-\infty$) ist das Potential exponentiell klein und wir können die untere Integrationsgrenze t_0 durch $-\infty$ ersetzen. Dann finden wir (bis auf eine Phase)

$$A_{n\to m}(t)=\frac{\mathrm{e}^{(\eta+\mathrm{i}\omega_{mn})t}}{\mathrm{i}\eta-\omega_{mn}}\frac{V_{mn}}{\hbar}. \tag{4.33}$$

Deshalb ist die Übergangswahrscheinlichkeit gleich

$$P_{n\to m}=\frac{\mathrm{e}^{2\eta t}}{\omega_{mn}^2+\eta^2}\frac{|V_{mn}|^2}{\hbar^2}. \tag{4.34}$$

Als Funktion der Frequenz des Endzustands ist der erste Faktor auf der rechten Seite eine Glockenkurve um die Frequenz des Anfangzustands mit einer Breite von η. Deshalb ist die wahrscheinliche Frequenzänderung beim Übergang kleiner gleich η. Für kleine η ist die Übergangsrate gleich

$$\Gamma_{n\to m}=\dot{P}_{n\to m}\approx\frac{2\eta}{\omega_{mn}^2+\eta^2}\frac{|V_{mn}|^2}{\hbar^2}. \tag{4.35}$$

Wegen der als bekannt vorausgesetzten Formel

$$\frac{2\eta}{\omega^2+\eta^2}\longrightarrow 2\pi\delta(\omega) \tag{4.36}$$

finden wir im adiabatischen Limes diesselbe Formel für die Übergangsrate wie beim plötzlichen Einschalten, also die goldene Regel (4.26). Diese Formel für die Übergangsrate ist ziemlich robust gegenüber den Details des Einschaltvorgangs.

Elektrische Anregung des Wasserstoffatoms: Ein Wassertoffatom im Grundzustand befinde sich in einem elektrischen Feld, das ein- und ausgeschaltet wird, so dass

$$\boldsymbol{E}(t) = \boldsymbol{E}_0\, \mathrm{e}^{-t^2/\tau^2} \tag{4.37}$$

ist. Wir wollen berechnen, wie groß die Wahrscheinlichkeit dafür ist, das Atom nach einer langen Zeit ($t \gg \tau$) im angeregten Zustand mit Quantenzahlen $n = 2$, $\ell = 1$ und $m = 0$ zu finden. Wir legen das elektrische Feld in die z-Richtung und wählen das Potential

$$V = eE_0 z\, \mathrm{e}^{-t^2/\tau^2}. \tag{4.38}$$

Da $t \gg \tau$ sein soll, können wir die obere und untere Grenze bei der Zeitintegration in (4.17) gleich ∞ beziehungsweise $-\infty$ setzen. Dann erhalten wir für die Übergangsamplitude

$$\begin{aligned} A_{|100\rangle\to|210\rangle} &= \frac{eE_0}{\mathrm{i}\hbar}\langle 210|z|100\rangle \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{210}-\omega_{100})t_1}\mathrm{e}^{-t_1^2/\tau^2} \\ &= \frac{eE_0}{\mathrm{i}\hbar}\langle 210|z|100\rangle \tau\sqrt{\pi}\mathrm{e}^{-\omega^2\tau^2/4}, \end{aligned}$$

wobei $\omega = \omega_{210} - \omega_{100}$ gleich der Kreisfrequenz eines Photons ist, das beim Übergang $|210\rangle \to |100\rangle$ emittiert wird. Entsprechend ist die Übergangswahrscheinlichkeit

$$P_{|100\rangle\to|210\rangle} = \pi\left(\frac{eE_0\tau}{\hbar}\right)^2 \left|\langle 210|z|100\rangle\right|^2 \mathrm{e}^{-\omega^2\tau^2/2}. \tag{4.39}$$

Man beachte, dass für $\tau \to \infty$ die Wahrscheinlichkeit gegen Null strebt. Wenn das Feld sehr langsam ein- und wieder ausgeschaltet wird, geht die Übergangswahrscheinlichkeit gegen Null. Das Atom passt sich adiabatisch dem anwesenden elektrischen Feld an, ohne einen Übergang „zu machen“.

4.2.3 Periodische Störungen

Als letztes und vielleicht wichtigstes Beispiel untersuchen wir periodische Störungen des durch H_0 beschriebenen Systems. Wir betrachten den hermiteschen Störoperator mit harmonischer Zeitabhängigkeit,

$$V(\omega, t) = \mathrm{e}^{\eta t}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}V(\boldsymbol{x}) + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}V^\dagger(\boldsymbol{x})\right), \tag{4.40}$$

wobei wir noch einen adiabatischen Einschaltvorgang zulassen, damit das System zu frühen Zeiten in einem Eigenzustand $|n\rangle$ des ungestörten Hamilton-Operator H_0 präpariert werden kann. Mit $(V^\dagger)_{mn} = \bar{V}_{nm}$ lautet die Übergangsamplitude in erster Ordnung

$$A_{n\to m}(\omega, t) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1\, \mathrm{e}^{\eta t_1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{mn}t_1}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_1}V_{mn} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t_1}\bar{V}_{nm}\right). \tag{4.41}$$

Wiederum können wir t_0 durch $-\infty$ ersetzen, so dass

$$A_{n\to m}(\omega, t) = \frac{1}{\hbar}\left(\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}V_{mn}}{\omega_{nm} + \omega + \mathrm{i}\eta} + \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\bar{V}_{nm}}{\omega_{nm} - \omega + \mathrm{i}\eta}\right)\mathrm{e}^{\eta t + \mathrm{i}\omega_{mn}t}. \tag{4.42}$$

Nach quadrieren und ableiten bezüglich der Zeit findet man die Übergangsrate

$$\begin{aligned}\Gamma_{n\to m}(\omega, t) = 1\hbar^2\mathrm{e}^{2\eta t}&\left(\frac{2\eta}{(\omega_{nm}+\omega)^2+\eta^2}\,|V_{mn}|^2 + \frac{2\eta}{(\omega_{nm}-\omega)^2+\eta^2}\,|V_{nm}|^2\right)\\ &+ \frac{2}{\hbar^2}\mathrm{e}^{2\eta t}\left(\frac{(\eta-\mathrm{i}\omega)\,\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega t}}{\omega_{nm}^2+(\omega+\mathrm{i}\eta)^2}\,V_{mn}V_{nm} + \frac{(\eta+\mathrm{i}\omega)\,\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega t}}{\omega_{nm}^2+(\omega-\mathrm{i}\eta)^2}\,\bar{V}_{mn}\bar{V}_{nm}\right).\end{aligned}$$

Offensichtlich rühren die Terme in der letzten Zeile von der Interferenz zwischen den Störungen mit den Zeitabhängigkeiten $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$ und $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$. Im adiabatischen Limes tragen wegen

$$\frac{2\eta}{(\omega_{nm}+\omega)^2+\eta^2} \xrightarrow{\eta\to 0} 2\pi\delta(\omega_{nm}+\omega) \tag{4.43}$$

in den ersten beiden Termen nur Endzustände bei für die $E_{nm} = \pm\hbar\omega$ gilt. Mitteln wir die Rate über einige Perioden π/ω, so fallen die Interferenzterm weg und wir finden

$$\bar{\Gamma}_{n\to m}(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar^2}\left(\delta(\omega_{mn}-\omega)|V_{nm}|^2 + \delta(\omega_{mn}+\omega)|V_{mn}|^2\right) \tag{4.44}$$

oder nach der Summe über dicht liegende Endzustände (beziehungsweise Integration über Endzustände im Kontinuum) und für $|V_{mn}| = |V_{nm}|$ die Formel

$$\sum_m \bar{\Gamma}_{n\to m}(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{mn}|^2\left(\rho\big(E_n^{(0)}+\hbar\omega\big) + \rho\big(E_n^{(0)}-\hbar\omega\big)\right). \tag{4.45}$$

Dies ist die goldene Regel für periodische Störungen. Die Interpretation des Resultats ist wie folgt:

- Ist die Energie $E_m^{(0)}$ größer als $E_n^{(0)}$ und ist $\omega > 0$ dann verschwindet der zweite Term in (4.44). Ist weiter die Störfrequenz ω gleich der Energiedifferenz zwischen End- und Anfangzustand des ungestörten Systems, also in Resonanz, dann ist der

Übergang am wahrscheinlichsten (im Grenzfall $t \to \infty$ muss $E_{mn} = \hbar\omega$ exakt gelten). Beschreibt H_0 ein Atom und V ein elektromagnetisches Feld, dann absorbiert das Atom ein Energiequant $\hbar\omega$ (ein Photon) und wird angeregt.

- Ist $E_m^{(0)}$ dagegen kleiner als $E_n^{(0)}$ und ist $\omega > 0$ dann trägt nur der zweite Term in (4.44) bei. Die Störung veranlasst das System einen Energiequant $\hbar\omega$ zu emittieren.

Also beschreibt die Rate (4.45) zum Beispiel die Absorption von Photonen aus dem Strahlungsfeld durch Atome und die *induzierte* Emission von Atomen in das Strahlungsfeld. Die *spontane* Emission von Photonen wird von den Nullpunktsfluktuationen des elektromagnetischen Feldes verursacht und kann im Rahmen der nichtrelativistischen Quantenmechanik nicht verstanden werden. Wir werden darauf bei der Behandlung des Strahlungsfeldes zurückkommen.

4.3 Zweite Ordnungs Übergänge

Falls $\langle m|V(t)|n\rangle$ für alle Zeiten verschwindet, z.B. aufgrund einer Auswahlregel, dann gibt es in der ersten Ordnung Störungstheorie keinen von der Störung V induzierten Übergang von $|n\rangle$ nach $|m\rangle$. Aber Übergänge zweiter Ordnung können trotzdem passieren. Approximieren wir die exakte Lösung $|\psi_{W,n}(t)\rangle$ durch die Dysonreihe bis zur zweiten Ordnung, dann finden wir für die *Übergangsamplitude in zweiter Ordnung* Störungstheorie

$$\big\langle m_W(t)|\psi_{W,n}(t)\big\rangle = \frac{1}{(\mathrm{i}\hbar)^2}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t_2\,\big\langle m|V_W(t_1)V_W(t_2)|n\big\rangle. \tag{4.46}$$

Hier schieben wir die Zerlegung der Identität mit den Vektoren $|k\rangle$ zwischen die beiden Potentiale ein und ersetzen noch $V_W(t)$ durch $\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t/\hbar}V(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0t/\hbar}$. Dies führt auf

$$\big\langle m_W(t)|\psi_{W,n}(t)\big\rangle = \frac{1}{(\mathrm{i}\hbar)^2}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t_2\sum_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{mk}t_1}\langle m|V(t_1)|k\rangle\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{kn}t_2}\langle k|V(t_2)|n\rangle. \tag{4.47}$$

Wir schalten das Potential sehr langsam ein und parametrisieren den Einschaltvorgang wie in (4.31). Wenn wir wiederum t_0 durch $-\infty$ ersetzen, führen die beiden Zeitintegrationen auf die Amplitude

$$A_{n\to m}(t) = -\frac{1}{\hbar^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{mn}t}\frac{\mathrm{e}^{2\eta t}}{\omega_{nm}+2\mathrm{i}\eta}\sum_k\frac{V_{mk}V_{kn}}{\omega_{nk}+\mathrm{i}\eta}. \tag{4.48}$$

Nun quadrieren wir die Amplitude und leiten die resultierende Wahrscheinlichkeit nach der Zeit ab. Für kleine η findet man die Übergangsrate

$$\Gamma_{n\to m}(t) = \frac{2\pi}{\hbar^4}\Big|\sum_k \frac{V_{mk}V_{kn}}{\omega_{nk}+\mathrm{i}\eta}\Big|^2_{\eta\to 0}\,\delta\big(\omega_{mn}\big). \tag{4.49}$$

Dies ist eine weitere Version der goldenen Regel. Sie ist wiederum anwendbar für endliche Zeiten auf ein dicht liegendes diskretes Spektrum oder aufs Kontinuum.

Das Resultat kann folgendermaßen interpretiert werden: Statt den verbotenen direkten Übergang von $|n\rangle$ nach $|m\rangle$ zu machen gelingt es dem System, diesen Übergang in 2 Schritten zu vollführen. Zuerst „springt“ es von $|n\rangle$ in den Zwischenzustand $|k\rangle$ und danach von diesem Zwischenzustand in den Endzustand $|m\rangle$. Bei den (virtuellen) Übergängen in und aus dem Zwischenzustand braucht die Energie nicht erhalten zu sein. Da wir zuerst die Amplituden der verschiedenen Umwege von $|n\rangle$ nach $|m\rangle$ aufsummieren und danach quadrieren *interferieren* die verschiedenen Amplituden im Allgemeinen.

4.4 Absorption und Emission von Strahlung

Mit den uns nun zur Verfügung stehenden Resultaten können wir die Emission und Absorption von Strahlung behandeln. Dazu erinnern wir uns an den Hamilton-Operator für die Wechselwirkung eines Elektrons mit einem zeitabhängigen magnetischen Feld, beschrieben durch das Vektorpotential $\boldsymbol{A}(t,\boldsymbol{x})$,

$$H = \frac{1}{2m}\Big(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}(t,\boldsymbol{x})\Big)^2 + V, \qquad V = e\varphi. \tag{4.50}$$

Wie bei den Untersuchungen über geladene Teilchen im elektromagnetischen Feld oder dem Wasserstoffatom im Magnetfeld schreiben wir

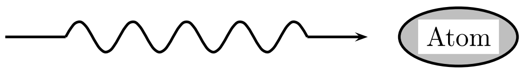
$$H_0 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(r) \tag{4.51}$$

und wählen die Coulomb-Eichung $\nabla\cdot\boldsymbol{A} = 0$. Vernachlässigen wir den Term quadratisch in $\boldsymbol{A}$, dann finden wir

$$H = H_0 + V \quad \text{mit} \quad V = -\frac{e}{mc}\boldsymbol{A}(t,\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{p}. \tag{4.52}$$

Wir betrachten die elektrische Ladung e (beziehungsweise die dimensionslose Feinstrukturkonstante $\alpha = e^2/\hbar c$) als kleinen Parameter. Dann ist der hier vernachlässigte Term $(e\boldsymbol{A})^2$ von zweiter Ordnung. Dieser Term trägt nur zu Prozessen bei, an denen zwei Photonen beteiligt sich, also der Streuung von Licht an Atomen oder der Zwei-Photonen Emission oder Zwei-Photonen Absorption. Er trägt nicht bei zum Übergang eines Atoms unter Emission oder Absorption *eines* Photons. Die Übergangs*wahrscheinlichkeiten* in erster Ordnung Störungstheorie sind proportional zum Quadrat des Störoperators, also zu $e^2 \approx \alpha$. Die Prozesse zweiter Ordnung sind gemäß (4.49) proportional zur vierten Potenz der Störung, also zu α^2. Die Übergangswahrscheinlichkeiten für Prozesse mit einem Photon sind also von der Ordnung $O(\alpha)$ während diejenigen mit zwei Photonen von der Ordnung $O(\alpha^2)$ sind. Da die elektromagnetische Wechselwirkung relativ schwach ist, $\alpha \approx 1/137$, dürfen wir uns im Folgenden auf Einphotonenprozesse beschränken. Wir können an dieser Stelle nicht beweisen, dass jedes $\boldsymbol{A}(t, \boldsymbol{x})$ mit der Emission oder Absorption eines einzelnen Photons assoziiert ist. Dazu muss man das elektromagnetische Feld quantisieren. Ich werde hoffentlich am Ende dieser Vorlesung darauf zurückkommen.

Wir haben es also mit Prozessen folgender Art zu tun:



Im vorherigen Abschnitt berechneten wir die Übergangsraten für periodische Störungen in der ersten Ordnung Störungstheorie. Wenn wir eine inkohärente Überlagerung von kontinuierlichen Frequenzen in der Störung mit einer Spektralverteilung $\rho_s(\omega)$ annehmen, ist die Übergangsrate gegeben durch

$$\Gamma_{n\to m} = \int d\omega \rho_s(\omega) \Gamma_{n\to m}(\omega). \tag{4.53}$$

Für $\omega_m > \omega_n$ handelt es sich um Absorption und für $\omega_m < \omega_n$ um induzierte Emission,

$$\Gamma^{\text{Abs.}}_{n\to m} = \frac{2\pi}{\hbar^2}\,\rho_s(\omega_{mn})\,\big|V_{mn}\big|^2 \quad , \quad \Gamma^{\text{Em.}}_{n\to m} = \frac{2\pi}{\hbar^2}\rho_s(\omega_{nm})\,\big|V_{mn}\big|^2. \tag{4.54}$$

Für das Atom im elektromagnetischen Feld wollen wir den speziellen Fall betrachten, bei dem ein Valenz-Elektron vorliegt, also zum Beispiel ein wasserstoffähnliches Atom. Der Wechselwirkungsterm ist dann V in (4.52), worin wir für $\boldsymbol{A}$ eine ebene Welle ansetzen

$$\boldsymbol{A}(t, \boldsymbol{x}) = \left(a e^{-i\omega t + i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} + a^\dagger e^{i\omega t - i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\right)\boldsymbol{e} \quad \text{mit} \quad |\boldsymbol{k}|c = \omega, \quad |\boldsymbol{e}| = 1. \tag{4.55}$$

Die Coulomb-Eichbedingung übersetzt sich in die Bedingung $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e} = 0$. Wir wählen den

Zeitnullpunkt so, daß die Konstante a rein imaginär wird und setzen

$$\mathrm{i}\frac{\omega a}{c} = \mathrm{i}ka = \mathcal{E}/2. \tag{4.56}$$

Das elektrische und magnetische Feld der polarisierten Welle lauten

$$\boldsymbol{E} = \mathcal{E}\cos(\omega t - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{e} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{B} = \mathcal{E}\cos(\omega t - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\,\hat{\boldsymbol{k}}\times\boldsymbol{e} \tag{4.57}$$

Nach den Regeln der Elektrodynamik ist die Energiedichte der Welle gegeben durch

$$u(\omega) = \frac{1}{8\pi}\left(\boldsymbol{E}^2 + \boldsymbol{B}^2\right) \tag{4.58}$$

und hat im zeitlichen Mittel den Wert

$$\bar{u}(\omega) = \frac{\mathcal{E}^2}{8\pi} \tag{4.59}$$

Ein Vergleich der Störung

$$V(\omega,t) = -\frac{e}{mc}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p} = \frac{e\mathcal{E}}{m\omega}\sin(\omega t - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{p} \tag{4.60}$$

mit (4.40) zeigt, dass der Operator $V(\boldsymbol{x})$ in dieser Formel mit

$$V = \frac{\mathrm{i}e\mathcal{E}}{2m\omega}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\,\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{p} \tag{4.61}$$

zu identifizieren ist und damit finden wir folgende Absorptionsrate

$$\Gamma^{\text{Abs.}}_{n\to m} = \frac{e^2\pi}{m^2\omega^2\hbar^2}\bar{u}(\omega_{mn})\left|\langle m|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{kx}}\,\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{p}|n\rangle\right|^2 \tag{4.62}$$

ist. Jetzt müssen wir noch das Matrixelement berechnen. Für Wellenlängen, die groß verglichen mit dem Atoms sind,

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} \gg d_{\text{Atom}} \tag{4.63}$$

dürfen wir im Matrixelement die Dipol-Näherung

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{kx}} \approx 1 \tag{4.64}$$

machen. Benutzen wir zusätzlich

$$\boldsymbol{p} = \frac{\mathrm{i}m}{\hbar}[H_0, \boldsymbol{x}], \tag{4.65}$$

und dass $|n\rangle, |m\rangle$ Eigenzustände des ungestörten Hamilton-Operator H_0 sind, dann vereinfacht sich das Matrixelement wie folgt

$$\Gamma^{\text{Abs.}}_{n\to m} = \frac{\pi}{\hbar^2}\bar{u}(\omega_{mn})\big|\langle m|\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{d}|n\rangle\big|^2, \quad \text{wobei} \quad \boldsymbol{d} = e\boldsymbol{x} \tag{4.66}$$

den *Dipol-Operator* bezeichnet. In MKSA-Einheiten lautet das Endergebnis

$$\Gamma^{\text{Abs.}}_{n\to m} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2(4\pi\epsilon_0)}\bar{u}(\omega_{mn})\big|\langle m|\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{d}|n\rangle\big|^2 \tag{4.67}$$

Das maßgebliche Matrixelement für den Übergang ist $\langle m|\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{d}|n\rangle$. Die Bedingung, dass es nicht Null ist, führt zu Auswahlregeln, zum Beispiel

$$\Delta\ell = \pm 1 \quad \text{und} \quad \Delta m = 0, \pm 1 \qquad \text{(elektrische Dipolstrahlung).} \tag{4.68}$$

Abschliessend betrachten wir den Fall einer inkohärenten Überlagerung von Wellenvektoren $\boldsymbol{k}$ und Polarisationen $\boldsymbol{e} \perp \boldsymbol{k}$. Das Quadrat des Dipol-Matrixelements $\langle m|\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{d}|n\rangle$ ist dann zu ersetzen durch

$$\frac{1}{4\pi}\int \mathrm{d}\Omega_{\boldsymbol{e}}\langle n|\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{e}|m\rangle\langle m|\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{d}|n\rangle = \frac{1}{3}\langle n|\boldsymbol{d}|m\rangle\langle m|\boldsymbol{d}|n\rangle, \tag{4.69}$$

wobei wir die Identität

$$\frac{1}{4\pi}\int \mathrm{d}\Omega_{\boldsymbol{e}}\, e_i e_j = \frac{1}{3}\delta_{ij} \tag{4.70}$$

benutzten. Die führt auf die Übergangsrate ($\omega_m > \omega_n$)

$$\Gamma^{\text{Abs.}}_{n\to m} = \Gamma^{\text{Em.}}_{m\to n} = \frac{4\pi^2}{3\hbar^2(4\pi\epsilon_0)}\big|\langle m|\boldsymbol{d}|n\rangle\big|^2\bar{u}(\omega_{mn}) \equiv B_{nm}u(\omega_{mn}), \tag{4.71}$$

wobei der *Einstein-Koeffizient* $B_{nm} = B_{mn}$ auftritt. Wir erinnern daran, dass wir nur Absorption und induzierte Emission behandelt haben. Die spontane Emission, bei der kein Licht von außen eingestrahlt wird, wird durch den obigen Formalismus nicht erfasst. Zur Behandlung der spontanen Emission muss das Strahlungsfeld quantisiert werden. Alternativ kann man auch die Einsteinschen Beziehungen zwischen den Koeffizienten B_{nm}

für induzierte Emission und Absorption und den Koeffizienten A_{nm} für spontane Emission benutzen.

4.5 Aufgaben zu Kapitel 4

Aufgabe 4.1: Zeitabhängige Störungstheorie

Betrachten Sie ein Teilchen der Masse m, dessen freie Propagation durch ein schwaches Potential der Form $U(t,\boldsymbol{x}) = u(t)V(\boldsymbol{x})$ mit

$$u(t) = \frac{T}{\sqrt{2\pi\alpha^2}}\,\mathrm{e}^{-\frac{t^2}{2\alpha^2}}$$

gestört wird. Sowohl T als auch α sind reelle Konstanten mit der Dimensionalität der Zeit.

Berechnen Sie in erster Ordnung zeitabhängiger Störungstheorie die Übergangsamplitude von einem Anfangszustand (bei $t = -\infty$) mit Wellenvektor $\boldsymbol{k}$, zu einem Endzustand (bei $t = +\infty$) mit Wellenvektor $\boldsymbol{k}'$.

Aufgabe 4.2: Elektronenspinresonanz

Ein freies Elektron sei in einer Kavität eingeschlossen, in der ein homogenes und konstantes Feld $\boldsymbol{B} = B_0\boldsymbol{e}_z$ angelegt sei. Zur Zeit $t = 0$ werde noch ein in der $x, y-$Ebene rotierendes Magnetfeld

$$\boldsymbol{B}' = B_0' \begin{pmatrix} \cos\omega t \\ \sin\omega t \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad B_0' \text{ konstant.}$$

1. Bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeit $P(t)$ dafür, dass der Spin des Elektrons in (verglichen zur Anfangsrichtung) umgekehrte Richtung zeigt.
2. Für welche Frequenz ω des rotierenden Magnetfeldes wird die zeit-gemittelte Umkehr-Wahrscheinlichkeit $\bar{P}$ maximal (das zugehörige Magnetfeld B_0 nennt man Resonanzfeld)? Was ist der maximale Wert von $\bar{P}$?

Aufgabe 4.3: Wasserstoffatom zwischen Kondensatorplatten

Ein Wasserstoffatom im Grundzustand sei zwischen den Platten eines Kondensators lokalisiert. Ein zeitabhängiges räumlich homogenes elektrisches Feld wird nun angelegt,

$$\boldsymbol{E} = \begin{cases} 0 & \text{für } t < 0, \\ \boldsymbol{E}_0 \, \mathrm{e}^{-t/\tau} & \text{für } t > 0\,, \end{cases}$$

dabei zeige $\boldsymbol{E}_0$ in die z-Richtung.

1. Bestimmen Sie in erster Ordnung Störungstheorie die Wahrscheinlichkeit dafür, zu späteren Zeiten $t \gg \tau$ das Atom in einem der $2p$ Zustände zu finden.
2. Wiederholen Sie die Betrachtung für den $2s$ Zustand.

Aufgabe 4.4: Rabi Formel

Gegeben ist der Hamiltonoperator $H(t) = H_0 + V(t)$ mit

$$H_0 = E_1 \, |1\rangle\langle 1| + E_2 \, |2\rangle\langle 2| \,, \qquad V(t) = \gamma \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} |1\rangle\langle 2| + \gamma \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} |2\rangle\langle 1| \,,$$

mit positiven $\omega, \gamma > 0$ und es sei $E_2 > E_1$. Die zwei Zustände $|1\rangle, |2\rangle$ bilden eine Orthonormalbasis für den Hilbertraum. Gesucht ist der Zustand $|\psi(t)\rangle$, welcher die Schrödingergleichung

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle$$

mit Anfangsbedingung $|\psi(t=0)\rangle = |1\rangle$ erfüllt.

1. Lösen Sie das Problem exakt. Gehen sie dabei wie folgt vor:
   - Benutzen Sie die Entwicklung des Zustandes $|\psi(t)\rangle$ in der Basis $|n\rangle$: $|\psi(t)\rangle = c_1(t) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1 t/\hbar} |1\rangle + c_2(t) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2 t/\hbar} |2\rangle$. Welche Anfangsbedingungen müssen $c_1(t)$ und $c_2(t)$ erfüllen?
   - Setzen Sie den Zustand $|\psi(t)\rangle$ in die Schrödingergleichung ein. Sie erhalten zwei gekoppelte Differentialgleichunge für $c_1(t)$ und $c_2(t)$.
   - Lösen Sie diese Differentialgleichungen!
2. Lösen Sie das Problem in erster Ordnung Störungstheorie.
3. Vergleichen Sie die Ergebnisse.

Aufgabe 4.5: β-Zerfall

Beim β-Zerfall eines Tritiumatoms (^{3}H) entsteht ein positiv geladenes ^{3}He-Ion.

Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeiten, dass sich das Elektron in der Atomhülle nach dem Zerfall im Grundzustand bzw. im ersten angeregten Zustand befindet, wenn es vor dem Zerfall im Grundzustand war.

Aufgabe 4.6: Spinflip im Magnetfeld

Ein Elektron fliegt in die y-Richtung durch ein homogenes Magnetfeld $B\boldsymbol{e}_z$. Sein Spin hat sich in die positive z-Richtung eingestellt. Von einem Ort $y = 0$ an, welchen das Elektron zur Zeit $t = 0$ passiert, tritt es in eine homogenens Zusatzfeld $B'\boldsymbol{e}_x$ ein, das es zur Zeit t bei $y = \ell$ wieder verl

Aufgabe 4.7: Oszillator im elektrischen Feld

Betrachten Sie einen geladenen eindimensionalen harmonischen Oszillator, der sich für $t < 0$ im Grundzustand befindet. Zum Zeitpunkt $t = 0$ wird plötzlich ein homogenes elektrisches Feld angelegt. Das entsprechende Potential V in $H = H_0 + V$ ist $V = eEx\,\theta(t)$. Berechnen Sie

1. Den exakten Ausdruck für die Wahrscheinlichkeit dafür, dass der Oszillator unter dem Einfluß dieser Störung angeregt wird.
2. Die Anregungswahrscheinlichkeit in der ersten Ordnung Störungstheorie für plötzliches Einschalten.
3. Vergleiche die beiden Resultate

Hinweise: Bezeichnet $\psi_n(x)$ den n'ten Eigenzustand des harmonischen Oszillators mit Kreisfrequenz ω und Masse m, dann gilt

$$\int \psi_n(x+x_0)\psi_0(x)\,\mathrm{d}x = \mathrm{e}^{-\xi^2/2}\frac{\xi^n}{\sqrt{n!}}, \quad \xi = \alpha x_0, \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \tag{4.72}$$

Ist $\psi(t,x) = \sum a_n(t)\psi_n(x)$ die Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung, dann ist die gesuchte Wahrscheinlichkeit $1 - |a_0(t)|^2$.

Aufgabe 4.8: H-Atom in zeitabhängigen elektrischen Feld

Ein Wasserstoffatom wird in ein homogenes elektrisches Feld $\boldsymbol{E}(t)$ gebracht, das folgende Zeitabhängigkeit hat

$$\boldsymbol{E}(t) = \theta(t)\boldsymbol{E}_0\mathrm{e}^{-\gamma t}, \quad \gamma > 0, \quad \boldsymbol{E}_0 \text{ konstant.} \tag{4.73}$$

Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass für $t \to \infty$ das zu sehr frühen Zeiten im

Grundzustand befindliche Wasserstoffatom einen Übergang nach $2p$ macht?

Kapitel 5

Streutheorie

> *... und alle sogenannten Naturwissenschaftler sind grundsätzlich immer auf verzerrte und karge Informationen, die ihnen über Sinnesorgane und Meßinstrumente übermittelt werden, angewiesen.*
> Paul Tholey

Die Berechnung und Analyse von Streuprozessen in der Atom-, Kern- und Elementarteilchenphysik ist ein wichtiger Anwendungsbereich der Quantenmechanik. Man kann die Streuung von Teilchen oder Strahlung dazu benutzen, um die *Struktur von Objekten zu studieren.* Ein klassischen Beispiel ist die Elektronenstreuung an Atomkernen. Da in diesem Fall die elektromagnetische Wechselwirkung zwischen Elektronen und Ladungs- sowie Magnetisierungverteilung des Kerns bekannt ist, kann man Aufschluss über die elektromagnetische Struktur des Kerns gewinnen. Andererseits können Streuprozesse dazu verwendet werden, um noch *unbekannte Wechselwirkungen* zu studieren. Ein Beispiel ist die Nukleon-Nukleon Streuung, aus der man viel über die Kernkräfte erfahren kann.

Bei einer *elastischen Streuung* bleiben die inneren Zustände der kollidierenden Teilchen unverändert. Werden die inneren Zustände eines oder mehrerer an der Streuung beteiligten Teilchen geändert, so spricht man von *inelastischer Streuung*.

Die Quantenmechanik der Stoßvorgänge geht auf die klassische Arbeit von Max Born zurück [15]. Born hat seine bahnbrechende Arbeit über Streutheorie auch zur Aufklärung über die physikalische Bedeutung der formalen Gesetze der Quantenmechanik, die kurz zuvor von Heisenberg, Jordan und ihm entwickelt wurden, geschrieben.

5.1 Wirkungsquerschnitte

Auf ein streuendes Target treffe ein (praktisch) monoenergetischer Teilchenstrahl mit Teilchenstromdichte j (Zahl der einfallenden Teilchen pro Zeit- und Flächeneinheit senkrecht zur Ausbreitungsrichtung). Die Wechselwirkung der einlaufenden Teilchen untereinander sei vernachlässigbar, so dass diese unabhängig am Target streuen. Mit Detektoren messe man die Zahl N_S der pro Zeiteinheit in den Raumwinkel $\mathrm{d}\Omega$ in die Richtung $\Omega = (\theta, \varphi)$ gestreuten Teilchen. Diese ist proportional zu j:

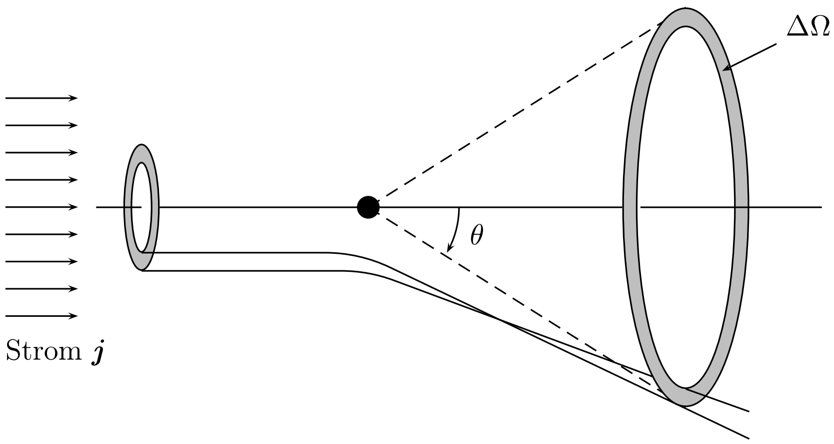
$$N_S = j\Sigma(\Omega)\mathrm{d}\Omega. \tag{5.1}$$

Das Target bestehe aus einer großen Anzahl N von atomaren oder subatomaren Streuzentren. Deren Abstand sei so groß, dass man die Kohärenz der an ihnen gestreuten Wellen vernachlässigen kann (dies darf man nicht bei der kohärenten Beugung von Elektronen oder Röntgenstrahlen an Kristallen). Jedes Streuzentrum wirkt dann so, als ob es allein wäre. Außerdem muss man das Target genügend dünn halten um Mehrfachstreuung vernachlässigen zu können. Dann ist N_s proportional zu N

$$N_S = jN\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\mathrm{d}\Omega. \tag{5.2}$$

$\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$ hat die Dimension einer Fläche und ist der *differentielle Wirkungsquerschnitt* des Streuprozesses. Der *totale Wirkungsquerschnitt* ist

$$\sigma = \int_{S^2} \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\mathrm{d}\Omega. \tag{5.3}$$



5.2 Potentialstreuung

Wir betrachten die Streuung eines Teilchens an einem kurzreichweitigen Potential[1]. Wir wollen annehmen, dass die streuenden Teilchen zu früher Zeit weit weg vom streuenden Objekt waren. Die freien Teilchen werden dann durch ein Wellenpaket

$$\psi(t_0, \boldsymbol{x}) = \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\, a(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \tag{5.4}$$

beschrieben. Das Wellenpaket sei um $\boldsymbol{k}_0$ konzentriert, d.h. $a(\boldsymbol{k})$ sei nur für Wellenzahlvektoren nahe bei $\boldsymbol{k}_0$ oder Impulse nahe $\boldsymbol{p}_0 = \hbar\boldsymbol{k}_0$ ungleich Null. Wir müssen herausfinden, wie die Wellenfunktion $\psi(t, \boldsymbol{x})$ zu späteren Zeiten aussieht, nachdem die Teilchen am Target streuten.

Ähnlich wie bei der Untersuchung der Reflexion und Transmission von Wellenpaketen an eindimensionalen Potenzialbarrieren (siehe Vorlesung Quantenmechanik I) konstruieren wir zuerst die exakten Eigenzustände $\psi_k(\boldsymbol{x})$ der zeitunabhängigen Schrödingergleichung

$$\big(\Delta + k^2\big)\psi_k(\boldsymbol{x}) = U(\boldsymbol{x})\psi_k(\boldsymbol{x}), \qquad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E_k, \quad U(\boldsymbol{x}) = \frac{2m}{\hbar^2}V(\boldsymbol{x}). \tag{5.5}$$

Wir entwickeln den Anfangszustand $\psi(t_0)$ nach diesen Eigenzuständen

$$\psi(t_0, \boldsymbol{x}) = \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3} b(\boldsymbol{k})\psi_k(\boldsymbol{x}), \tag{5.6}$$

wobei gebundene Zustände mit $E_k < 0$ nicht beitragen, da sie weit weg vom Streuzentrum verschwinden. Die Wellenfunktion zu späteren Zeiten ist dann

$$\psi(t, \boldsymbol{x}) = \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\, b(\boldsymbol{k})\, \psi_k(\boldsymbol{x})\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_k(t-t_0)/\hbar}. \tag{5.7}$$

Sie beschreibt die auf das Target einfallenden und die gestreuten Teilchen.

Eine Lösung ψ_k der stationären Schrödingergleichung kann als Lösung einer Integralgleichung dargestellt werden. Mit der Greenschen Funktion für auslaufende Wellen,

$$\big(\Delta + k^2\big)G_0(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') = \delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'), \qquad G_0(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') = -\frac{1}{4\pi}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|} \tag{5.8}$$

ist die Schrödingergleichung äquivalent zur *Lippmann-Schwinger-Integralgleichung*

[1] Das Coulomb-Potential ist langreichweitig und muss separat behandelt werden.

$$\psi_k(\boldsymbol{x}) = \psi_0(\boldsymbol{x}) + \int G_0(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')U(\boldsymbol{x}')\psi_k(\boldsymbol{x}')\mathrm{d}^3x', \tag{5.9}$$

wobei ψ_0 eine Lösung der kräftefreien Schrödingergleichung ist. Wegen (5.8) ist ein ψ_k, welches diese Integralgleichung erfüllt, offensichtlich eine Lösung der Schrödingergleichung. Wir untersuchen jetzt noch das asymptotische Verhalten von ψ_k weit weg vom Streuzentrum. Wir nehmen an, das Potential $V(\boldsymbol{x})$ sei bei $\boldsymbol{x}=0$ genügend lokalisiert, so dass nur $\boldsymbol{x}'$ in der Nähe des Streuzentrums zum Integral beitragen. Wir dürfen also $r' = |\boldsymbol{x}'| << r$ annehmen. Wegen

$$|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'| \sim r - \frac{1}{r}\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}' \quad , \quad \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|} \sim \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\boldsymbol{x}'} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{k}' = k\frac{\boldsymbol{x}}{r}, \tag{5.10}$$

ist

$$\psi_k(\boldsymbol{x}) \overset{r\to\infty}{\longrightarrow} \psi_0(\boldsymbol{x}) - \frac{1}{4\pi}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\boldsymbol{x}'}U(\boldsymbol{x}')\psi_k(\boldsymbol{x}')\mathrm{d}^3x'. \tag{5.11}$$

Wählen wir für die kräftefreie Lösung ψ_0 eine einlaufende ebene Welle, dann hat die entsprechende Lösung der Lippmann-Schwinger-Gleichung (5.9) die asymptotische Form

$$\psi_k(\boldsymbol{x}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}} + \psi_s \overset{r\to\infty}{\longrightarrow} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}} + f(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})\,\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}, \tag{5.12}$$

wobei wir die wichtige *Streuamplitude*

$$f(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\boldsymbol{x}'}V(\boldsymbol{x}')\psi_k(\boldsymbol{x}')\mathrm{d}^3x', \qquad \boldsymbol{k}' = k\hat{\boldsymbol{x}}\,, \tag{5.13}$$

eingeführt haben. Nach einer Multiplikation der Lösung (5.12) mit $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_k t/\hbar}$ wird klar, dass der zweite Term eine auslaufende Kugelwelle mit demselben k wie die einlaufende ebene Welle (der erste Term) beschreibt. Bei Potentialstreuung ist, wie erwartet, die Energie erhalten. Als nächstes werden wir zeigen, dass die Koeffizienten $a(\boldsymbol{k})$ in (5.4) und $b(\boldsymbol{k})$ in (5.6) übereinstimmen. Dazu ersetzen wir in der Entwicklung (5.4) für $\psi(t_0,\boldsymbol{x})$ die freien Lösungen $\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}) = \psi_0(\boldsymbol{x})$ mit Hilfe der Lippmann-Schwinger-Gleichung (5.9) durch die exakten Eigenzustände $\psi_k(\boldsymbol{x})$,

$$\begin{aligned}\psi(t_0,\boldsymbol{x}) &= \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}a(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \\ &= \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}a(\boldsymbol{k})\left(\psi_k(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{4\pi}\int \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}U(\boldsymbol{x}')\psi_k(\boldsymbol{x}')\mathrm{d}^3x'\right). \end{aligned} \tag{5.14}$$

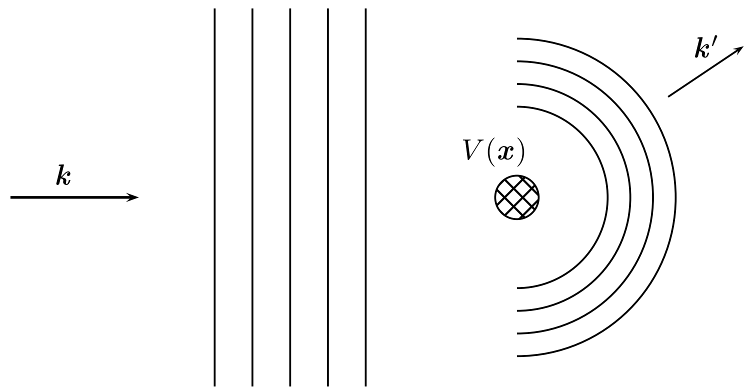


Abbildung 5.1: *Einlaufende ebene Wellen werden am Potential gestreut.*

Da $a(\boldsymbol{k})$ bei $\boldsymbol{k}_0$ konzentriert ist, können wir

$$\psi_k(\boldsymbol{x}) \sim \psi_{k_0}(\boldsymbol{x}) \quad \text{und} \quad k \sim \boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{k}}_0 \tag{5.15}$$

setzen. Dann wird das k-Integral im letzten Term in (5.14) proportional zu

$$\int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\, a(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{k}}_0|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\psi_{k_0}(\boldsymbol{x}') = \psi(t_0,\hat{\boldsymbol{k}}_0|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|)\cdot\psi_{k_0}(\boldsymbol{x}'). \tag{5.16}$$

Da aber $\hat{\boldsymbol{k}}_0|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|$ und der Träger des Wellenpakets $\psi(t_0,\boldsymbol{x})$ auf gegenüberliegenden Seiten des Streuzentrums liegen, verschwindet der erste Faktor auf der rechten Seite und

$$\psi(t_0,\boldsymbol{x}) = \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3} a(\boldsymbol{k})\psi_k(\boldsymbol{x}). \tag{5.17}$$

Die Entwicklungskoeffizienten für das anfängliche Wellenpaket sind also unabhängig davon ob wir das Paket nach ebene Wellen oder exakten Eigenzustände entwickeln, $a(\boldsymbol{k}) = b(\boldsymbol{k})$.

Weit weg vom Streuer hat die zeitabhängige Lösung (5.7), worin wir $b(\boldsymbol{k})$ durch $a(\boldsymbol{k})$ ersetzen dürfen, wegen (5.12) die Form

$$\begin{aligned}\psi(t,\boldsymbol{x}) &\sim \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3} a(\boldsymbol{k})\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\mathrm{i}E_k(t-t_0)/\hbar)} + \frac{f(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-E_k(t-t_0)/\hbar)}\right)\\ &= \psi_0(t,\boldsymbol{x}) + \frac{f(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}_0)}{r}\psi_0(t,r\hat{\boldsymbol{k}}_0), \quad \boldsymbol{k}' = k\,\hat{\boldsymbol{x}}.\end{aligned} \tag{5.18}$$

Diese Form der Lösung hat eine anschauliche Interpretation: $\psi_0(r\hat{\boldsymbol{k}}_0)$ ist der Wert den die Wellenfunktion am Punkte $\boldsymbol{x}$ haben würde, wenn das Streuzentrum den Weg des

Teilchens von der Vorwärtsrichtung in die Richtung $\boldsymbol{k}'$ abgelenkt hätte, siehe Figur (5.2). Aber dieser Anteil ist mit der Streuamplitude/r multipliziert, welche also gerade die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür sein muss, dass der Weg des Teilchens abgelenkt wurde.

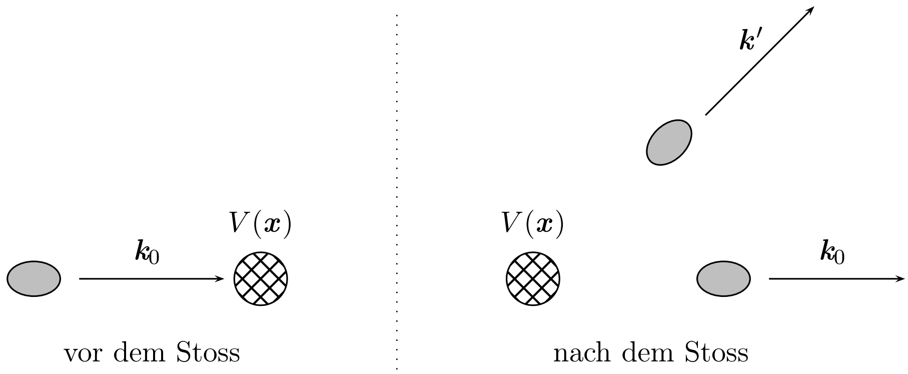


Abbildung 5.2: *Das einlaufende Wellenpaket wird am Potential gestreut*

Nun wollen wir noch die Streuamplitude mit dem Wirkungsquerschnitt in Verbindung bringen. Dazu bestimmen wir die Teilchenstromdichte

$$\boldsymbol{j} = \frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\left(\bar{\psi}\nabla\psi - \psi\nabla\bar{\psi}\right), \tag{5.19}$$

die für eine einlaufende ebene Welle gleich $\hbar\boldsymbol{k}/m$ ist, für die Streuwelle ψ_s

$$\boldsymbol{j}_s \sim \frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\frac{\boldsymbol{x}}{r}\left(\bar{\psi}_s\partial_r\psi_s - \psi_s\partial_r\bar{\psi}_s\right) \sim \frac{\hbar}{m}\boldsymbol{k}'\frac{|f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')|^2}{r^2}. \tag{5.20}$$

Wir benutzten $\boldsymbol{k}' = k\boldsymbol{x}/r$ und dass für die elastische Potentialstreuung $E_k = E_{k'}$ ist. Für genügend lokalisierte Wellenpakete gibt es keine Interferenz zwischen ψ_0 und ψ_s und differentielle Wirkungsquerschnitt ist

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{\text{Strom der Streuwelle in } \mathrm{d}\Omega_{r\to\infty}}{\text{einfallende Stromdichte}} = \left|f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')\right|^2. \tag{5.21}$$

Er ist unmittelbar mit der Streuamplitude verknüpft.

5.2.1 Bornsche Reihe

Ausgangspunkt für die Herleitung der *Bornschen Reihe* ist die oben diskutierte Lippmann-Schwinger-Gleichung

$$\psi_k = \psi_0 + (G_0U)\psi_k. \tag{5.22}$$

Im Ortsraum ist G_0U der in (5.9) angegebene Fredholmsche Integralkern. Die Lippmann-Schwinger-Gleichung kann als Funktionalgleichung im Banachraum $\mathcal{C}$ der stetigen und beschränkten Funktionen mit Supremum-Norm

$$\|\psi\|_\infty = \sup_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^3} |\psi(\boldsymbol{x})| \tag{5.23}$$

aufgefasst werden. Falls nun die Norm $\|G_0U\|_\infty < 1$ ist, dann hat die Gleichung (5.9) eine eindeutige Lösung, nämlich

$$\psi_k = \psi_0 + (G_0U)\psi_0 + (G_0U)^2\psi_0 + \cdots = \frac{1}{1-G_0U}\psi_0. \tag{5.24}$$

Das diese für $\|G_0U\|_\infty < 1$ absolut konvergente *Neumannsche Reihe* eine Lösung liefert, sieht man durch gliedweise Anwendung von G_0U sofort. Die Eindeutigkeit folgt aus

$$\|\psi_1-\psi_2\|_\infty = \|(G_0U)(\psi_1-\psi_2)\|_\infty \leq \|G_0U\|_\infty \, \|\psi_1-\psi_2\|_\infty < \|\psi_1-\psi_2\|_\infty \tag{5.25}$$

für zwei Lösungen, woraus unmittelbar $\psi_1=\psi_2$ folgt. Wir wollen jetzt noch untersuchen, für welche Potentiale die Operatornorm des Integraloperators G_0U kleiner 1 ist. Wegen

$$|(G_0U\psi)(\boldsymbol{x})| \leq \frac{1}{4\pi}\int \frac{|U(\boldsymbol{x}')|}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\mathrm{d}^3x' \, \|\psi\|_\infty, \tag{5.26}$$

genügt es, eine obere Schranke für das Integral zu finden. Es gilt für jedes $\boldsymbol{x}$ und ρ

$$\begin{aligned}\int \frac{|U(\boldsymbol{x}')|}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\mathrm{d}^3x' &= \int\limits_{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|\geq\rho} \frac{|U(\boldsymbol{x}')|}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\mathrm{d}^3x' + \int\limits_{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|<\rho} \frac{|U(\boldsymbol{x}')|}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\mathrm{d}^3x' \\ &\leq \frac{1}{\rho}\|U\|_1 + \|U\|_2\left(\int_{|\boldsymbol{z}|<\rho} |\boldsymbol{z}\,|^{-2}\mathrm{d}^3z\right)^{1/2} \\ &= \frac{1}{\rho}\|U\|_1 + \sqrt{4\pi\rho}\,\|U\|_2,\end{aligned} \tag{5.27}$$

wobei wir die *Schwartzsche Ungleichung*

$$(f,g) \leq \|f\|_2\|g\|_2 \tag{5.28}$$

benutzten. Damit hat G_0U eine endliche Norm, falls $V\in L_1(\mathbb{R}^3)\cap L_2(\mathbb{R}^3)$ ist. Die rechte Seite in (5.27) ist minimal für $\sqrt{\pi}\rho_{\min}^{3/2}=\|U\|_1/\|U\|_2$ und für $\rho_{\min}$ ist sie

$$3\pi^{1/3}\|U\|_1^{1/3}\|U\|_2^{2/3}. \tag{5.29}$$

Also ergibt unsere grobe Abschätzung der Norm des Integrationsoperators in der Schwinger-Lippmann-Gleichung die Abschätzung

$$\|G_0U\|_\infty\leq\frac{3}{4}\pi^{-2/3}\|U\|_1^{1/3}\|U\|_2^{2/3}. \tag{5.30}$$

Ist die Norm größer als 1 dann wird sie kleiner 1 für eine genügend kleine Kopplungskonstante λ in λV.

Für schwache Potentiale oder hohe Energien (große k in G_0) ist die *1. Bornsche Näherung* eine brauchbare Approximation. In dieser Näherung ist

$$\psi_k\sim\psi_0+(G_0U)\psi_0 \tag{5.31}$$

und wir erhalten für die Streuamplitude (5.13) in dieser Näherung die einfache Formel

$$f_{\text{Born}}(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}V(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}^3x\,,\quad \text{wobei}\quad \boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}' \tag{5.32}$$

den Impulsübertrag bezeichnet. In erster Bornscher Näherung ist die Streuamplitude also proportional zur Fourier-Transformierten des Potentials. Besonders einfach sind die Verhältnisse für kugelsymmetrische Potentiale. Mit $\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}=qr\cos\alpha$ finden wir

$$f_{\text{Born}}=-\frac{m}{\hbar^2}\int_0^\infty \mathrm{d}r r^2\int_0^\pi d\alpha\sin\alpha\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}qr\cos\alpha}V(r). \tag{5.33}$$

Setzen wir $\cos\alpha=z$, dann lässt sich das Winkelintegral leicht berechnen,

$$f_{\text{Born}}(k,\theta)=-\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{q}\int_0^\infty rV(r)\sin(qr)\mathrm{d}r. \tag{5.34}$$

Der *Streuwinkel* θ ist der Winkel zwischen ein- und auslaufenden Wellenvektoren:

$$q^2=k^2+k^2-2\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k}'\Longrightarrow q=k\sqrt{2-2\cos\theta}=2k\sin\frac{\theta}{2}. \tag{5.35}$$

Ein in der Kernphysik relevantes Beispiel ist das *Yukawa-Potential*

$$V = g\frac{\mathrm{e}^{-\mu r}}{r}, \qquad \mu = 1/r_0. \tag{5.36}$$

Es beschreibt näherungsweise die starke Wechselwirkung zwischen Nukleonen und kommt durch den Austausch von Pionen der Masse $\hbar/r_0 c \approx 140\,\mathrm{MeV}$ zustande. Die Länge r_0 wird als Reichweite des Potentials interpretiert und entspricht der Compton-Wellenlänge der ausgetauschten Teilchen.

Das Integral in (5.34) lautet

$$-\frac{2m}{\hbar^2}\frac{g}{q}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\mu r}\sin(qr)\mathrm{d}r = -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{g}{\mu^2+q^2} \tag{5.37}$$

und führt auf folgende Streuamplitude in der 1. Bornschen Näherung,

$$f_{\mathrm{Born}}(k,\theta) = -\frac{2mg}{\hbar^2}\frac{1}{4k^2\sin^2(\theta/2)+\mu^2} \tag{5.38}$$

und den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{Born}}}{\mathrm{d}\Omega} = \left(\frac{mg}{2\hbar^2 k^2}\right)^2\left(\frac{1}{\sin^2\frac{\theta}{2}+(\mu/2k)^2}\right)^2. \tag{5.39}$$

Führt man den (singulären) Grenzübergang $\mu \to 0$ durch und setzt $g = e^2$ sowie $\hbar^2 k^2 = 2mE$ ein, so erhält man die aus der klassischen Mechanik schon bekannte Rutherford-Formel für die Streuung am Coulomb-Potential.

5.2.2 Elastische Streuung von Elektronen an Atomen

Wir betrachten die Streuung von Elektronen an einem neutralen Atom. Für genügend hohe Elektronenenergien ist die Bornsche Näherung gültig und gleichzeitig können Austauscheffekte zwischen streuenden Elektronen und Atomelektronen vernachlässigt werden. Wir behandeln das Atom nach Thomas und Fermi. Der Kern am Ursprung und die Ladungsverteilung der Atomelektronen ρ erzeugt ein Potential $V = -e\varphi$ gemäß

$$\Delta\varphi = 4\pi e\left(Z\delta(\boldsymbol{x}) - \rho(\boldsymbol{x})\right). \tag{5.40}$$

Die Fourier-Transformierte von V, multipliziert mit q^2, ist

$$\begin{aligned} q^2\tilde{V}(q) &= -e\int q^2 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}\varphi(\boldsymbol{x})\mathrm{d}^3x = e\int \Delta\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}\right)\varphi(\boldsymbol{x})\mathrm{d}^3x \\ &= 4\pi e^2\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}\left(Z\delta(\boldsymbol{x})-\rho(\boldsymbol{x})\right)\mathrm{d}^3x = 4\pi e^2\left(Z-F(\boldsymbol{q})\right), \end{aligned} \tag{5.41}$$

wobei F der sogenannte *Formfaktor* der elektronischen Ladungsverteilung ist,

$$F(\boldsymbol{q}) = \int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}\rho(\boldsymbol{x})\mathrm{d}^3x \quad \text{mit} \quad F(0)=Z. \tag{5.42}$$

Wir betrachten ein neutrales Atom für das die Ladung der Elektronen $F(0)$ gleich Z ist. Für eine kugelsymmetrischen Ladungsverteilung können wir über die Winkel integrieren und erhalten die einfachere Formel

$$F(q) = \frac{4\pi}{q}\int_0^\infty \sin(qr)\rho(r)\,r\mathrm{d}r. \tag{5.43}$$

Für die Streuamplitude in erster Bornscher Näherung (5.32) ergibt sich

$$f_{\text{Born}}(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}) = -2m\left(\frac{e}{\hbar q}\right)^2\big(Z-F(q)\big), \quad q=|\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}|,, \tag{5.44}$$

und wir finden mit (5.21) den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = 4m^2\left(\frac{e}{\hbar q}\right)^4\big(Z-F(q)\big)^2. \tag{5.45}$$

Diskussion: Für ein Wasserstoffatom in Grundzustand ist

$$\rho(r) = \frac{Z\mathrm{e}^{-r/a}}{8\pi a^3}, \qquad F(q) = \frac{Z}{(1+a^2q^2)^2}. \tag{5.46}$$

Für einen großen Impulsübertrag $aq \gg 1$ ist $F(q) \ll Z$ ist. Dies gilt auch für allgemeinere Ladungsdichten und folgt nach Anwendung des Riemann-Lebesgue Lemmas auf (5.42). Ein großer Impulsübertrag bedeutet wegen

$$\sin\frac{\theta}{2} = \frac{q}{2k} \gg \frac{1}{2ka} \tag{5.47}$$

auch Streuung mit großem Streuwinkel. Für Weitwinkelstreuung reduziert sich der Querschnitt also im Wesentlichen auf die *Rutherford-Formel* für die Streuung am Atomkern

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Rutherford}} = \left(\frac{2me^2 Z}{\hbar^2 q^2}\right)^2 \tag{5.48}$$

oder mit $q = 2k\sin(\theta/2)$

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Rutherford}} = \left(\frac{Ze^2}{2mv^2}\right)^2 \frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}}. \tag{5.49}$$

Für die Coulombstreuung ist diese Formel sogar exakt. Im anderen Grenzfall mit kleinem Impulsübertrag $qa \leq 1$ kann der Kern nicht mehr aufgelöst werden und deshalb wird, wie erwartet, die Abschirmung der Elektronen wichtig.

5.3 Die Coulombstreuung

Das Coulomb-Potential fällt im Unendlichen nur langsam ab und deshalb nimmt die Coulombstreuung eine Sonderrolle ein. Ganz egal wie weit auseinander zwei Teilchen sind - sie spüren immer die gegenseitige Coulombkraft. Durch diese langreichweitige Wechselwirkung wird das asymptotische Verhalten der stationären Streuwelle $\psi_k(\boldsymbol{x})$ modifiziert. Dies kann man wegen dem asymptotischen Verhalten der gebundenen Zustände

$$f_{n\ell} \sim r^{n-1}e^{-\kappa r}, \quad \kappa = \frac{1}{na_0} \tag{5.50}$$

schon vermuten. Da $n = me^2/\hbar^2\kappa$ ist, haben diese für große Radien die Form

$$f_{n\ell} \sim \frac{1}{r}\, e^{-\kappa r + (me^2/\hbar^2\kappa)\log r}. \tag{5.51}$$

Für die asymptotische Form der Streuzustände mit $E > 0$ erwarten wir dieselbe Form, nur mit κ durch $\pm ik$ ersetzt,

$$R \sim \frac{1}{r}e^{\pm i(kr - \gamma\log r)}, \qquad \gamma = -\frac{me^2}{\hbar^2 k} = -\frac{1}{a_0 k}. \tag{5.52}$$

Diese Vermutung wird sich als richtig erweisen.

Wir betrachten die Streuung eines geladenen Teilchens mit Ladung $Z_1 e$ an einem Coulombfeld $V=-Z_2e/r$. Die zeitunabhängige Schrödingergleichung lautet

$$\left(-\varDelta+\frac{2m}{\hbar^2}\frac{Z_1Z_2e^2}{r}-\frac{2mE}{\hbar^2}\right)\psi=0. \tag{5.53}$$

Wir setzen

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{1}{2}mv^2\quad\text{und}\quad\gamma=\frac{Z_1Z_2e^2}{\hbar v} \tag{5.54}$$

und mit diesen Abkürzungen vereinfacht sich die Schrödingergleichung zu

$$\left(\varDelta+k^2-\frac{2\gamma k}{r}\right)\psi=0. \tag{5.55}$$

Für eine länge der z-Achse einlaufende ebene Welle setzen wir die Lösung in der Form

$$\psi(\boldsymbol{x})=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}\phi(r-z),\quad r=|\boldsymbol{x}| \tag{5.56}$$

an. Benutzen wir in (5.55) die Identitäten

$$\varDelta\psi=(\varDelta\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz})\phi+2(\nabla\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz})(\nabla\phi)+\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}\varDelta\phi=\left(-k^2\phi+2\mathrm{i}k\partial_z\phi+\varDelta\phi\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} \tag{5.57}$$

und

$$\partial_z\phi=\left(\frac{z}{r}-1\right)\phi'\quad\text{sowie}\quad\varDelta\phi=\phi''+\frac{2}{r}\phi'+\left(1-\frac{2z}{r}\right)\phi'', \tag{5.58}$$

dann finden wir für ϕ die einfache Differentialgleichung

$$\left(u\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}u^2}+(1-\mathrm{i}ku)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u}-\gamma k\right)\phi(u)=0,\quad u=r-z, \tag{5.59}$$

oder mit $\xi=\mathrm{i}ku=\mathrm{i}k(r-z)$

$$\left(\xi\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}+(1-\xi)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}+\mathrm{i}\gamma\right)\phi(\xi)=0. \tag{5.60}$$

Dies ist die *konfluente hypergeometrische Differentialgleichung* [17]

$$z\frac{\mathrm{d}^2\phi}{\mathrm{d}z^2}+(b-z)\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}z}-a\phi=0, \tag{5.61}$$

mit $a=-\mathrm{i}\gamma, b=1$ und $z=\xi$. Die reguläre Lösung dieser Differentialgleichung ist die konfluente hypergeometrische Reihe (Kummersche Funktion) $F(a,b,z)$ mit dem asymptotischen Verhalten für $-\pi/2 < \arg(z) < \pi/2$

$$\begin{aligned}F(a,b,z) \sim &\frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)}(-z)^{-a}\left(1-\frac{a(1+a-b)}{z}+O(1/z^2)\right)\\ &+\frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)}\mathrm{e}^z z^{a-b}\left(1+O(1/z)\right).\end{aligned}$$

Die Lösung von (5.60) ist also

$$\phi(u) = CF(-\mathrm{i}\gamma, 1, \xi = \mathrm{i}ku), \tag{5.62}$$

wobei C ein Normierungsfaktor ist. Sie hat die asymptotische Form

$$\phi(u) = CF(-\mathrm{i}\gamma,1,\mathrm{i}ku) \sim C\frac{(-\mathrm{i}ku)^{\mathrm{i}\gamma}}{\Gamma(1+\mathrm{i}\gamma)}\left(1+\frac{\gamma^2}{\mathrm{i}ku}\right)+C\frac{(\mathrm{i}ku)^{-\mathrm{i}\gamma}\mathrm{e}^{\mathrm{i}ku}}{\mathrm{i}ku\Gamma(-\mathrm{i}\gamma)}. \tag{5.63}$$

Nun ist

$$(-\mathrm{i}ku)^{\mathrm{i}\gamma} = \left(\mathrm{e}^{\log(ku)-\mathrm{i}\pi/2}\right)^{\mathrm{i}\gamma} = \mathrm{e}^{\pi\gamma/2+\mathrm{i}\gamma\log(ku)}, \qquad \Gamma(1-\mathrm{i}\gamma) = -\mathrm{i}\gamma\Gamma(-\mathrm{i}\gamma) \tag{5.64}$$

und es folgt

$$\phi(u) \sim C\mathrm{e}^{\pi\gamma/2}\left(\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma\log(ku)}}{\Gamma(1+\mathrm{i}\gamma)}\left(1+\frac{\gamma^2}{\mathrm{i}ku}\right)-\frac{\mathrm{i}\gamma\mathrm{e}^{(\mathrm{i}ku-\mathrm{i}\gamma\log(ku)}}{\mathrm{i}ku\Gamma(1-\mathrm{i}\gamma)}\right). \tag{5.65}$$

Setzen wir dies in (5.56) ein und benutzen

$$ku = k(r-z) = kr(1-\cos\theta) = 2kr\sin^2\frac{\theta}{2}, \tag{5.66}$$

dann ergibt sich

$$\psi(r,\theta) \sim \frac{C\mathrm{e}^{\pi\gamma/2}}{\Gamma(1+\mathrm{i}\gamma)}\left(\left(1+\frac{\gamma^2}{2\mathrm{i}kr\sin^2\frac{\theta}{2}}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz+\mathrm{i}\gamma\log k(r-z)}+f(\theta)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr-\mathrm{i}\gamma\log(2kr)}}{r}\right) \tag{5.67}$$

mit Streuamplitude

$$f(\theta) = \frac{\gamma\Gamma(1+\mathrm{i}\gamma)}{2k\Gamma(1-\mathrm{i}\gamma)}\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right)^{-1-\mathrm{i}\gamma}. \tag{5.68}$$

Der erste Term in (5.67) entspricht einer einlaufenden Welle $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}$, die durch die langreichweitige Coulombwechselwirkung mit dem Faktor

$$\left(1+\frac{\gamma^2}{2\mathrm{i}kr\sin^2\frac{\theta}{2}}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma\log k(r-z)} \tag{5.69}$$

gestört wird. Die Wahrscheinlichkeitsstromdichte dieser Welle weit weg vom Streuer lautet

$$j=C^2\frac{\hbar k}{m}\left|\frac{\mathrm{e}^{\pi\gamma/2}}{\Gamma(1+\mathrm{i}\gamma)}\right|^2. \tag{5.70}$$

Der zweite Term in (5.67) entspricht einer auslaufenden Kugelwelle, welche noch eine zusätzliche logarithmische Phase enthält. Der zugehörige Fluss in den Raumwinkel $\mathrm{d}\Omega$ ist asymptotisch

$$j_r r^2\mathrm{d}\Omega=C^2\frac{\hbar k}{m}\left|\frac{\mathrm{e}^{\pi\gamma/2}}{\Gamma(1+\mathrm{i}\gamma)}\right|^2|f(\theta)|^2\mathrm{d}\Omega. \tag{5.71}$$

Deshalb ist der Wirkungsquerschnitt

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=\frac{j_r r^2}{j}=|f(\theta)|^2=\frac{\gamma^2}{4k^2\sin^4\frac{\theta}{2}}=\left(\frac{Z_1Z_2e^2}{2mv^2}\right)^2\frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}}. \tag{5.72}$$

Dies stimmt einerseits mit dem klassischen Ausdruck, und andererseits mit der Bornschen Näherung für die Weitwinkelstreuung von Elektronen an Atomen überein. Dies ist eine Besonderheit des Coulombfeldes.

Der Wirkungsquerschnitt (5.72) divergiert in die Vorwärtsrichtung $\theta=0$. Der Grund dafür ist die lange Reichweite des Coulomb-Potentials: selbst einlaufende Teilchen mit großen Impaktparameter werden noch ein wenig gestreut. In der Realität wird jede Ladung durch andere Ladungen abgeschirmt, so dass für große Impaktparameter das einlaufende Teilchen ein abgeschirmtes Coulomb-Potential sieht. Bei der Streuung an neutralen Atomen ist der differentielle Wirkungsquerschnitt auch in die Vorwärtsrichtung endlich.

Wir studieren die Pole der Coulomb-Streuamplitude (5.68) als Funktion der Energie. Die meromorphe Gammafunktion hat wegen

$$\Gamma(z)=\frac{\Gamma(z+n)}{z(z+1)\cdots(z+n-1)}\quad\text{und}\quad\Gamma(1)=1, \tag{5.73}$$

woraus unmittelbar

$$\Gamma(z-n)\longrightarrow\frac{1}{z}(-1)^n\frac{1}{n!}\quad\text{für}\quad z\to 0 \tag{5.74}$$

folgt, einfache Pole bei $z=-n\in\{0,-1,-2,\dots\}$ mit Residuen $(-1)^n/n!$. Die $\Gamma-$Funktion besitzt keine Nullstellen in der ganzen komplexen $z-$Ebene. Deshalb hat die Streuamplitude (5.72) einfache Pole für

$$1 + \mathrm{i}\gamma = -n \qquad \text{oder für} \qquad k \in \frac{\mathrm{i}Z_1Z_2}{a_0 n}, \quad n \in \mathbb{N}. \tag{5.75}$$

In der komplexen Energieebene sind die Pole an den Stellen

$$\begin{aligned} E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{Z_1Z_2}{a_0}\right)^2 \frac{1}{n^2} \\ &= -\frac{(Z_1Z_2)^2}{2} mc^2 \left(\frac{\alpha}{n}\right)^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots . \end{aligned} \tag{5.76}$$

Dies sind genau die Energien der gebundenen Zustände in einem Coulombfeld $-Z_2e/r$. In der $k-$Ebene liegen die Pole auf der positiven imaginären Achse. Nur dann sind die Wellenfunktionen $\sim \exp(ikr)$ normierbar. Diese Eigenschaft der Streuamplitude, nämlich dass die Pole der Streuamplitude zu gebundenen Zuständen gehören, ist (unter bestimmten Annahmen) auch für allgemeinere Potentiale gültig.

5.4 Partialwellen

Ist das Potential radialsymmetrisch, dann ist der Drehimpuls erhalten. Wir können die Eigenfunktionen als Linearkombinationen der Kugelfunktionen schreiben und diese Entwicklung ist mit der Zeitentwicklung verträglich. Wir entwickeln zuerst die einfallende ebene Welle in Kugelfunktionen. Wählen wir die 3-Achse in Richtung von $\boldsymbol{k}$, dann ist

$$\begin{aligned} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \mathrm{i}^\ell (2\ell+1) P_\ell(\cos\theta) j_\ell(kr) \\ &= \frac{1}{2}\sum_{\ell=0}^{\infty} \mathrm{i}^\ell (2\ell+1) P_\ell(\cos\theta)\Big(h_\ell(kr) + h_\ell^\dagger(kr)\Big), \end{aligned} \tag{5.77}$$

wobei

$$P_\ell(\cos\theta) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_{\ell 0}(\theta,\varphi) \tag{5.78}$$

das Legendre-Polynom ℓ'ter Ordnung, j_ℓ die ℓ'te sphärische Besselfunktion und h_ℓ die ℓ'te sphärische Hankelfunktion ist. Da weder die in 3-Richtung einlaufende ebene Welle noch der Hamilton-Operator H von φ abhängen, $[H, L_3] = 0$, ist auch die Lösung $\psi(t, \boldsymbol{x})$ unabhängig von φ. Offensichtlich ist dann die Streuamplitude ebenfalls φ-unabhängig,

$f(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}) = f(\theta, k)$.

Wir entwickeln die Eigenzustände $\psi_k(\boldsymbol{x})$ in Drehimpuls-Eigenzustände

$$\psi_k(\boldsymbol{x}) = \sum_0^\infty \mathrm{i}^\ell (2\ell+1) P_\ell(\cos\theta) f_\ell(r). \tag{5.79}$$

Die Funktionen f_ℓ erfüllen die radiale Schrödingergleichung

$$H_\ell f_\ell \equiv \left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + U\right) f_\ell = \left(H_\ell^0 + U\right) f_\ell = k^2 f_\ell\,, \tag{5.80}$$

wobei wieder

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{und} \quad U = \frac{2m}{\hbar^2} V \tag{5.81}$$

eingeführt wurden. Fällt das Potential im Unendlichen schneller als r^{-2} ab, dann können wir weit weg vom Target das Potential U in (5.80) vernachlässigen und die Gleichung wird zur Bessel-Gleichung. Damit hat f_ℓ die asymptotische Form

$$f_\ell(r) \sim a_\ell \left(h_\ell^\dagger(kr) + S_\ell(E) h_\ell(kr)\right). \tag{5.82}$$

Ohne Streuung ist offensichtlich

$$f_\ell^0 = j_\ell(kr) = \frac{1}{2}\left(h_\ell + h_\ell^\dagger\right). \tag{5.83}$$

Es geht nun im Folgenden darum, die Funktion $S_\ell(E)$ zu bestimmen. Da die

$$h_\ell(x) \sim \frac{1}{x}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(x-(\ell+1)\pi/2)} \tag{5.84}$$

auslaufende und entsprechend die $h_\ell^\dagger$ einlaufende Kugelwellen beschreiben, kann ein Potential nur die Koeffizienten von h_ℓ beeinflussen. Deshalb sind auch bei Anwesenheit eines Streuers die $a_\ell = 1/2$. Bei der elastischen Potentialstreuung gehen keine Teilchen verloren und der Wahrscheinlichkeitsstrom,

$$4\pi r^2 j_r(r) = \frac{2\pi\hbar r^2}{\mathrm{i}m}\left(f_\ell^\dagger \frac{\mathrm{d}f_\ell}{\mathrm{d}r} - f_\ell \frac{\mathrm{d}f_\ell^\dagger}{\mathrm{d}r}\right) = \frac{2\pi\hbar}{mk}\big(1 - S_\ell S_\ell^\dagger\big), \tag{5.85}$$

muss verschwinden. Hier haben wir benutzt, dass $r^2 j_r$ nicht von r abhängt und die asymptotische Form (5.82) mit $a_\ell = 1/2$ eingesetzt. Damit sind die S_ℓ Phasen und wir dürfen

$$S_\ell(E) = \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_\ell(E)} \quad \text{mit reellem} \quad \delta_\ell \tag{5.86}$$

setzen. Die δ_ℓ sind die sogenannten *Streuphasen*. Sie haben folgende anschauliche Bedeutung: $2\delta_\ell$ ist für große r die Phasenverschiebung der Funktion $f_\ell(r)$ gegenüber der Funktion $f_\ell^0(r)$ ohne Potential.

Die Streuamplitude kann nun aus den Streuphasen berechnet werden. Dazu notieren wir, dass für große Abstände

$$\begin{aligned}\psi_k(\boldsymbol{x}) &\sim \frac{1}{2}\sum_\ell \mathrm{i}^\ell(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\left(h_\ell^\dagger(kr) + \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_\ell}h_\ell(kr)\right)\\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} + \frac{1}{2}\sum_\ell \mathrm{i}^\ell(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\left(\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_\ell}-1\right)h_\ell(kr)\end{aligned}$$

gilt. Setzen wir hier die asymptotische Entwicklung der h_ℓ nach der Formel (5.84) ein, dann finden wir

$$\begin{aligned}\psi_k(\boldsymbol{x}) &\sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} + \frac{1}{2kr}\sum_\ell \mathrm{i}^\ell(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\left(\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_\ell}-1\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-(\ell+1)\pi/2)}\\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} + \frac{1}{2\mathrm{i}kr}\sum_\ell (2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\left(\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_\ell}-1\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}.\end{aligned} \tag{5.87}$$

Der Vergleich mit (5.12) führt auf die Streuamplitude

$$\begin{aligned}f(\theta,k) &= \frac{1}{2\mathrm{i}k}\sum_\ell (2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\left(\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_\ell}-1\right)\\ &= \frac{1}{k}\sum_\ell (2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_\ell}\sin\delta_\ell.\end{aligned} \tag{5.88}$$

Der totale Wirkungsquerschnitt ist das Integral von $|f(\theta,k)|^2$ über S^2. Wegen der Orthogonalitätsrelationen

$$\frac{1}{2}\int\limits_{-1}^{1} P_\ell(x)P_{\ell'}(x)dx = \frac{\delta_{\ell\ell'}}{2\ell+1} \tag{5.89}$$

erhalten wir wir den totalen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma = \sum \sigma_\ell, \quad \text{mit} \quad \sigma_\ell = \frac{4\pi}{k^2}(2\ell+1)\sin^2\delta_\ell\,. \tag{5.90}$$

Die σ_ℓ sind die Wirkungsquerschnitte für die Streuung von Teilchen beschrieben durch Partialwellen mit festem Drehimpuls ℓ. Im totalen Wirkungsquerschnitt gibt es keine Interferenz zwischen den Beiträgen verschiedener Partialwellen. Allerdings interferieren die Partialwellen im Ausdruck für den differentiellen Wirkungsquerschnitt $|f(\theta,k)|^2$.

Schlussendlich bemerken wir noch, dass wegen

$$h_\ell^\dagger + \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_\ell} h_\ell \sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_\ell} j_\ell(kr+\delta_\ell) \tag{5.91}$$

ein Potential Partialwellen mit $\delta_\ell > 0$ näher ans Streuzentrum zieht und Partialwellen mit $\delta_\ell < 0$ vom Zentrum weg drückt. Ist das Potential anziehend, dann oszilliert die Wellenfunktion schneller und deshalb gehört $\delta_\ell > 0$ zu einem anziehenden und $\delta_\ell < 0$ zu einem abstoßenden Potential.

5.4.1 Optisches Theorem

Zwischen der totalen Wirkungsquerschnitt und dem Imaginärteil der Streuamplitude in die Vorwärtsrichtung gibt es eine einfache Beziehung. Wegen (5.88) ist

$$\Im f(\theta,k) = \frac{1}{k}\sum_\ell (2\ell+1) P_\ell(\cos\theta)\sin^2\delta_\ell, \tag{5.92}$$

und da $P_\ell(1) = 1$ ist, finden wir

$$\sigma = \frac{4\pi}{k}\Im f(0,k). \tag{5.93}$$

Diese wichtige Beziehung ist das *optische Theorem.* Es besagt, dass der totale gestreute Strom $\hbar k\sigma/m$ gleich der Abnahme des einfallenden Teilchenstroms hinter dem Target ist. Um dies einzusehen, berechnen wir den radialen Strom

$$j_r(t,\boldsymbol{x}) = \frac{\hbar}{m}\Im\left(\psi^\dagger(t,\boldsymbol{x})\frac{\partial\psi(t,\boldsymbol{x})}{\partial r}\right) \tag{5.94}$$

für die Wellenfunktion (5.18). Um j_r weit weg vom Streuer zu bestimmen, nähern wir

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial\psi_0(t,\boldsymbol{x})}{\partial r} &= \frac{\partial}{\partial r}\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\,a(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}r\boldsymbol{k}\hat{\boldsymbol{x}}-\mathrm{i}E_k(t-t_0)/\hbar}\sim \mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\hat{\boldsymbol{x}}\;\psi_0(t,\boldsymbol{x})\\
\frac{\partial\psi_0(t,\hat{\boldsymbol{k}}_0r)}{\partial r} &= \frac{\partial}{\partial r}\int\frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\,a(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}r\boldsymbol{k}\hat{\boldsymbol{k}}_0-\mathrm{i}E_k(t-t_0)/\hbar}\sim \mathrm{i}k_0\,\psi(t,\hat{\boldsymbol{k}}_0r)
\end{aligned}
\tag{5.95}
$$

und vernachlässigen Terme der Ordnung r^{-3}. Dann wird

$$
j_r = j_{r,0}+j_{r,\mathrm{streu}}+j_{r,\mathrm{int}}\,, \tag{5.96}
$$

wobei $j_{r,0}$ die radial einlaufende Stromdichte zum Wellenpaket $\psi_0(t,\boldsymbol{x})$ ist, $j_{r,\mathrm{streu}}$ die früher berechnete gestreute Stromdichte und

$$
j_{r,\mathrm{int}} = \frac{\hbar k_0}{mr}\Im\Big(\mathrm{i}f(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}_0)\psi_0^\dagger(t,\boldsymbol{x})\psi_0(t,\hat{\boldsymbol{k}}_0r)(1+\hat{\boldsymbol{k}}_0\cdot\hat{\boldsymbol{x}})\Big) \tag{5.97}
$$

der von der Interferenz zwischen einlaufender und gestreuter Welle herrührende Anteil zur Stromdichte ist. Beachte, dass $\psi_0(t,\hat{\boldsymbol{k}}_0r)$ nur ungleich Null ist nachdem das Teilchen das Streuzentrum erreicht hat und dass $\psi_0(t,\boldsymbol{x})$ und damit der Interferenzstrom nur in die Vorwärtsrichtung ungleich Null ist. Der Interferenzterm führt zu einem *Schatten* des Targets und damit zu einer Erniedrigung des Stroms in die Vorwärtsrichtung. Man kann zeigen, dass der totale gestreute Strom gleich demjenigen ist, der im einlaufenden Strom fehlt [16].

5.4.2 Analytische Eigenschaften der Streuamplitude

Wie besprochen, können wir für ein radialsymmetrisches Potential die Lösungen der stationären Schrödingergleichung separieren,

$$
\psi_{k\ell m} = f_\ell(r)Y_{\ell m}(\theta,\varphi), \tag{5.98}
$$

und die f_ℓ erfüllen die radiale Schrödingergleichung $H_\ell f_\ell = k^2 f_\ell$ in (5.80). Wir wollen nun zwei Paare von Lösungen einführen, die durch ihr Verhalten bei $r=0$ und bei $r=\infty$ charakterisiert sind. Dazu wandeln wir die radiale Schrödingergleichung in zwei Integralgleichungen um. Als Lösungen der freien Radialgleichungen,

$$
\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}-\frac{\ell(\ell+1)}{x^2}+1\right)f_\ell^0 = 0 \tag{5.99}
$$

können wir die sphärischen Bessel- und Neumannfunktionen mit dem asymptotischen Verhalten für kleine $x = kr$

$$j_\ell(x) \sim \frac{x^\ell}{1\cdot 3\cdots(2\ell+1)} \quad \text{und} \quad \eta_\ell(x) \sim -\frac{1\cdot 3\cdots(2\ell-1)}{x^{\ell+1}} \tag{5.100}$$

wählen, oder die sphärischen Hankelfunktionen mit folgendem asymptotischen Verhalten für große x

$$h_\ell(x) \sim \frac{1}{x}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(x-(\ell+1)\pi/2)} \quad \text{und} \quad h_\ell^\dagger(x) \sim \frac{1}{x}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(x-(\ell+1)\pi/2)}. \tag{5.101}$$

Die *Wronski-Determinante*

$$W(f,g) = r^2\left(f\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}r} - \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}r}g\right), \tag{5.102}$$

zweier Lösungen der freien radialen Schrödingergleichung ist ortsunabhängig, wie man leicht nachprüft. Setzt man obige Entwicklungen für kleine und große x ein, dann erhält man die Wronski-Determinanten

$$W(j_\ell,\eta_\ell) = \frac{1}{k} \quad \text{und} \quad W(h_\ell,h_\ell^\dagger) = -\frac{\mathrm{i}}{k}\,. \tag{5.103}$$

Im Folgenden benötigen wir die Greensche Funktion

$$G_\ell(k,r,r') = k\left(j_\ell(kr)\eta_\ell(kr') - \eta_\ell(kr)j_\ell(kr')\right), \qquad (r'<r) \tag{5.104}$$

die auf der Diagonalen $r = r'$ Null ist. Die erste Ableitung der Greenschen Funktion an der Stelle $r = r'$ ist proportional zur Wronski-Determinante $W(j_\ell,\eta_\ell)$ in (5.103), so dass

$$G_\ell(k,r,r) = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}G_\ell(k,r,r')|_{r'=r} = -\frac{1}{r^2}. \tag{5.105}$$

Wir wollen uns nun davon überzeugen, dass die Lösungen der radialen Lippmann-Schwinger-artigen Integralgleichungen

$$\begin{aligned}
\phi_\ell(k,r) &= j_\ell(kr) + \int_0^r G_\ell(k,r,r')U(r')\phi_\ell(k,r')r'^2\mathrm{d}r' \\
f_\ell(k,r) &= h_\ell^\dagger(kr) - \int_r^\infty G_\ell(k,r,r')U(r')f_\ell(k,r')r'^2\mathrm{d}r'
\end{aligned} \tag{5.106}$$

auch Lösungen der radialen Schrödingergleichung sind. Wir werden zeigen, dass die ϕ_ℓ regulär am Ursprung sind und die f_ℓ für grosse r einlaufende Kugelwellen beschreiben.

Beweis: Es sei

$$p(r) = \int_0^r G_\ell(k,r,r')q(r')r'^2 \mathrm{d}r' \,. \tag{5.107}$$

Wegen (5.105) sind die erste und zweite Ableitung dieser Funktion gleich

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}p(r) &= \int_0^r \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}G_\ell(k,r,r')q(r')r'^2\mathrm{d}r' \\ \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}p(r) &= -q(r) + \int_0^r \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}G_\ell(k,r,r')q(r')r'^2\mathrm{d}r' \,.\end{aligned}$$

Wir wirken mit dem in (5.80) definierten radialen Schrödinger-Operator $H_\ell = H_\ell^0 + U$ auf (5.106) und berücksichtigen, dass j_ℓ und G_ℓ die freie radiale Schrödingergleichung erfüllen:

$$\begin{aligned}H_\ell\phi_\ell(k,r) &= (k^2+U)j_\ell - U\phi_\ell + (k^2+U)\int_0^r G_\ell(k,r,r')U(r')\phi_\ell(r')r'^2 \\ &= (k^2+U)j_\ell - U\phi_\ell + (k^2+U)(\phi_\ell - j_\ell) = k^2\phi_\ell(k,r)\,.\end{aligned}$$

Genauso beweist man, dass die zweite Lösung f_ℓ die radiale Schrödingergleichung löst. Diese Integralgleichungen werden nun durch sukzessive Approximation gelöst:

$$\begin{aligned}\phi_\ell &= \sum_{n=0}^\infty \phi_\ell^{(n)}\,,\ \phi_\ell^{(0)} = j_\ell, \quad \phi_\ell^{(n)} = \int_0^r G_\ell(k,r,r')U(r')\phi_\ell^{(n-1)}(r')\,r'^2\mathrm{d}r' \\ f_\ell &= \sum_{n=0}^\infty f_\ell^{(n)}\,,\ f_\ell^{(0)} = h_\ell^\dagger, \quad f_\ell^{(n)} = -\int_r^\infty G_\ell(k,r,r')U(r')f_\ell^{(n-1)}(r')\,r'^2\mathrm{d}r' \,.\end{aligned}$$

Speziell im s-Kanal ist

$$G_{\ell=0}(k,r,r') = \frac{1}{krr'}\sin k(r'-r) \tag{5.108}$$

und es folgen die Rekursionsrelationen

$$\begin{aligned}\phi_0^{(n)}(r) &= \frac{1}{kr}\int_0^r \sin k(r'-r)U(r')\phi_0^{(n-1)}\,r'\mathrm{d}r' \\ f_0^{(n)}(r) &= -\frac{1}{kr}\int_r^\infty \sin k(r-r')U(r')f_0^{(n-1)}\,r'\mathrm{d}r' \,.\end{aligned} \tag{5.109}$$

Wir müssen also verlangen, dass

$$\int_0^c rV(r)\mathrm{d}r = N(c) < \infty \tag{5.110}$$

gilt damit ϕ am Ursprung regulär ist.

• Um das Verhalten der Lösungen bei $r=0$ für beliebige Drehimpulse zu untersuchen, setzen wir die Entwicklung (5.100) für die sphärischen Besselfunktionen in G_ℓ ein und erhalten

$$G_\ell(k,r,r') \sim \frac{k}{2\ell+1}\left(\frac{r'^{\,\ell}}{r^{\ell+1}} - \frac{r^\ell}{r'^{\,\ell+1}}\right), \quad r,r' \to 0, \tag{5.111}$$

so dass zum Beispiel

$$\phi_\ell^{(1)} \sim \alpha r^{-\ell-1}\int_0^r r'^{2\ell+2}U(r')\mathrm{d}r' + \beta r^\ell \int_0^r r'U(r')\mathrm{d}r' \tag{5.112}$$

gilt. Wiederum muss man (5.110) fordern, damit ϕ_ℓ bei am Ursprung regulär ist. Durch Abschätzungen an G_ℓ kann man für $\phi_\ell(k,r)$ folgende Eigenschaften beweisen:

1. Die bei $r=0$ reguläre Lösung

$$\phi_\ell(k,r) \sim j_\ell(kr)(1+o(r)) \tag{5.113}$$

ist eine *ganze analytische* Funktion in der komplexen $k-$Ebene. Weiterhin ist sie analytisch in ℓ für $\Re(\ell) > -\frac{1}{2}$.

2. Je weniger singulär das Potential bei $r=0$ ist, desto größer ist der Analyzitätsbereich in der komplexen Drehimpuls-Ebene. Gilt zum Beispiel

$$|V(r)| < Cr^{-2+\epsilon}, \qquad \epsilon > 0\,, \tag{5.114}$$

dann ist ϕ_ℓ analytisch für $\Re(\ell) > -\frac{1}{2}(1+\epsilon)$.

• Weit weg vom Streuzentrum können wir in G_ℓ die asymptotischen Entwicklungen

$$j_\ell(x) \sim \frac{1}{x}\sin(x-\ell\pi/2) \quad \text{und} \quad \eta_\ell(x) \sim -\frac{1}{x}\cos(x-\ell\pi/2) \tag{5.115}$$

einsetzen, mit dem Resultat

$$G_\ell(k,r,r') \sim \frac{1}{krr'}\sin\,k(r'-r), \qquad r,r' \to \infty\,, \tag{5.116}$$

und damit gilt zum Beispiel

$$f_\ell^{(1)}(k,r) = \frac{\alpha}{r}\int_r^\infty \sin\,k(r-r')U(r')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr'}\mathrm{d}r'\,. \tag{5.117}$$

Das Potential muss also im Unendlichen schnell genug abfallen, damit die sukzessive

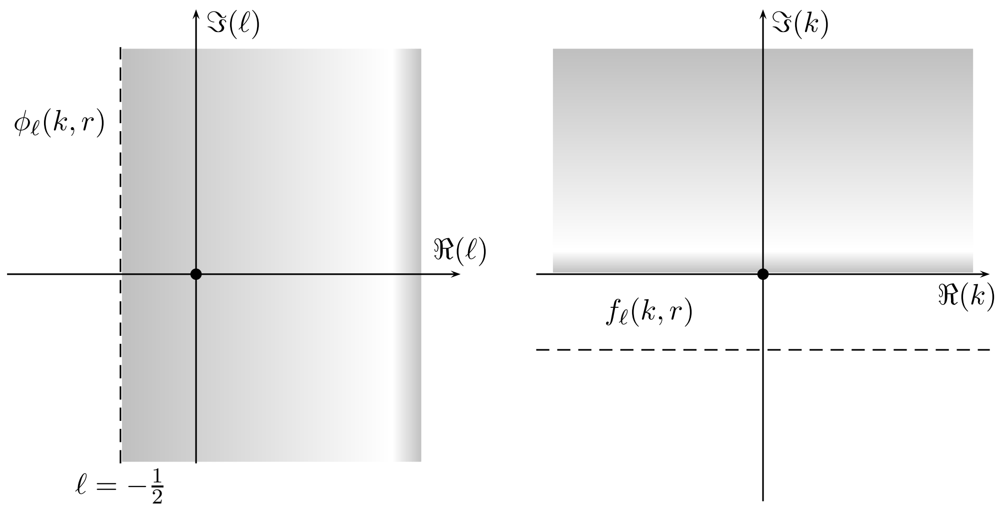


Abbildung 5.3: *Die Analyzitätsgebiete der Lösungen $\phi_\ell(k,r)$ und $f_\ell(k,r)$*

Approximation Sinn macht. Unter Annahme von

$$\int_b^\infty r^2|V(r)|\mathrm{d}r = M(b) < \infty \tag{5.118}$$

kann man Folgendes beweisen:

1. Für große r verhält sich die Lösung f_ℓ wie

$$f_\ell(k,r) \sim h_\ell^\dagger(kr)\,. \tag{5.119}$$

   $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi\ell} f_\ell$ ist eine ganze analytische Funktion in ℓ in der gesamten komplexen ℓ-Ebene und in k in der Halbebene $\Im(k) > 0$.

2. Je schneller das Potential für große r abfällt, desto größer ist das Analyzitätsgebiet in der komplexen $k-$Ebene. Ist zum Beispiel

$$|V(r)| < c^{-mr}, \tag{5.120}$$

   dann ist f analytisch für $\Im(k) > -m/2$.

Die Lösungen

$$f_\ell(k,x) \quad \text{und} \quad f_\ell(-k,x) \tag{5.121}$$

sind linear unabhängig. Diese Unabhängigkeit folgt auch aus den nichtverschwindenden

Wronski-Determinanten. Um die Determinanten zu berechnen, dürfen wir das asymptotische Verhalten $f_\ell(k, r \to \infty) \sim h_\ell^\dagger(kr)$ benutzen. Man findet

$$W\left(f_\ell(k,r), f_\ell(-k,r)\right) = \frac{\mathrm{i}}{k}\,. \tag{5.122}$$

Wir können die am Ursprung regulären Lösungen auch als Linearkombination dieser unabhängigen Lösungen schreiben:

$$\phi_\ell(k,r) = \frac{1}{2}\big(J_\ell(-k) f_\ell(k,r) + J_\ell(k) f_\ell(-k,r)\big). \tag{5.123}$$

Die Funktion $J_\ell(k)$ ist die sogenannte *Jostfunktion*. Sie ist analytisch in der unteren $k-$Ebene oder für $\Im(k) < m/2$ falls das Potential im Unendlichen exponentiell abfällt, wie in (5.120). Da $f_\ell(k,r)$ eine einlaufende und $f_\ell(-k,r)$ eine auslaufende Kugelwelle beschreiben, hängt die Streuamplitude folgendermaßen mit der Jostfunktion zusammen

$$S_\ell(k) = \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_\ell(k)} = \frac{J_\ell(k)}{J_\ell(-k)}\,. \tag{5.124}$$

Die Nullstellen der Jostfunktion liegen entweder auf der negativen imaginären Achse oder sie haben positiven Imaginärteil, in welchem Fall sie aber symmetrisch zur imaginären Achse liegen. Die Nullstellen auf der negativen imaginären Achse sind immer einfach und gehören offensichtlich zu gebundenen Zuständen, da in diesem Fall die am Ursprung reguläre Lösung auch im Unendlichen abfällt. Die Nullstellen mit positiven Imaginärteil sind einfach oder doppelt und gehören zu *Resonanzen* oder quasi-stationären Zuständen. In einer Resonanz nimmt die Phase δ_ℓ um π zu. Daneben kann $J_\ell(k)$ auch noch bei $k = 0$ eine einfache ($\ell = 0$) oder doppelte ($\ell > 0$) Nullstelle aufweisen. Als Anwendung unserer Resultate wollen wir das *Levinson-Theorem* beweisen. Wir setzen voraus, dass $J_\ell(0) \neq 0$ ist. Wegen

$$2\mathrm{i}\delta_\ell(k) = \log J_\ell(k) - \log J_\ell(-k) \tag{5.125}$$

ergibt sich für die Differenz der Streuphasen für $k \to \infty$ und $k = 0$ der einfache Ausdruck

$$2\mathrm{i}\left(\delta_\ell(\infty) - \delta_\ell(0)\right) = 2\mathrm{i}\int\limits_0^\infty \mathrm{d}k\,\frac{d\delta_\ell(k)}{\mathrm{d}k} = \int\limits_{-\infty}^\infty \frac{J'_\ell(k)}{J_\ell(k)} = -2\pi\mathrm{i}N(J)\,, \tag{5.126}$$

wobei $N(J)$ die Anzahl Nullstellen von $J_\ell(k)$ in der unteren $k-$Halbebene ist. Die Anwendung der Formel ist erlaubt, da $J_\ell(k)$ für große k gegen 1 strebt. Wir schliessen, dass

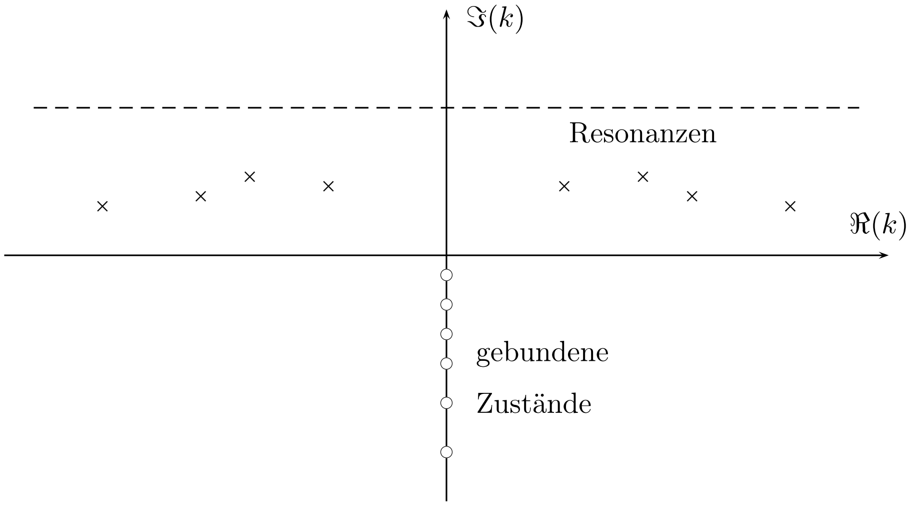


Abbildung 5.4: *Die Nullstellen der Jost-Funktion*

$$\delta_\ell(0) - \delta_\ell(\infty) = \pi N(J) \equiv \pi m_\ell \tag{5.127}$$

gilt, wobei m_ℓ die Anzahl gebundener Zustände im Drehimpulssektor ℓ ist. Dieser Zusammenhang zwischen der Änderung der Phasenverschiebung und der Anzahl gebundener Zustände ist das *Levinson-Theorem*. Ist $J_\ell(0) = 0$, dann wird obige Formel im Sektor $\ell = 0$ leicht modifiziert:

$$\delta_0(0) - \delta_0(\infty) = \pi \left(m_0 + \tfrac{1}{2}\right). \tag{5.128}$$

Wir haben gesehen, wie die Jostfunktionen und damit auch die Streuphasen $\delta_\ell(E)$ aus einem Potential $V(r)$ berechnet werden. Ähnlich wichtig ist das sogenannte *Umkehrproblem*, nämlich die Rekonstruktion des Potentials aus den Streudaten. Hervorragende Theoretiker (Bargman, Levinson, Marchenko, Jost, Kohn, Gel'fand, Levitan, Krein) haben Anfang der 50er Jahre dieses Problem gelöst. Leider habe ich hier keine Zeit auf diese schönen Resultate der mathematischen Physik einzugehen.

5.4.3 Das attraktive Exponentialpotential: s-Wellen Kanal

Die Streuphasen können im allgemeinen nur über die numerische Integration der radialen Schrödingergleichung (5.80) gewonnen werden. Für spezielle Potentiale ist eine Integration durch bekannte Funktionen allerdings möglich. Ein Beispiel ist das kurzreichweitige und anziehende Exponentialpotential

$$V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{b}{a}\right)^2 \mathrm{e}^{-2r/a} \quad \text{bzw.} \quad U(r) = -\left(\frac{b}{a}\right)^2 \mathrm{e}^{-2r/a} \tag{5.129}$$

mit Reichweite a und dimensionsloser Stärke $b > 0$. Ist die Anziehung hinreichend stark, so erwarten wir das Auftreten von gebundenen Zuständen.

Für Energien $E \ll \hbar^2/2ma^2$ wird nur die s-Welle merklich gestreut. Aber für $\ell = 0$ ist die Radialgleichung mit dem Potential (5.129) analytisch lösbar. Zu diesem Zweck schreiben wir die Radialgleichung (5.80) in der Form

$$\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + U(r)\right) u_0(r) = k^2 u_0(r), \qquad u_0(r) = r\phi_0(r) \tag{5.130}$$

mit komplexem k. Lösungen zu reellen Energien ergeben sich durch die Wahl

$$k = \begin{cases} (2mE/\hbar^2)^{1/2} & \text{falls } E > 0 \\ \mathrm{i}(-2mE/\hbar^2)^{1/2} \equiv -\mathrm{i}\kappa & \text{falls } E < 0. \end{cases} \tag{5.131}$$

Gesucht sind also die Lösungen von

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{b^2}{a^2}\,\mathrm{e}^{-2r/a} + k^2\right) u_0(r) = 0 \tag{5.132}$$

die gemäß (5.113) am Ursprung linear mit r verschwinden. Nach der Variablenänderung

$$u_0(r) = f(z) \quad \text{mit} \quad z = b\mathrm{e}^{-r/a} \tag{5.133}$$

wird die Gleichung (5.131) zur Besselgleichung

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + \frac{1}{z}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} + 1 + \frac{a^2k^2}{z^2}\right) f(z) = 0 \tag{5.134}$$

mit Index $\nu = iak$. Für $\nu \notin \mathbb{Z}$ sind die Lösungen $J_\nu(z)$ und $J_{-\nu}(z)$ linear unabhängig und die gesuchte Lösung ist eine Linearkombination dieser beiden Besselfunktionen. Für $r = 0$ ist $z = b$ und die am Ursprung verschwindende Lösung hat die Form

$$u_0(r) = c\left(J_{\mathrm{i}ak}(b)J_{-\mathrm{i}ak}(z) - J_{-\mathrm{i}ak}(b)J_{\mathrm{i}ak}(z)\right) \tag{5.135}$$

Das Verhalten dieser Lösungen für große r oder für $z \to 0$ entscheidet darüber, ob sie physikalisch erlaubt sind. Aus der Reihendarstellung der Besselfunktionen für $z \to 0$,

$$J_\nu(z) = \frac{(z/2)^\nu}{\Gamma(1+\nu)} \big(1 + O(z^2)\big) \tag{5.136}$$

folgt sofort das asymptotische Verhalten der Lösungen

$$u_0(r) \stackrel{r\to 0}{\longrightarrow} c\left(J_{\mathrm{i}ak}(b)\frac{(\frac{b}{2})^{-\mathrm{i}ak}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{\Gamma(1-\mathrm{i}ak)} - J_{-\mathrm{i}ak}(b)\frac{(\frac{b}{2})^{\mathrm{i}ak}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{\Gamma(1+\mathrm{i}ak)}\right) \tag{5.137}$$

Gebundene Zustände: Wir betrachten dieses Verhalten zunächst für negative Energiewerte oder für $k = -\mathrm{i}\kappa$:

$$u_0(r) \stackrel{r\to 0}{\longrightarrow} -c\left(J_{a\kappa}(b)\frac{(\frac{b}{2})^{-a\kappa}\mathrm{e}^{\kappa r}}{\Gamma(1-a\kappa)} - J_{-a\kappa}(b)\frac{(\frac{b}{2})^{a\kappa}\mathrm{e}^{-\kappa r}}{\Gamma(1+a\kappa)}\right). \tag{5.138}$$

Diese Lösung ist genau dann quadratintegrabel wenn

$$J_{a\kappa}(b) = 0 \tag{5.139}$$

ist. Bei unserer Analyse mussten wir $\nu \notin \mathbb{Z}$ annehmen. Für ganzzahlige $\nu = \mathrm{i}ka = n$ sind J_n und J_{-n} linear abhängig und man sollte die linear unabhängigen Lösungen J_n und N_n nehmen. Die entsprechende Analyse führt aber wieder auf die Bedingung (5.139).

Diese Bedingung hat wegen $\kappa \geq 0$ nur für $b > b_1 = 2.4048\dots$ Lösungen, wobei b_1 die kleinste Nullstelle von $J_0(b)$ ist. Bezeichnen $b_1, b_2, \dots$ die Nullstellen von $J_0(b)$ dann gibt es für $b_n \leq b < b_{n+1}$ genau n Lösungen $a\kappa = \nu_1, \nu_2, \dots, \nu_n$ der Gleichung (5.139). Nimmt die Stärke des anziehenden Potentials zu, so wächst die Anzahl gebundener Zustände im Drehimpulssektor $\ell = 0$.

Streuzustände: Wir können die Konstante c in (5.137) derart wählen, dass die Streulösung die kanonische Form (5.123) annimmt. Für große Radien dürfen wir darin f_0 durch $h_0^\dagger$ ersetzen, so dass

$$\phi_0(k,r) \longrightarrow \frac{1}{r}u_0(k,r) = \frac{\mathrm{i}}{2kr}\left(J_0(-k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr} - J_0(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\right) \tag{5.140}$$

gilt. Für die Streuphase im s-Kanal ergibt sich dann

$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_0(k)} = \frac{J_0(k)}{J_0(-k)} = \left(\frac{b}{2}\right)^{-2iak}\frac{\Gamma(1+\mathrm{i}ak)}{\Gamma(1-\mathrm{i}ak)}\frac{J_{\mathrm{i}ak}(b)}{J_{-\mathrm{i}ak}(b)}. \tag{5.141}$$

Wegen der bekannten Relationen

$$\Gamma(1+\mathrm{i}ak)=\overline{\Gamma(1-\mathrm{i}ak)}\quad \text{und}\quad J_{-\mathrm{i}ak}(b)=\overline{J_{\mathrm{i}ak}(b)} \tag{5.142}$$

ist die rechte Seite in der Formel (5.141) wie erwartet eine Phase. Offensichtlich ist $\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_0(0)}=1$. Benutzt man die Entwicklung der Besselfunktion für hohe Ordnungen[2]

$$J_\mu(z)=\frac{(z/2)^\nu}{\Gamma(\nu+1)}\left(1+O(\nu^{-1})\right) \tag{5.143}$$

dann folgt auch $\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta(\infty)}=1$, so dass

$$\delta_0(0)-\delta_0(\infty)=\pi n,\quad n\in\mathbb{Z}, \tag{5.144}$$

in Einklang mit dem Theorem von Levinson. Die Zahl n ist tatsächlich nichtnegativ und ist gerade der Anzahl der gebundenen Zustände mit $\ell=0$.

Wir berechnen schlussendlich noch die Jostfunktion $J_0(k)$. Für kleine Radien ist $z\sim b(1-r/a)$ und die soeben berechnete reguläre Lösung strebt gegen

$$\phi_0(k,r)=\frac{1}{r}u_0(k,r)\overset{(5.135)}{\longrightarrow}-\frac{bc}{a}W\left(J_{\mathrm{i}ak}(b),J_{-\mathrm{i}ak}(b)\right)=\frac{2\mathrm{i}c}{a\pi}\sinh(ak\pi). \tag{5.145}$$

Die Forderung, dass $\phi_0(k,r)$ für kleine Radien gegen die freie Lösung $j_0(kr)$ strebt, fixiert die Konstante c zu

$$c=\frac{a\pi}{2\mathrm{i}}\frac{1}{\sinh(ak\pi)}. \tag{5.146}$$

Dies führt auf folgenden Ausdruck für die Jostfunktion

$$J_0(k)=\frac{a\pi k}{\sinh(a\pi k)}\frac{J_{\mathrm{i}ak}(b)}{\Gamma(1-\mathrm{i}ak)}\left(\frac{b}{2}\right)^{-\mathrm{i}ak} \tag{5.147}$$

Sie hat Nullstellen für Werte $k_n=-\mathrm{i}\kappa_n$ in der unteren k-Halbebene, bei denen $J_{a\kappa}(b)$ verschwindet. Die zugehörigen Energien $E_n=\hbar^2\kappa_n^2/2m$ sind die Energien der gebundenen Zustände. Die Jostfunktion hat Pole an den Stellen

$$k=\frac{\mathrm{i}}{a}n,\quad n=1,2,3 \tag{5.148}$$

und ist analytisch in der Halbebene $\Im(k)<1/a$, in Einklang mit den allgemeinen Resultaten unterhalb (5.123).

[2] Abramowitz und Stegun, Formel 9.1.10

5.5 Elastische Streuung gleichartiger spinloser Teilchen

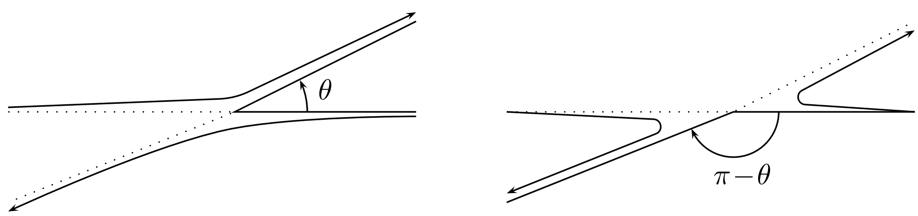
Wir haben früher gesehen, dass ein System identischer Teilchen ohne Spin durch symmetrische Wellenfunktionen beschrieben wird. Dies muss bei der Streuung gleichartiger Teilchen berücksichtigt werden und gibt Anlass zu Austauscheffekten. Im Schwerpunktsystem zweier Teilchen wird die Relativbewegung durch den Ortsvektor $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_2 - \boldsymbol{x}_1$ beschrieben, wenn $\boldsymbol{x}_1$ und $\boldsymbol{x}_2$ die Ortsvektoren der individuellen Teilchen sind. Für *verschiedene Teilchen* ist dann die Wellenfunktion des Systems für große r

$$\psi(\boldsymbol{x}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}} + \frac{f(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k})}{r}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\,. \tag{5.149}$$

Für *identische Bosonen* ist die Wellenfunktion zu symmetrisieren. Bei der Vertauschung der beiden Teilchen geht $\boldsymbol{x}$ in $-\boldsymbol{x}$ oder $(r, \boldsymbol{k}')$ in $(r, -\boldsymbol{k}')$ über. Die symmetrisierte Wellenfunktion ist also

$$\psi_s(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}} + \big(f(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}) + f(-\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k})\big)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\right). \tag{5.150}$$

Die ersten beiden Summanden beschreiben die anfängliche Bewegung der beiden Teilchen im Schwerpunktsystem: Eins bewegt sich in positive $\boldsymbol{k}$-Richtung, das andere in die entgegengesetzte Richtung.



Die Stromdichte für jedes stoßende Teilchen ist $\pm\hbar k/\mu$, wobei μ die reduzierte Masse ist. Der zweite Summand entspricht der gestreuten Welle. Wir können nicht unterscheiden ob das erste Teilchen nach $\boldsymbol{k}'$ und das zweite nach $-\boldsymbol{k}'$ gestreut wurde oder umgekehrt.

Offensichtlich ist differentielle Wirkungsquerschnitt für elastische Streuung von identischen spinlosen Teilchen

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \big|f(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}) + f(-\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k})\big|^2. \tag{5.151}$$

Da wir zuerst die Amplituden addieren und danach das Quadrat bilden, entsteht ein Interferenzterm $\sim \Re\big(f(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k})f(-\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k})\big)$. Dieser *Austauschterm* rührt von der Korrelation zwischen den Teilchen infolge der Symmetrie des Zustandes her.

Als Anwendung betrachten wir die *Coulombstreuung* von $\alpha-$Teilchen. Die Streuamplitude

$$f(\theta)=\frac{\gamma}{2k}\frac{\Gamma(1+\mathrm{i}\gamma)}{\Gamma(1-\mathrm{i}\gamma)}\,\frac{\exp(-2\mathrm{i}\gamma\log\sin\theta/2)}{\sin^2\theta/2},\qquad \gamma=\frac{Z_1Z_2e^2}{\hbar v} \tag{5.152}$$

führt auf den Wirkungsquerschnitt

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=|f(\theta)|^2+|f(\pi-\theta)|^2+f(\theta)\bar{f}(\pi-\theta)+\bar{f}(\theta)f(\pi-\theta). \tag{5.153}$$

Setzen wir hier die Streuamplitude ein, dann zeigt eine kurze Rechnung, dass

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=\frac{\gamma^2}{4k^2}\left(\frac{1}{\sin^4\theta/2}+\frac{1}{\cos^4\theta/2}+2\frac{\cos(\gamma\log\tan^2\theta/2)}{\sin^2\theta/2\cos^2\theta/2}\right). \tag{5.154}$$

Diese Formel wurde zuerst von MOTT angegeben [18]. Daher heisst die elastische Streuung gleichartiger spinloser Teilchen infolge der Coulomb-Wechselwirkung auch *Mott-Streuung*. Typisch quantenmechanisch ist darin der letzte Interferenzterm. Dieser ist für $\theta=\pi/2$ am größten (dies entspricht einem Winkel von $\pi/4$ im Laborsystem). Bei diesem Winkel bewirken die Austauschterme eine Verdopplung des differentiellen Wirkungsquerschnitts, verglichen mit dem Querschnitt ohne Berücksichtigung des Austauscheffekts. Schon bald nach der Arbeit von MOTT wurde der Interferenzterm bei der Streuung von $\alpha-$Teilchen an Helium-Gas nachgewiesen, und damit zugleich die Bose-Statistik der $\alpha-$Teilchen und ihre Wellennatur vollständig bestätigt.

Der Austauscheffekt ist rein quantenmechanischer Natur. Im klassischen Limes $\hbar\to 0$ geht γ in (5.152) gegen unendlich und der Austauschterm oszilliert merklich. Über eine kleinen Raumwinkel gemittelt gibt er im klassischen Limes keinen Beitrag zur Streuung. Auch für kleine Relativgeschwindigkeiten ist γ groß und der Austauschterm trägt nach Mittelung über einen gewissen Winkelbereich nicht mehr bei. Aus denselben Gründen braucht man den Austauscheffekt bei kleinen Streuwinkeln nicht zu berücksichtigen.

5.6 Elastische Streuung gleichartiger Spin-1/2 Teilchen

Im allgemeinen Fall ist beim Stoß von Teilchen nur der Gesamtdrehimpuls $\boldsymbol{J}$ ein Integral der Bewegung. Vernachlässigt man Spin-Terme (Spin-Bahn Wechselwirkung) im Hamilton-Operator, dann sind der gesamte Bahndrehimpuls und der Gesamtspin einzeln erhalten. In dieser Näherung kann die vollständige Wellenfunktion eines Systems aus zwei identischen Teilchen als Produkt der Orts- und Spinfunktion geschrieben werden (siehe Kapitel 2),

$$\psi = \phi(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2)\chi(m_1, m_2). \tag{5.155}$$

Für zwei Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen ist der Gesamtspin entweder 0 (Singulett) oder 1 (Triplett). Für den Singulettzustand ist die Ortswellenfunktion symmetrisch, d.h.

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_s}{\mathrm{d}\Omega} = \left|f(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}) + f(-\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k})\right|^2, \quad \text{(Singulett)}. \tag{5.156}$$

Im Triplettzustand mit Gesamtspin $S = 1$ ist die Ortswellenfunktion antisymmetrisch und daher gilt

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_t}{\mathrm{d}\Omega} = \left|f(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}) - f(-\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k})\right|^2, \quad \text{(Triplett)}. \tag{5.157}$$

Bei der Streuung von Protonen (verursacht durch die Coulombkraft) stimmt dann $\mathrm{d}\sigma_s/\mathrm{d}\Omega$ mit dem Mottschen Wirkungquerschnitt überein, und

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_t}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{\gamma^2}{4k^2}\left(\frac{1}{\sin^4\theta/2} + \frac{1}{\cos^4\theta/2} - 2\frac{\cos(\gamma\log\tan^2\theta/2)}{\sin^2\theta/2\,\cos^2\theta/2}\right) \tag{5.158}$$

Der Wirkungsquerschnitt im Triplett-Kanal verschwindet für $\theta = \pi/2$.

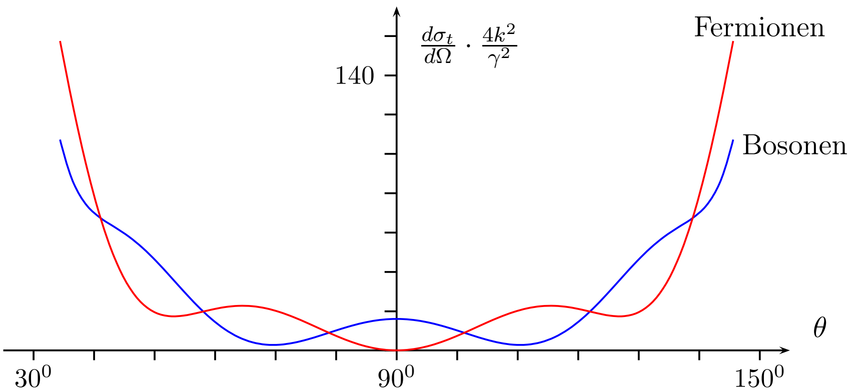


Abbildung 5.5: *Wirkungsquerschnitt für Mott-Streuung mit* $\gamma = 4$

Normalerweise wird die Streuung von unpolarisierten Strahlen an unpolarisierten Targets untersucht, es wird deshalb nur der Mittelwert des Streuquerschnitts gemessen. Im Singulettzustand gibt es eine Spinfunktion, im Triplettzustand deren drei, daher ist der Mittelwert des Streuquerschnitts

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4}\frac{d\sigma_s}{d\Omega} + \frac{3}{4}\frac{d\sigma_t}{d\Omega} = \frac{\gamma^2}{4k^2}\left(\frac{1}{\sin^4\theta/2} + \frac{1}{\cos^4\theta/2} - \frac{\cos(\gamma\log\tan^2\theta/2)}{\sin^2\theta/2\,\cos^2\theta/2}\right). \tag{5.159}$$

Der Austauschterm halbiert den Streuquerschnitt bei $\theta = \pi/2$. Während für identische Bosonen die Streuintensität für $\theta = \pi/2$ durch das Interferenzglied gegenüber dem klassischen Wert auf das Doppelte erhöht wird, wird sie für identische Fermionen auf die Hälfte heruntergesetzt. Schon 1931 haben Versuche von Gerthsen [19] (p Streuung an Wasserstoff) den Interferenzterm in (5.159) sehr genau bestätigt. Auch die Streuung von 20 eV Elektronen an Wasserstoff durch Williams [20] ergab eine gute Übereinstimmung der experimentellen Ergebnisse mit dieser Formel.

5.7 Formale Streutheorie

Nachdem wir die physikalische Bedeutung der Streulösungen erfasst haben, wollen wir die Aussagen der Streutheorie in mathematischer Sprache formulieren. Wir machen dabei Gebrauch von den in der Vorlesung Quantenmechanik I diskutierten Spektraleigenschaften selbstadjungierter Operatoren.

5.7.1 Møller-Operatoren

Im Hilbert-Raum $\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R}^3)$ seien der freie Hamilton-Operator H_0 und der Hamilton-Operator $H = H_0 + V$ gegeben. Beide seien selbstadjungiert. Die zugehörigen Zeitevolutionen bestimmen die Zeitentwicklung beliebig gewählter Anfangszustände in $\mathcal{H}$,

$$\begin{aligned} \phi(t) &= U_0(t)\phi(0)\,, \quad U_0(t) = e^{-itH_0/\hbar} \\ \psi(t) &= U(t)\psi(0)\,, \quad U(t) = e^{-itH/\hbar}. \end{aligned} \tag{5.160}$$

Gelangt ein Teilchen in den Wirkungsbereich des Streuzentrums, entwickelt sich der Zustand mit der exakten Zeitevolution $U(t)$. Hat sich das Teilchen wieder vom Streuzentrum entfernt, entwickelt sich sein Zustand in guter Näherung nach der freien Zeitevolution $U_0(t)$. Wir definieren nun die einparametrige Schar unitärer Transformationen

$$W(t) = e^{itH/\hbar}e^{-itH_0/\hbar} = U(-t)U_0(t) \tag{5.161}$$

und die dazu adjungierte Schar

$$W^\dagger(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}tH_0/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}tH/\hbar} = U_0(-t)U(t). \tag{5.162}$$

Der Operator $W(t)$ ist das Produkt aus der freien Zeitevolution, gefolgt von der zu H gehörenden inversen Zeitevolution. Für kurzreichweitige Potentiale induziert H weit weg vom Streuzentrum eine quasifreie Zeitevolution. Es gilt der

Satz [Existenz der Møller-Operatoren]: *Die Potentialfunktion $V(\boldsymbol{x})$ sei quadratintegrierbar. Dann existieren die Møller-Operatoren*

$$\Omega_\pm = s - \lim_{t\to\mp\infty} W(t) = s - \lim_{t\to\mp\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}tH/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}tH_0/\hbar}. \tag{5.163}$$

Diese existieren im Sinne der *starken Operatorkonvergenz*

$$\lim_{t\to\mp\infty} \|\Omega_\pm\psi - W(t)\psi\| = 0, \quad \forall\psi\in\mathcal{H}. \tag{5.164}$$

Die Forderung $V(\boldsymbol{x}) \in L_2(\mathbb{R}^3)$ erlaubt zum Beispiel eine $1/r$-Singularität am Ursprung und im Unendlichen einen Abfall $\sim 1/r^p$ mit $p > 3/2$.

Aus der Unitarität der Evolutionsoperatoren folgt direkt

$$\|\Omega_\pm\psi\| = \lim_{t\to\mp\infty} \|U(-t)U_0(t)\psi\| = \|\psi\| \tag{5.165}$$

oder

$$\Omega_+^\dagger\Omega_+ = \Omega_-^\dagger\Omega_- = \mathbb{1}. \tag{5.166}$$

Die Møller-Operatoren sind als starke Grenzwerte unitärer Operatoren *isometrisch*, im Allgemeinen jedoch nicht surjektiv und damit auch nicht unitär. Gebundene Zustände liegen nicht im Bild der Møller-Operatoren. Die Operatoren

$$P_\pm \equiv \Omega_\pm\Omega_\pm^\dagger \tag{5.167}$$

sind offensichtlich selbstadjungiert und idempotent,

$$P_\pm^\dagger = P_\pm \quad , \quad P_\pm P_\pm = \Omega_\pm\Omega_\pm^\dagger\Omega_\pm\Omega_\pm^\dagger \overset{(5.166)}{=} P_\pm. \tag{5.168}$$

Daher sind die Operatoren $P_\pm$ orthogonale Projektoren. Gilt

$$P_\pm = \mathbb{1} - P_B, \tag{5.169}$$

wobei P_B den orthogonalen Projektor auf den Unterraum des Hilbert-Raums bezeichnet, der von den gebundenen Zuständen aufgespannt wird, so heissen die Møller-Operatoren *asymptotisch vollständig.*

Die Unterscheidung zwischen unitären und isometrischen Operatoren ist wichtig bei der Diskussion der Møller-Operatoren. Eine lehrreiches Beispiel ist der *Rechts-Schiebe-Operator* auf dem Hilbert-Raum der quadratsummierbaren Folgen,

$$\Omega: \quad (x_1, x_2, x_3, \dots) \longrightarrow (0, x_1, x_2, \dots) \tag{5.170}$$

und der dazu adjungierte *Links-Schiebe-Operator*

$$\Omega^\dagger: \quad (x_1, x_2, x_3, \dots) \longrightarrow (x_2, x_3, x_4, \dots) \tag{5.171}$$

Der Operator Ω ist isometrisch und

$$\Omega^\dagger \Omega = \mathbb{1} \quad \text{und} \quad \Omega\Omega^\dagger = \mathbb{1} - P_1, \tag{5.172}$$

wobei P_1 orthogonal auf den Vektor $(1, 0, 0, \dots) \in \ell_2$ projiziert. Dieser Vektor wird von $\Omega^\dagger$ annihiliert und spielt die Rolle der gebundenen Zustände für die Møller-Operatoren.

Wir kehren zur Streutheorie zurück. Aus der Bedingung für asymptotische Freiheit folgt

$$\Omega_\pm \mathcal{H} = \mathcal{H}_B^\perp \tag{5.173}$$

und die Møller-Operatoren bilden den Hilbert-Raum auf das orthogonale Komplement des von den gebundenen Zuständen aufgespannten Unterraums $\mathcal{H}_B \subset \mathcal{H}$ ab. Zum Beweis betrachten wir einen Vektor ϕ der orthogonal zum Bild von Ω_+ ist,

$$(\phi, \Omega_+ \psi) = 0, \quad \forall \psi \in \mathcal{H}. \tag{5.174}$$

Somit ist $\Omega_+^\dagger \phi = 0$ und wir folgern

$$0 = \Omega_+ \Omega_+^\dagger \phi = (\mathbb{1} - P_B)\phi = \phi - P_B \phi, \tag{5.175}$$

so dass $\phi \in \mathcal{H}_B$ gilt.

Die Møller-Operatoren genügen der *Verflechtungsrelation*

$$H\Omega_\pm = \Omega_\pm H_0. \tag{5.176}$$

Der Beweis ist nicht schwierig: Wir schreiben

$$U(-t)\Omega_\pm = \lim_{s\to\mp\infty} U(-t)U(-s)U_0(s)U_0(t)U_0(-t) \tag{5.177}$$

worin das Produkt der beiden letzten Faktoren die Identität ist. Die Substitution $t+s=\tau$ führt auf

$$U(-t)\Omega_\pm = \lim_{\tau\to\mp\infty} U(-\tau)U_0(\tau)U_0(-t) = \Omega_\pm U_0(-t) \tag{5.178}$$

Nach Ableitung an der Stelle $t=0$ ergeben sich die Verflechtungsrelationen.

Wir wollen nun mit Hilfe der Møller-Operatoren spezielle Lösungen der Schrödingergleichung konstruieren. Es sei ϕ ein auf Eins normierter Vektor in $\mathcal{H}$ und

$$\psi^{(\pm)} = \Omega_\pm\phi \tag{5.179}$$

die auf den gebundenen Zuständen senkrecht stehenden Bilder von ϕ. Dann ist

$$\phi(t) = U_0(t)\phi \tag{5.180}$$

eine normierte Lösung der freien Schrödingergleichung und

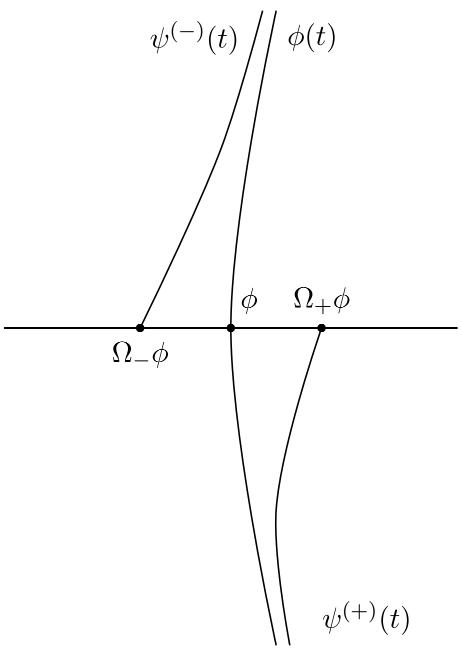
$$\psi^{(+)}(t) = U(t)\psi^{(+)} \quad , \quad \psi^{(-)}(t) = U(t)\psi^{(-)} \tag{5.181}$$

normierte Lösungen der vollen Schrödinger-Gleichung. Die physikalische Bedeutung dieser Lösungen folgt aus ihrem zeitlichen Verhalten,

$$\lim_{t\to-\infty} \|\psi^{(+)}(t)-\phi(t)\| = 0 \quad , \quad \lim_{t\to+\infty} \|\psi^{(-)}(t)-\phi(t)\| = 0. \tag{5.182}$$

Beim Beweis benutzen wir die Unitarität der Evolutionsoperatoren

$$\begin{aligned}\|\psi^{(+)}(t)-\phi(t)\| &= \|U(t)\psi^{(+)}-U_0(t)\phi\| \\ &= \|\psi^{(+)}-U(-t)U_0(t)\phi\| \\ &= \|\left(\Omega_+-W(t)\right)\phi\| \overset{t\to-\infty}{\longrightarrow} = 0.\end{aligned}$$



Der zeitabhängige Vektor $\phi(t)$ beschreibt ein freies (und mit der Zeit zerfliessendes) Wellenpaket. Die Zustände $\Omega_\pm\phi \in \mathcal{H}$ stehen senkrecht auf dem von den gebundenen Zuständen des gesamten Hamilton-Operator H aufgespannten Unterraum $\mathcal{H}_B$. Die Lösung $\psi^{(+)}(t)$ der Schrödingergleichung konvergiert zu sehr frühen Zeiten (in der asymptotischen Vergangenheit) und die Lösung $\psi^{(-)}(t)$ für sehr späte Zeiten (in der asymptotischen Zukunft) gegen dieses freie Wellenpaket. Dies ist die mathematisch präzisere Formulierung der physikalisch intuitiven Aussage „sie kommen sich immer näher". Die Situation ist in der nebenstehenden Abbildung verdeutlicht.

5.7.2 Der Streuoperator

Wir nehmen an, die Potentialfunktion im Hamilton-Operator sei derart, dass die Møller-Operatoren asymptotisch vollständig sind. Gegeben seien zwei beliebige Vektoren ϕ_{ein} und ϕ_{aus} im Hilbert-Raum und

$$\psi_{\text{ein}} = \Omega_+\phi_{\text{ein}} \quad \text{und} \quad \psi_{\text{aus}} = \Omega_-\phi_{\text{aus}}. \tag{5.183}$$

Definiert man hiermit die beiden Lösungen der freien Schrödingergleichung

$$\phi_{\text{ein}}(t) = U_0(t)\phi_{\text{ein}} \quad \text{und} \quad \phi_{\text{aus}}(t) = U_0(t)\phi_{\text{aus}} \tag{5.184}$$

und der beiden Lösungen der Schrödingergleichung

$$\psi^{(+)}(t) = U(t)\psi_{\text{ein}} \quad \text{und} \quad \psi^{(-)}(t) = U(t)\psi_{\text{aus}} \tag{5.185}$$

so gilt gemäß (5.182) für das asymptotische Verhalten

$$\lim_{t\to-\infty} \|\psi^{(+)}(t) - \phi_{\text{ein}}(t)\| = 0 \quad \text{und} \quad \lim_{t\to+\infty} \|\psi^{(-)}(t) - \phi_{\text{aus}}(t)\| = 0. \tag{5.186}$$

Bei einem Streuprozess modelliert $\psi^{(+)}$ den einfallenden Strahl und $\psi^{(-)}$ die gestreute Welle. Das Skalarprodukt zweier Lösungen ist zeitunabhängig und gleich seinem Wert bei

$t = 0$,

$$\big(\psi^{(-)}(t), \psi^{(+)}(t)\big) = (\psi_{\text{aus}}, \psi_{\text{ein}}) = (\Omega_- \phi_{\text{aus}}, \Omega_+ \phi_{\text{ein}}) = (\phi_{\text{aus}}, \Omega_-^\dagger \Omega_+ \phi_{\text{ein}}). \tag{5.187}$$

Der auf dem ganzen Hilbert-Raum definierte Operator

$$S \equiv \Omega_-^\dagger \Omega_+ \tag{5.188}$$

wird als Streuoperator oder kürzer als S-Matrix bezeichnet. Es gilt der

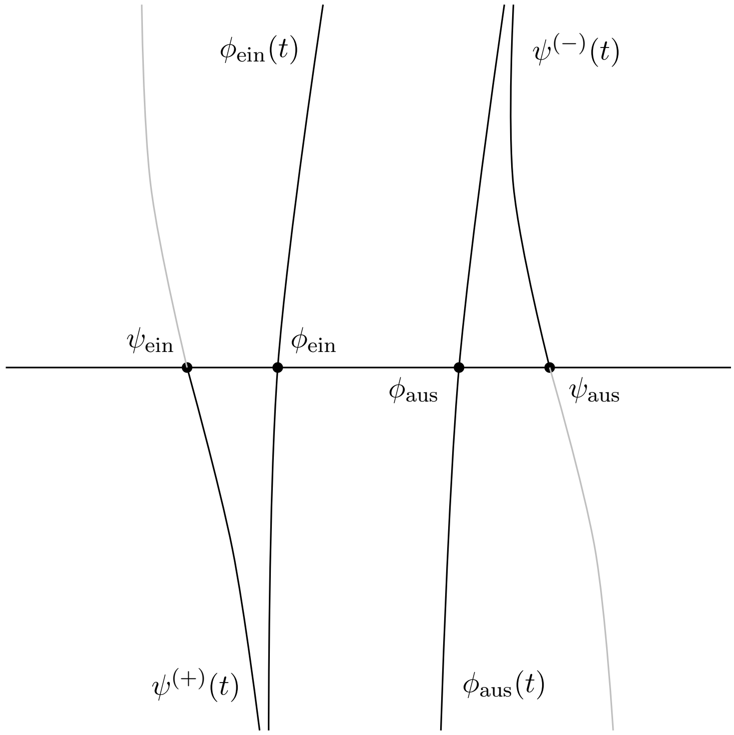
Satz: Der Streuoperator ist unitär und vertauscht mit H_0

$$S^\dagger S = S S^\dagger = \mathbb{1} \quad \text{und} \quad [S, H_0] = 0. \tag{5.189}$$

Im Beweis benutzt man die asymptotische Vollständigkeit und Isometrie der Møller-Operatoren sowie die Verflechtungsrelation:

$$\begin{aligned} S^\dagger S = \mathbb{1}: &\quad S^\dagger S = \Omega_+^\dagger \Omega_- \Omega_-^\dagger \Omega_+ = \Omega_+^\dagger \left(\mathbb{1} - P_B\right) \Omega_+ = \Omega_+^\dagger \Omega_+ = \mathbb{1} \\ [S, H_0] = 0: &\quad S H_0 = \Omega_-^\dagger \Omega_+ H_0 = \Omega_-^\dagger H \Omega_+ = H_0 \Omega_-^\dagger \Omega_+ = H_0 S. \end{aligned}$$

Ähnlich beweist man die Identität $S S^\dagger = \mathbb{1}$. Die vorliegende Situation in ist der folgenden Abbildung skizziert.



5.8 Aufgaben zu Kapitel 5

Aufgabe 5.1: Streuwinkel bei Streuung

Ein Massenpunkt m_1 stoße mit einem ruhenden Massenpunkt m_2 elastisch zusammen.

- Man gebe die Ablenkwinkel für beide Teilchen aufgrund von Energie- und Impulserhaltung im Koordinatensystem des Beobachters (im Laborsystem) und im Schwerpunktsystem an und stelle zwischen beiden Systemen die Beziehung her.
- Wie vereinfachen sich die Ausdrücke für gleiche Massen. Zeigen sie insbesondere, dass für gleiche Massen die Geschwindigkeiten nach dem Stoß im Laborsystem immer senkrecht aufeinander stehen.
- Bei inelastistischer Streuung ist q in der Energiebilanzgleichung

$$\frac{m_1}{2}\boldsymbol{v}_1^2+\frac{m_2}{2}\boldsymbol{v}_2^2=\frac{m_1}{2}\boldsymbol{v}_1'^2+\frac{m_2}{2}\boldsymbol{v}_2'^2+\frac{m_1 q}{2}$$

ungleich Null. Wie lautet nun die Transformation zwischen den Streuwinkeln in den beiden Systemen.

Anleitung: Die Bahnen der beteiligten Teilchen liegen in einer festen Ebene. Sie dürfen die

Rechnung also in der xy-Ebene vornehmen. Das Resultat hängt nicht von den einzelnen Massen, sondern nur vom Verhältnis $\mu = m_2/m_1$ ab.

Aufgabe 5.2: Relativistische Streuung

Bei Streuvorgängen der Form $1 + 2 \to 3 + 4$ werden oft die lorentzinvarianten Größen s, t und u, die sogenannten Mandelstam-Variablen, zur Beschreibung des Streuprozesses verwendet, die als folgende Impuls-Quadrate definiert sind:

$$s = (p_1 + p_2)^2 \quad , \quad t = (p_1 - p_3)^2 \quad , \quad u = (p_1 - p_4)^2$$

Der 4-er Impuls ist $p = (E/c, \boldsymbol{p})$ und das lorentzinvariante Skalarprodukt $p^2 = p_0^2 - \boldsymbol{p}^2$. Berechnen sie s, t und u im Labor- und Schwerpunktsystem. Zeigen Sie, dass nur zwei der drei Mandelstam-Variablen unabhängig sind, da gilt

$$s + t + u = (m_1^2 + m_2^2 + m_3^2 + m_4^2)c^2.$$

Aufgabe 5.3: Bornsche Näherung für exponentielle Potentiale

Man bereche in Bornscher Näherung die differentielle und totalen Wirkungsquerschnitte für die Streuung in folgenden Feldern:

$$V_1(r) = V_0\,\mathrm{e}^{-a^2r^2}$$
$$V_2(r) = V_0\,\mathrm{e}^{-ar}$$

Aufgabe 5.4: Born'sche Näherung für Potenzialstufe und Potenzialtopf

Untersuchen Sie die Born'sche Näherung für eine sphärische Potenzialstufe bzw. einen entsprechenden Potenzialtopf

$$V(r) = \begin{cases} V_0 & r < a \\ 0 & r > a\,. \end{cases}$$

Was sind Streuamplitude, differentieller Wirkungsquerschnitt und totaler Wirkungsquerschnitt? Für den Topf ist V_0 negativ und für die Stufe positiv. Betrachten Sie insbesondere das Verhalten für $a\Delta k \ll 1$.
Hinweis: Bei der Berechnung des totalen Wirkungsquerschnitts sollte man die Integration über ϑ in eine Integration über q ($q = 2k \sin\vartheta/2$) umwandeln.

Aufgabe 5.5: Streuphasen für A/r^2-Potential

Man bestimme die Streuphasen für die Streuung am Potential $V = A/r^2$ und berechne

den differentiellen Wirkungsquerschnitt für $0 \leq \mu A/\hbar^2 \ll 1$.
Anleitung: Setzen Sie in der radialen Schrödingergleichung für $u_{E\ell} = rf_{E\ell}$ die Funktion $u_{E\ell} = \sqrt{r}g_{E\ell}$. Die Differentialgleichung für $g_{E\ell}$ sollte Ihnen bekannt vorkommen. Die auftretende Summe über die Legendrepolynome vereinfacht sich mit

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} P_\ell(\cos\theta) = \frac{1}{2\sin(\theta/2)}. \tag{5.190}$$

Aufgabe 5.6: Scattering at a hard sphere

We study the scattering of particles at a hard sphere with radius a.

1. Determine the total scattering cross section $\sigma = \sum_\ell \sigma_\ell$ for the elastic scattering of particles at a hard sphere with radius a (the de Broglie wave length satisfies $\lambda \ll a$).
2. Determine the dimensionless ratio $\sigma/(2\pi a^2)$ with your favorite computer program (matlab, octave, mathematica,..) for $ka = 1, 2, 3, \ldots, 50$ and plot the result.
3. Compare the result for fast particles ($ka >> 1$) with the classical cross section.

Hint: You may probably need

$$\mathrm{i}\tan\delta_\ell = \frac{\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_\ell} - 1}{\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_\ell} + 1} \quad \text{and} \quad \sin^2\delta_\ell = \frac{\tan^2\delta_\ell}{1 + \tan^2\delta_\ell}$$

Aufgabe 5.7: Streuamplituden für sphärische Potenzialschale

Als dreidimensionale Verallgemeinerung des $\delta(x)-$Potenzials betrachten wir das kugelsymmetrische Potenzial

$$V(\boldsymbol{x}) = -\lambda\delta(r - a),$$

mit Stärke λ. Zeigen Sie, dass die partiellen Streuamplituden durch

$$\frac{1}{\xi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_\ell(\xi)}\sin\delta_\ell(\xi) = \frac{g\big[j_\ell(\xi)\big]^2}{1 - \mathrm{i}\xi g j_\ell(\xi)h_\ell(\xi)}$$

mit dimensionslosen Konstanten $\xi = ka$ und $g = 2ma\lambda/\hbar^2$, gegeben sind.

Kapitel 6

Klein-Gordon-Gleichung

Mathematics is the tool specially suited for dealing with abstract concepts of any kind and there is no limit to its power in this field.
P.A.M. Dirac, Vorwort zu 'The principles of Quantum Mechanics'

Bereits DE BROGLIE und SCHRÖDINGER versuchten eine kovariante Wellengleichung für Elektronen zu formulieren und die von Ihnen gefundene Gleichung für skalare Teilchen heisst heute sinnigerweise Klein-Gordon-Gleichung. Sie wurde von Schrödinger am Ende seiner vierten Mitteilung angegeben und fast gleichzeitig von verschiedenen anderen Autoren gefunden [23]. Schrödinger merkte aber bald, dass seine relativistische Gleichung die Feinstruktur des Wasserstoffspektrums nicht erklären konnte und beschränkte sich danach auf den nichtrelativistischen Grenzfall. Über diesen Umweg fand er dann seine nichtrelativistische Wellenmechanik, die bisher behandelt wurde. Zusätzlich hatte die Klein-Gordon-Gleichung Probleme mit der Positivität der Wahrscheinlichkeitsamplitude und dieses Problem wurde erst später von PAULI und WEISSKOPF gelöst.

Die Verallgemeinerung der Quantenmechanik auf eine mit den Prinzipien der speziellen Relativitätstheorie verträgliche Theorie ist nicht ganz einfach und führt auf einige ungewöhnliche Eigenschaften. Nach einer Erinnerung an die Lorentzgruppe, die von jeder relativistischen Quantentheorie respektiert werden muss, werden wir die Wellengleichung für spinlose skalare Teilchen, zum Beispiel die π- oder K-Mesonen, untersuchen.

6.1 Poincare Transformationen

Im folgenden sei M die 4-dimensionale Minkowski-Raumzeit (Mundis, Minkowski). Die Punkte im affinen Raum M sind *Ereignisse*. Unser Bezugssystem sei ein Inertialsystem I (durch Fixsterne gegeben). Ereignisse werden durch ihre Zeit, gemessen mit Uhren, welche relativ zum System ruhen und durch Lichtsignale synchronisiert sind, und ihre kartesischen Koordinaten charakterisiert.

In einem gewählten Koordinatensystem wird jedes Ereignis durch seine Zeit und seinen Ort, also durch die 4-Koordinaten

$$x = \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ct \\ \boldsymbol{x} \end{pmatrix} \tag{6.1}$$

eindeutig charakterisiert. Oft schreiben wir auch $x = (x^\mu);\ \mu = 0, 1, 2, 3$. Die Differenzen von Ereignissen definieren einen 4-dimensionalen Vektorraum V, den *Tangentialraum* zu M. In einem Koordinatensystem haben Elemente aus V die Form

$$\xi^T = (\xi^0, \xi^1, \xi^2, \xi^3) \quad \text{bzw.} \quad \xi = (\xi^\mu). \tag{6.2}$$

Auf dem Tangentialraum V führen wir eine Bilinearform ein,

$$(\xi, \eta) = \xi^0\eta^0 - \xi^1\eta^1 - \xi^2\eta^2 - \xi^3\eta^3, \tag{6.3}$$

welche mit Hilfe des *metrischen Tensors*

$$G = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = (g_{\mu\nu}) \quad \text{bzw.} \quad G^{-1} = (g^{\mu\nu}) \tag{6.4}$$

folgendermaßen geschrieben werden kann

$$(\xi, \eta) = \sum\nolimits_{\mu\nu} g_{\mu\nu}\xi^\mu\eta^\nu = \xi^T G\eta. \tag{6.5}$$

Dann ist der lorentzinvariante Abstand zweier Ereignisse mit Raumzeit-Koordinaten x

und y gleich

$$d(x,y)=(\xi,\xi),\quad \text{wobei}\quad \xi=y-x \tag{6.6}$$

der Differenzvektor zwischen den Ereignissen ist. Indices werden mit $g_{\mu\nu}$ und $g^{\mu\nu}$ hinunter- oder hinaufgezogen, zum Beispiel gelten

$$\xi_\mu=g_{\mu\nu}\xi^\nu\quad \text{bzw.}\quad \xi^\mu=g^{\mu\nu}\xi_\nu,\quad \text{so dass}\quad (\xi,\eta)=\xi^\mu\eta_\mu=\xi_\mu\eta^\mu. \tag{6.7}$$

Wir betrachten nun ein zweites Inertialsystem I' (das gestrichene System), welches relativ zum ursprünglichen ungestrichenen System in konstanter gleichförmiger Bewegung ist. Das Äquivalenzprinzip der speziellen Relativitätstheorie besagt nun, dass die Naturgesetze in allen Inertialsystemen gleich aussehen. Insbesondere ist die Lichtgeschwindigkeit in allen Inertialsystemen gleich (Michelson-Morley-Experiment).

Ein Punktereignis werde nun im Inertialsystems I durch die Koordinaten x und im Inertialsystems I' durch die Koordinaten x' beschrieben. Der Zusammenhang zwischen den Koordinaten hat die Form

$$x'^\mu=a^\mu+f^\mu(x),\quad \text{wobei}\quad f^\mu(0)=0\quad \text{und}\quad a^\mu=\text{konstant} \tag{6.8}$$

angenommen werden kann. Wegen der Homogenität des Raumes sind

$$x''^\mu=x'^\mu-a^\mu \tag{6.9}$$

ebenfalls Koordinaten in einem Inertialsystem I''. Es gilt dann

$$x''^\mu=f^\mu(x)\quad \text{mit}\quad f^\mu(x=0)=0. \tag{6.10}$$

Wir wollen nun einsehen, dass die f^μ lineare Funktionen sein müssen. Wir benutzen in den beiden Inertialsystemen I und I'' gleiche Längenmaßstäbe und gleiche Uhren. Ein Ereignis habe in I die Koordinaten x und in I'' die Koordinaten x''. Nun messen wir in beiden Systemen in Millimeter statt Meter und in Millisekunden statt Sekunden. Dann hat das Ereignis in den beiden Inertialsystemen die Koordinaten $1000\cdot x$ und $1000\cdot x'$ Wäre dem nicht so, dann gäbe es eine physikalisch ausgezeichnete Längenskala. Also sind die Koordinaten in einem Inertialsystem lineare Funktionen der Koordinaten im anderen Inertialsystem:

$$x''^\mu=\Lambda^\mu{}_\nu x^\nu, \tag{6.11}$$

beziehungsweise

$$x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\ \nu} x^{\nu} + a^{\mu} \longleftrightarrow x' = \Lambda x + a. \tag{6.12}$$

Seien nun x die Koordinaten einer zur Zeit y^0 am Orte $\boldsymbol{y}$ ausgesandten Lichtwelle in I. Bezüglich I' wird diesselbe Lichtwelle zur Zeit y'^0 am Orte $\boldsymbol{y}'$ ausgesandt und hat die Koordinaten y. In beiden Inertialsystemen ist die Lichtgeschwindigkeit gleich, so dass gilt

$$0 = \xi^T G \xi = \xi'^T G \xi' = \xi^T \Lambda^T G \Lambda \xi. \tag{6.13}$$

Eine hinreichende und notwendige Bedingung dafür ist

$$\Lambda^T G \Lambda = \kappa(\Lambda) G \quad \text{mit} \qquad \kappa(\mathbb{1}) = 1 \quad \text{und} \quad \kappa(\Lambda) \geq 0. \tag{6.14}$$

Ist $\kappa \neq 1$, dann können wir durch eine Maßstabsänderung

$$x' \longrightarrow \sqrt{\kappa}\, x' \tag{6.15}$$

stets $\kappa = 1$ erreichen. Wir wollen also nur Matrizen Λ betrachten, welche die Bedingung

$$\Lambda^T G \Lambda = G \Longleftrightarrow \Lambda^{\alpha}_{\ \mu} g_{\alpha\beta} \Lambda^{\beta}_{\ \nu} = g_{\mu\nu} \tag{6.16}$$

erfüllen. Für solche Transformationen ist das relativistische Abstandsquadrat zweier Ereignisse x, y im Minkowski-Raum unabhängig vom Inertialsystem,

$$(\xi', \xi') = \xi'^T G \xi' = \xi^T G \xi = (\xi, \xi). \tag{6.17}$$

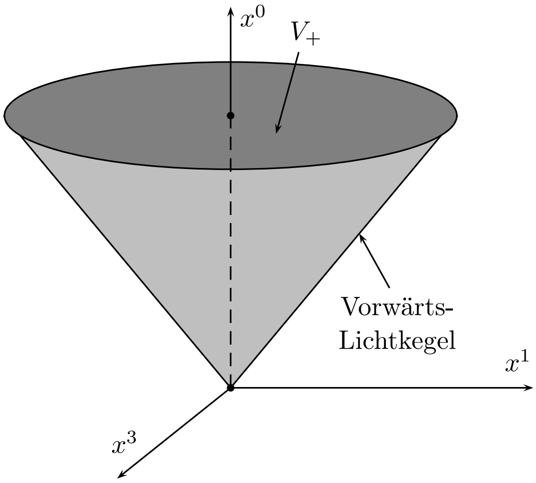
Die linearen Abbildungen (6.12) zwischen zwei Inertialsystemen bilden die sogenannte Poincare- oder inhomogene Lorentzgruppe, die mit iL bezeichnet wird,

$$iL = \left\{ (\Lambda, a) \big| \, a \in V, \Lambda \in \mathcal{L}(V), \Lambda^T G \Lambda = G \right\}, \tag{6.18}$$

mit der Gruppenmultiplikation

$$(\Lambda_2, a_2)(\Lambda_1, a_1) = (\Lambda_2 \Lambda_1, \Lambda_2 a_1 + a_2). \tag{6.19}$$

Die Poincaregruppe ist das semidirekte Produkt von



• der normalen Untergruppe der Raumzeit-Translationen (inklusive den Zeitverschiebungen)

$$x^\mu \longrightarrow x'^\mu = x^\mu + a^\mu$$
$$x' = x + a \tag{6.20}$$

• mit der Untergruppe der Lorentz-Transformationen (räumliche Drehungen und Lorentzboosts)

$$x^\mu \longrightarrow x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu$$
$$x' = \Lambda x. \tag{6.21}$$

Wegen (6.16) gilt

$$\det \Lambda^T \det \Lambda = (\det \Lambda)^2 = 1 \quad \text{oder} \quad \det \Lambda = \pm 1. \tag{6.22}$$

Ist ein Vektor ξ zeitartig, d.h. ist $(\xi, \xi) > 0$, dann ist auch der transformierte Vektor $\xi' = \Lambda \xi$ zeitartig. Deshalb bildet Λ den *Vorwärtslichtkegel*

$$V_+ = \{\xi^0 > 0, (\xi, \xi) > 0\} \tag{6.23}$$

entweder in sich, oder in den *Rückwärtslichtkegel*

$$V_- = \{\xi^0 < 0, (\xi, \xi) > 0\} \tag{6.24}$$

ab. Im zweiten Fall wird die Zeitrichtung umgekehrt. In der Tat, die 00-Komponente der Matrixgleichung (6.16) lautet ausgeschrieben

$$\Lambda^\alpha{}_0\, g_{\alpha\beta} \Lambda^\beta{}_0 = 1 = (\Lambda^0{}_0)^2 - \sum_i (\Lambda^i{}_0)^2, \tag{6.25}$$

und impliziert $(\Lambda^0{}_0)^2 \geq 1$. Für $\Lambda^0{}_0 \geq 1$ wird der Vorwärtslichtkegel in sich abgebildet und für $\Lambda^0{}_0 \leq -1$ in den Rückwärtslichtkegel. Das Vorzeichen der Determinante von Λ und dasjenige von $\Lambda^0{}_0$ können zur Klassifizierung der Elemente der Lorentzgruppe verwendet werden. Entsprechend zerfällt diese in 4 *Zusammenhangs-Komponenten*

$$L = L_+^\uparrow \cup L_-^\uparrow \cup L_+^\downarrow \cup L_-^\downarrow, \tag{6.26}$$

mit folgender Bedeutung für die Indizes:

$$\pm : \ \det\Lambda = \pm 1 \quad , \quad \uparrow: \text{keine Zeitumkehr } (\Lambda^0_{\ 0} \geq 1) \quad , \quad \downarrow: \text{Zeitumkehr } (\Lambda^0_{\ 0} \leq -1). \tag{6.27}$$

Unter Einführung der Raumspiegelung P, Zeitumkehr T und -Spiegelung PT

$$P = -T = G \quad \text{und} \quad PT = -\mathbb{1}_4 \tag{6.28}$$

ist jede Lorentz-Transformation dann aus

$$L_+^\uparrow \cup PL_+^\uparrow \cup TL_+^\uparrow \cup PTL_+^\uparrow. \tag{6.29}$$

Die Menge $L_+^\uparrow$ der eigentlich orthochronen Lorentz-Transformationen enthalten weder Zeitumkehr noch Spiegelungen und bilden eine normale Untergruppe der Lorentzgruppe. Insbesondere ist $\mathbb{1} \in L_+^\uparrow$. Die Transformationen in $PL_+^\uparrow$ heissen uneigentlich orthochron, diejenigen in $TL_+^\uparrow$ zeitspiegelungsartig und diejenigen in $PTL_+^\uparrow$ raumzeitspiegelungsartig. Mit der Lorentzgruppe zerfällt auch die Poincaregruppe in 4 *Zusammenhangs-Komponenten*

$$iL = iL_+^\uparrow \cup iL_-^\uparrow \cup iL_+^\downarrow \cup iL_-^\downarrow. \tag{6.30}$$

6.1.1 Die Lie-Algebra der Lorentzgruppe

Die Gruppe der Lorentz-Transformationen besteht aus den reellen 4×4-Matrizen, welche

$$\Lambda^T G \Lambda = G \quad \text{oder} \quad \Lambda^\alpha_{\ \mu} g_{\alpha\beta} \Lambda^\beta_{\ \nu} = g_{\mu\nu} \tag{6.31}$$

erfüllen. Es ist die einfache Liegruppe $O(1,3)$, bestehend aus 4 Zusammenhangskomponenten. Die Untergruppe der Matrizen mit $\det\Lambda = 1$ bezeichnet man mit $SO(1,3)$. Sie enthält zwei Zusammenhangskomponenten.

Ähnlich wie bei bei den Drehungen im Raum betrachtet man eine einparametrige Familie $\Lambda(s)$ von Lorentz-Transformationen mit $\Lambda(0) = \mathbb{1}_4$ und definiert die *Erzeugenden* der $SO(1,3)$ gemäß

$$\omega = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\Lambda(s)\big|_{s=0} \quad \text{bzw.} \quad \omega^\alpha_{\ \beta} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\Lambda^\alpha_{\ \beta}\big|_{s=0}. \tag{6.32}$$

Leiten wir (6.31) an der Stelle $s = 0$ ab, dann finden wir folgende lineare Bedingung für die infinitesimalen Erzeugenden

$$(G\omega)^T + G\,\omega = 0 \quad \text{bzw.} \quad \omega^\alpha_{\ \mu} g_{\alpha\nu} + g_{\mu\beta}\omega^\beta_{\ \nu} \equiv \omega_{\nu\mu} + \omega_{\mu\nu} = 0. \tag{6.33}$$

Jede Linearkombination von Erzeugenden ist wieder eine Erzeugende und deshalb bilden die Erzeugenden einen linearen Raum. Der Kommutator zweier Erzeugenden,

$$[\omega_1, \omega_2] = \omega_1\omega_2 - \omega_2\omega_1 = -[\omega_2, \omega_1] \tag{6.34}$$

ist ebenfalls ein erzeugendes Element. Es gilt die Jacobi-Identität

$$[\omega_1, [\omega_2, \omega_3]] + [\omega_3, [\omega_1, \omega_2]] + [\omega_2, [\omega_3, \omega_1]] = 0. \tag{6.35}$$

Einen Vektorraum mit schiefsymmetrischen Produkt das die Jacobi-Identität erfüllt nennt man *Lie-Algebra*. Die infinitesimalen Lorentz-Transformationen bilden eine Lie-Algebra. Es ist die Lorentz-Algebra $so(1,3)$ der Lorentzgruppe. Nach (6.33) kann die $so(1,3)$ (nach herunterziehen eines Indizes) mit den schiefsymmetrischen reellen 4×4-Matrizen identifiziert werden. Die Erzeugenden können wie folgt parametrisiert werden:

$$\omega(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\theta}\,) = (\omega^\mu_{\ \nu}) = \begin{pmatrix} 0 & -\alpha_1 & -\alpha_2 & -\alpha_3 \\ -\alpha_1 & 0 & -\theta_3 & \theta_2 \\ -\alpha_2 & \theta_3 & 0 & -\theta_1 \\ -\alpha_3 & -\theta_2 & \theta_1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{6.36}$$

Für $\boldsymbol{\alpha} = 0$ beschreibt die zugehörige 1-parametrige Untergruppe

$$\Lambda(0, \theta\boldsymbol{e}) = \mathrm{e}^{\omega(0,\boldsymbol{e})\theta}, \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{e} = 1, \tag{6.37}$$

eine Drehung um die Achse $\boldsymbol{e}$ mit dem Winkel θ, wie Sie bei der Diskussion von räumlichen Drehungen in der Quantenmechanik I oder klassischen Mechanik gelernt haben. Die eigentlichen Drehungen bilden eine Untergruppe der Lorentzgruppe bestehend aus den Matrizen

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 1 & 0^T \\ 0 & R \end{pmatrix}, \qquad R \in SO(3). \tag{6.38}$$

Für $\boldsymbol{\theta} = 0$ beschreibt die 1-parametrige Untergruppe

$$\Lambda(\alpha\boldsymbol{e}, 0) = \mathrm{e}^{\omega(\boldsymbol{e},0)\alpha} = \begin{pmatrix} \cosh(\alpha) & -\sinh(\alpha)\cdot\boldsymbol{e}^T \\ -\sinh(\alpha)\boldsymbol{e} & \mathbb{1}_3 + \big(\cosh(\alpha) - 1\big)\boldsymbol{e}\,\boldsymbol{e}^T \end{pmatrix} \tag{6.39}$$

Boosts in Richtung des Einheitsvektors $\boldsymbol{e} = \hat{\boldsymbol{\alpha}}$. Wie man leicht sieht (man transformiere z.B. den Impulsvektor eines ruhenden Teilchens) hängen α und $\boldsymbol{e}$ mit der Relativ-

Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}$ der beiden Inertialsysteme wie folgt zusammen:

$$\cosh(\alpha) = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \equiv \gamma \quad \text{und} \quad \sinh(\alpha)\cdot\boldsymbol{e} = -\gamma\cdot\boldsymbol{\beta}, \qquad \boldsymbol{\beta} = \frac{\boldsymbol{v}}{c}. \tag{6.40}$$

Bewegt sich zum Beispiel das Inertialsystem I relativ zum Inertialsystem I' mit der Geschwindigkeit $\boldsymbol{v} = v\boldsymbol{e}$, so lautet die Lorentz-Transformation

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \gamma & \gamma\beta & 0 & 0 \\ \gamma\beta & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{6.41}$$

und entsprechend ist

$$\begin{aligned} x'^0 &= \gamma\left(x^0 + \beta x^1\right),\ x'^2 = x^2 \\ x'^1 &= \gamma\left(\beta x^0 + x^1\right),\ x'^3 = x^3. \end{aligned} \tag{6.42}$$

Ruht ein Teilchen im Ursprung des Inertialsystems I, so bewegt es sich mit der Geschwindigkeit v in 1-Richtung im Inertialsystem I'.

Für den *Kommutator* zweier infinitesimalen Erzeugenden findet man

$$[\omega(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\theta}),\omega(\boldsymbol{\alpha}',\boldsymbol{\theta}')] = \omega\big(-\boldsymbol{\alpha}\times\boldsymbol{\theta}' + \boldsymbol{\alpha}'\times\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}\times\boldsymbol{\theta}' - \boldsymbol{\alpha}\times\boldsymbol{\alpha}'\big). \tag{6.43}$$

Als Basis der Lorentz-Algebra wählen wir die Matrizen Λ_i und Ω_i in der Entwicklung

$$\omega(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^{3}\alpha_i\Lambda_i + \sum_{i=1}^{3}\theta_i\Omega_i. \tag{6.44}$$

Diese haben die explizite Form

$$\Lambda_1 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},\quad \Lambda_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},\quad \Lambda_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{6.45}$$

und

$$\Omega_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Omega_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Omega_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{6.46}$$

Wegen (6.43) lauten die Kommutatoren dieser Basiselemente

$$[\Lambda_i, \Lambda_j] = -\epsilon_{ijk}\Omega_k, \quad [\Omega_i, \Omega_j] = \epsilon_{ijk}\Omega_k, \quad [\Lambda_i, \Omega_j] = \epsilon_{ijk}\Lambda_k\,. \tag{6.47}$$

Im Gegensatz zur Drehgruppe ist die Lorentzgruppe eine nicht-kompakte Liesche Gruppe vom Rang 2. Es können also genau zwei Erzeugende aus $so(1,3)$ gleichzeitig diagonalisiert werden.

6.2 Klein-Gordon Gleichung

Ein nichtrelativistisches Teilchen hat in jedem Inertialsystem die Energie-Impuls Beziehung

$$E = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\,. \tag{6.48}$$

Diese bleibt also unter einer zwischen zwei Inertialsystemen vermittelnde Galilei-Transformation unverändert. Die Teilchenenergie E' und der Teilchenimpuls $\boldsymbol{p}'$ im neuen System, welches mit der Geschwindigkeit $-\boldsymbol{v}$ relativ zum ersten System bewegt ist, lauten

$$E' = E + \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{v} + \frac{m\boldsymbol{v}^2}{2} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{p}' = \boldsymbol{p} + m\boldsymbol{v}, \tag{6.49}$$

so dass in der Tat mit (6.48) auch $E' = \boldsymbol{p}'^2/2m$ gilt. In der Quantenmechanik sind die Energie und der Impuls eines Teilchens mit der Phasenänderung der Wellenfunktion in Zeit und Raum verknüpft. Erfüllen Energie und Impuls eines freien Teilchens die Relation (6.48), dann gehorcht seine Wellenfunktion

$$\psi(t, \boldsymbol{x}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x} - Et)/\hbar} \tag{6.50}$$

der Schrödingergleichung

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\psi = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla\right)^2\psi\,. \tag{6.51}$$

Also kann man die Schrödingergleichung aus der Energie-Impuls-Beziehung (6.48) gewinnen, wenn man die *Korrespondenzregel*

$$E \longrightarrow -\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\partial_t \quad \text{und} \quad \boldsymbol{p} \longrightarrow \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla \tag{6.52}$$

in (6.48) einsetzt und das Resultat auf eine Wellenfunktion ψ wirken lässt. Diese Vorgehensweise führt auch für relativistische Teilchen zum Erfolg.

Mit Hilfe des 4-er Impulses

$$(p^\mu) = \begin{pmatrix} E/c \\ \boldsymbol{p} \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad (p_\mu) = \begin{pmatrix} E/c \\ -\boldsymbol{p} \end{pmatrix} \tag{6.53}$$

lautet die kovariant geschriebene Korrespondenzregel

$$p_\mu \longrightarrow \mathrm{i}\hbar\partial_\mu. \tag{6.54}$$

Die relativistische Verallgemeinerung der Energie-Impuls Beziehung (6.48) ist

$$(p,p) \equiv g^{\mu\nu} p_\mu p_\nu = m^2c^2 \tag{6.55}$$

und besagt, dass das lorentzinvariante Quadrat des Viererimpulses eines Punktteilchens proportional zum Quadrat seiner Ruhemasse m ist. Für ein ruhendes Teilchen reduziert sich (6.55) auf die berühmte Einsteinsche Formel $E = mc^2$. Vermittels der Korrespondenzregel (6.54) ergibt sich aus der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung dann der Klein-Gordon-Operator (besser wäre Schrödinger-Operator)

$$(p,p) = -\hbar^2 g^{\mu\nu}\partial_\mu\partial_\nu = -\hbar^2\Box = m^2c^2 \tag{6.56}$$

und die entsprechende kovariante Wellengleichung

$$\left(\Box + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\phi \equiv \left(\Box + \mu^2\right)\phi = 0, \tag{6.57}$$

ist die freie Klein-Gordon-Gleichung. Hier ist $\Box = \partial_0^2 - \Delta$ der aus der Elektrodynamik wohlbekannte D'Alembertsche Wellenoperator und $\mu = mc/\hbar$ die inverse *Compton-Wellenlänge* des Teilchens. Die Klein-Gordon-Gleichung ist lorentzinvariant, da der 4-er

Gradient ein Vektor ist,

$$\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \sum_\alpha \frac{\partial x'^\alpha}{\partial x^\mu}\frac{\partial}{\partial x'^\alpha} = \sum_\alpha \Lambda^\alpha{}_\mu \frac{\partial}{\partial x'^\alpha} \equiv \partial'_\alpha \Lambda^\alpha{}_\mu \tag{6.58}$$

und entsprechend der Wellenoperator beim Übergang zwischen Inertialsystemen nicht ändert,

$$\Box = \partial_\mu \partial_\nu g^{\mu\nu} = \partial'_\alpha \partial'_\beta \Lambda^\alpha{}_\mu \Lambda^\beta{}_\nu g^{\mu\nu} = \partial'_\alpha \partial'_\beta g^{\alpha\beta} = \Box'. \tag{6.59}$$

Erfüllt $\phi(x)$ die Klein-Gordon-Gleichung im Inertialsystem I, dann erfüllt $\phi'(x') = \phi(x)$ diese Gleichung im Inertialsystem I'.

6.2.1 Probleme mit der Wahrscheinlichkeit

In der Schrödinger'schen Theorie erfüllen die positive Dichte $\rho = \psi^\dagger\psi$ und die Stromdichte $\boldsymbol{j} \propto \Im(\bar\psi\nabla\psi)$ eine Kontinuitätsgleichung. Es folgt die zeitliche Konstanz der integrierten Dichte ρ und diese Eigenschaft ist wichtig für die Interpretation von ρ als Wahrscheinlichkeitsdichte. Auf der Suche nach einem Kandidaten für die Wahrscheinlichkeitsdichte der relativistischen Klein-Gordon-Gleichung finden wir nun ebenfalls eine die Kontinuitätsgleichung erfüllende 4-er Stromdichte j^μ. Dazu bemerken wir, dass mit ϕ auch das komplex-konjugierte Feld $\bar\phi$ die Klein-Gordon-Gleichung erfüllt, so dass

$$\bar\phi\Box\phi - \phi\Box\bar\phi \overset{(6.57)}{=} -\mu^2\left(\bar\phi\phi - \phi\bar\phi\right) = 0 \tag{6.60}$$

gilt, oder, da die linke Seite eine 4-er Divergenz ist,

$$\partial_\mu\left(\bar\phi\partial^\mu\phi - \phi\partial^\mu\bar\phi\right) \equiv \frac{2m}{\mathrm{i}}\,\partial_\mu j^\mu = 0. \tag{6.61}$$

Deshalb gehört zu jeder Lösung der Klein-Gordon-Gleichung ein kovariant erhaltener 4-er *Strom* j^μ. Dieser ist der zur Invarianz dieser Gleichung bezüglich Phasentransformationen der Wellenfunktion gehörende Noetherstrom. Da

$$\partial_0 \int j^0\,\mathrm{d}^3x = -\int \operatorname{div}\boldsymbol{j} = -\oint \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{j}, \tag{6.62}$$

gilt, wobei wir den Gaussschen Satz benutzten, verschwindet die linke Seite für einen im räumlich Unendlichen verschwindenden Strom $\boldsymbol{j}$. Deshalb ist

$$\frac{\partial}{\partial t}\int \mathrm{d}^3x\,\rho = 0, \quad \text{wobei} \quad \rho = \frac{1}{c}j^0 = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2mc^2}\left(\bar\phi\partial_t\phi - \phi\partial_t\bar\phi\right), \tag{6.63}$$

die Dichte zur zeitlich erhaltenen Größe $\int d^3x\,\rho$ ist. Diese Größe ist ein Skalar unter Drehungen im Raum. Deshalb ist ρ ein Kandidat für die Wahrscheinlichkeitsdichte, analog zu $\psi^\dagger\psi$ in der nichtrelativistischen Wellenmechanik.

Da aber die Klein-Gordon-Gleichung die zweite Zeitableitung enthält, ist eine Lösung $\phi(t,\boldsymbol{x})$ nur durch Vorgabe von (beliebig wählbaren) Anfangsdaten ϕ *und* $\partial_t\phi$ zu einer Anfangszeit t_0 bestimmt. Wie man aber leicht einsieht, kann für beliebige ϕ und $\partial_t\phi$ die Dichte ρ beide Vorzeichen annehmen. Deshalb ist ρ keine Wahrscheinlichkeitsdichte. Stattdessen wird $e\rho$ als elektrische Ladungsdichte zu interpretieren sein. Die Erhaltungsgröße $e\int d^3x\,\rho$ ist dann die zeitlich erhaltene *elektrische Ladung* des durch ϕ beschriebenen Systems. Im Gegensatz zur Wahrscheinlichkeitsdichte kann die Ladungsdichte beide Vorzeichen annehmen wenn wir erlauben, dass ϕ geladene Teilchen und entgegengesetzt geladene Antiteilchen beschreibt. Mit dieser Uminterpretation beschreiben reelle Felder neutrale Teilchen wie z.B. das ungeladene Pion π^0, da für reelle ϕ die Ladungsdichte ρ verschwindet.

6.2.2 Zustände mit positiver und negativer Energie

Für ein freies Teilchen in Ruhe ist $p^\mu = (mc, \boldsymbol{0}\,) = (\hbar\mu, \boldsymbol{0}\,)$, und die Lösungen der Klein-Gordon-Gleichung

$$\partial_0^2\phi = \frac{1}{c^2}\partial_t^2\phi = -\mu^2\phi \tag{6.64}$$

lauten $\exp(\pm i\mu ct)$. Wegen der Korrespondenzregel $E \to \mathrm{i}\hbar\partial_t$ sind die Lösungen mit *positiver Energie*

$$\phi = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu ct}. \tag{6.65}$$

Nun transformieren wir auf ein Inertialsystem, welches sich relativ zum ruhenden Teilchen mit $-\boldsymbol{v}$ bewegt. In diesem System hat das Teilchen die Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}$ und den 4-er Impuls

$$(p'^\mu) = (E'/c, \boldsymbol{p}') = \gamma m\,(c, \boldsymbol{v}), \tag{6.66}$$

so dass im neuen System die Wellenfunktion folgendermaßen aussieht

$$\phi'(x') = \phi(x) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu ct} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(p,x)/\hbar} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(p',x')/\hbar}. \tag{6.67}$$

Also hat die Wellenfunktion eines Teilchens mit Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}$ und positiver Energie E die Form

$$\phi = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-Et)/\hbar}. \tag{6.68}$$

Der zu dieser Lösung gehörende erhaltene 4-er Strom lautet

$$\rho = \frac{E}{mc^2} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{j} = \frac{\boldsymbol{p}}{m} = \rho \boldsymbol{v}. \tag{6.69}$$

Daher ist die (3-er)Stromdichte gleich der Dichte mal der Geschwindigkeit. Ein ruhendes Teilchen mit *negativer Energie* hat die Wellenfunktion

$$\phi = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu ct} \tag{6.70}$$

mit zugehöriger Dichte $\rho = -1$. Nach einer Lorentz-Transformation führt dies zu der Wellenfunktion

$$\phi = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-|E|t)/\hbar} \quad \text{mit} \quad |E| = +\sqrt{m^2c^4 + c^2\boldsymbol{p}^{\,2}}. \tag{6.71}$$

Wie man leicht nachrechnet ist der zu dieser Lösung gehörende erhaltene 4-er Strom

$$\rho = -\frac{|E|}{mc^2} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{j} = -\frac{\boldsymbol{p}}{m} = \rho \boldsymbol{v} \tag{6.72}$$

und hat daher eine negative Dichte. Wenden wir die Korrespondenzregel auf diese Lösung an, so würden wir schliessen, dass die Energie $-|E| = -\gamma mc^2$ mit zunehmender Geschwindigkeit immer kleiner würde und nach $-\infty$ strebt. Beide Probleme, also die der negative Dichte und negativen Energien können nun gleichzeitig gelöst werden, wenn wir eine Lösung der Klein-Gordon-Gleichung mit negativer Energie als Antiteilchen mit positiver Energie E und $(e\rho, e\boldsymbol{j})$ als deren Ladungs- bzw. Ladungsstromdichte um-interpretieren. Damit zeigt der Strom eines Antiteilchens in die entgegengesetzte Richtung wie seine Geschwindigkeit, wie erwartet. Diese Uminterpretation der Lösungen mit negativer Energie führt zu einem konsistenten Bild das sich experimentell vielfach bewährt hat. Wenn zum Beispiel ein geladenes skalares Teilchen mit Ladung e an das elektromagnetische Feld koppelt, dann muss sein Antiteilchen mit der entgegengesetzten Ladung $-e$ koppeln. Dies wollen wir nun nachprüfen.

6.2.3 Kopplung ans elektromagnetische Feld

In der Mechanik haben Sie bei der Diskussion von geladenen Teilchen in äußeren elektromagnetischen Feldern gelernt, dass die Ersetzungen

$$E \longrightarrow E - e\phi \quad \text{und} \quad \boldsymbol{p} \longrightarrow \boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A} \tag{6.73}$$

in der Hamilton-Funktion auf die Lorentzschen Bewegungsgleichungen für geladene Punktteilchen führen. Die entsprechenden Korrespondenzregeln

$$E \longrightarrow \mathrm{i}\hbar\partial_t - e\phi \quad \text{und} \quad \boldsymbol{p} \longrightarrow \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A} \tag{6.74}$$

ergeben dann die korrekte Schrödingergleichung für geladene Teilchen in äußeren elektromagnetischen Feldern.

In der relativistischen Formulierung werden das skalare und vektorielle Potential zu einem 4-er *Eichpotential* zusammengefasst:

$$\begin{aligned}(A^\mu) &= (A^0, A^1, A^2, A^3) = (\phi, \boldsymbol{A})\\ (A_\mu) &= (A_0, A_1, A_2, A_3) = (\phi, -\boldsymbol{A}).\end{aligned} \tag{6.75}$$

Mit diesem 4-er Vektorpotential lauten die kovariant geschriebenen Ersetzungs- und Korrespondenzregeln

$$p_\mu \longrightarrow p_\mu - \frac{e}{c}A_\mu \longrightarrow \mathrm{i}\hbar\left(\partial_\mu + \frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}A_\mu\right). \tag{6.76}$$

Hier erscheint auf der rechten Seite die sogenannte *kovariante Ableitung*

$$D_\mu = \partial_\mu + \frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}A_\mu \tag{6.77}$$

die in allen relativistisch kovarianten Eichtheorien eine wichtige Rolle spielen. Diese Ableitung ist in der Tat eichkovariant, da sie unter Eichtransformationen $A_\mu \to A'_\mu = A_\mu - \partial_\mu\lambda$ kovariant transformiert:

$$\begin{aligned}D_\mu(A') = \partial_\mu + \frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}A'_\mu &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}e\lambda/\hbar c}\left(\partial_\mu + \frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}A_\mu\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}e\lambda/\hbar c}\\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}e\lambda/\hbar c}D_\mu(A)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}e\lambda/\hbar c}.\end{aligned} \tag{6.78}$$

Der Kommutator zweier kovarianten Ableitungen lautet

$$[D_\mu, D_\nu] = \frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}\left(\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu\right) \equiv \frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}F_{\mu\nu}, \tag{6.79}$$

und ist damit proportional zum eichinvarianten antisymmetrischen *Feldstärketensor*

$$F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & E_1 & E_2 & E_3 \\ -E_1 & 0 & -B_3 & B_2 \\ -E_2 & B_3 & 0 & -B_1 \\ -E_3 & -B_2 & B_1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{6.80}$$

Die Umkehrung von (6.80) lautet

$$\begin{aligned} E_i &= F_{0i} = \partial_0 A_i - \partial_i A_0 \Longleftrightarrow \boldsymbol{E} = -\frac{1}{c}\partial_t \boldsymbol{A} - \nabla\phi \\ B_i &= -\frac{1}{2}\epsilon_{ijk}F_{jk} = -\epsilon_{ijk}\partial_j A_k \Longleftrightarrow \boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}. \end{aligned} \tag{6.81}$$

Um die relativistische Wellengleichung für geladene spinlose Teilchen in einem elektromagnetischen Feld aufzustellen, müssen wir in der Gleichung oberhalb (6.57) nur die gewöhnlichen Ableitungen durch kovariante ersetzen. Dies führt dann auf die Klein-Gordon-Gleichung für ein geladenes (spinloses) Punktteilchen im elektromagnetischen Feld,

$$\left(D_\mu D^\mu + \mu^2\right)\phi = \left(g^{\mu\nu}D_\mu D_\nu + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\phi = 0. \tag{6.82}$$

Wegen der Kovarianzeigenschaft (6.78) von D_μ unter Eichtransformationen folgt sofort, dass, falls ϕ die Klein-Gordon-Gleichung im Potential A_μ löst, die eichtransformierte Wellenfunktion

$$\phi'(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}e\lambda(x)/\hbar c}\phi(x) \tag{6.83}$$

die Klein-Gordon-Gleichung im eichtransformierten Eichpotential $A'_\mu = A_\mu - \partial_\mu\lambda$ löst.

Sei nun ϕ eine Lösung der Klein-Gordon-Gleichung mit Ladung e. Offensichtlich ist dann das komplex konjugierte Feld eine Lösung mit Ladung $-e$:

$$\left(D^2(e) + \mu^2\right)\phi = 0 \Longrightarrow \left(D^2(-e) + \mu^2\right)\bar{\phi} = 0 \tag{6.84}$$

da $D^*_\mu(e) = D_\mu(-e)$ ist.

Übungsaufgabe: Zeige, dass der 4-er Strom

$$j^\mu = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\bar{\phi}D^\mu\phi - \phi\bar{D}^\mu\bar{\phi}\right) \tag{6.85}$$

erhalten ist, $\partial_\mu j^\mu = 0$. Benutze beim Beweis die Klein-Gordon-Gleichungen (6.82) und (6.84).

Ausgeschrieben lauten die Ladungs- und Ladungsstromdichte

$$\begin{aligned}\rho &= \frac{\mathrm{i}\hbar}{2mc^2}\left(\bar{\phi}\left(\partial_t + \frac{\mathrm{i}e}{\hbar}A_0\right)\phi - \phi\left(\partial_t - \frac{\mathrm{i}e}{\hbar}A_0\right)\bar{\phi}\right)\\ \boldsymbol{j} &= \frac{\hbar}{2\mathrm{i}m}\left(\bar{\phi}\left(\nabla - \frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}\boldsymbol{A}\right)\phi - \phi\left(\nabla + \frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}\boldsymbol{A}\right)\bar{\phi}\right).\end{aligned} \tag{6.86}$$

6.2.4 Ladungskonjugation

Wir haben gesehen, dass falls ϕ die Klein-Gordon-Gleichung mit Ladung e und Masse m löst, das komplex konjugierte Feld $\bar{\phi}$ die Klein-Gordon-Gleichung mit Ladung $-e$ und derselben Masse löst. Nun ist aber ein geladenes Teilchen genau durch seine Masse und Ladung charakterisiert und die Umkehrung der Ladung entspricht dem Übergang zum *Antiteilchen*. Wir sehen, dass die relativistische Theorie für Skalarteilchen die Existenz des Antiteilchens mit derselben Masse aber umgekehrter Ladung voraussagt. Für die Felder ist die Ladungskonjugation, welche einem Teilchen sein Antiteilchen zuordnet, gegeben durch

$$\phi(x) \longrightarrow \phi_c(x) = \phi^\dagger(x). \tag{6.87}$$

Speziell für eine ebene Welle

$$\phi = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{px}-Et)/\hbar} \longrightarrow \phi_c = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{px}-Et)/\hbar}. \tag{6.88}$$

Also ist das ladungskonjugierte Feld einer negativen Energie Lösung eine Lösung mit positiver Energie und umgekehrter Ladung. Um also Lösungen mit negativer Energie zu interpretieren, komplex konjugieren wir diese und sehen sie als Lösungen mit positiver Energie und umgekehrter Ladung an.

Wie erwartet kehrt der 4-er Strom unter der Ladungungskonjugation das Vorzeichen um

$$j_c^\mu = -j^\mu. \tag{6.89}$$

Falls ρ nicht zu Null integriert, können wir die Lösungen so normieren, dass der Zustand die Ladung e oder $-e$ hat:

$$Q = e\int \mathrm{d}^3x\,\rho(t,\boldsymbol{x}) = \pm e. \tag{6.90}$$

Der Zustand mit $Q = e$ beschreibt ein Teilchen, derjenige mit $Q = -e$ ein Antiteilchen.

6.3 Pionische Atome

Ein relativistisches, geladenes Spin-0 Teilchen (z.B. ein negativ geladenes Pion π^-) bewege sich im Coulombfeld eines (unendlich schwer angenommenen) Kerns. Wir wollen die möglichen gebundenen Zustände bestimmen. In einem statischen Potential ist die Energie E erhalten und der entsprechende Zustand mit positiver Energie hat die Form

$$\phi(t, \boldsymbol{x}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}\phi(\boldsymbol{x}). \tag{6.91}$$

Die Ladungsdichte

$$e\rho = \frac{e}{mc^2}\big(E - eA_0(\boldsymbol{x})\big)\big|\phi(\boldsymbol{x})\big|^2 \tag{6.92}$$

hat dasselbe Vorzeichen wie e im *klassischen Bereich* $E > eA_0$ und das entgegengesetzte Vorzeichen im *unklassischen (Tunnel) Bereich* $E < eA_0$. Deshalb ist die Wellenfunktion eines Teilchen im Potential eine Überlagerung von Lösungen zu freien Teilchen und Antiteilchen. Die Teilchen halten sich dabei vorwiegend in Gebieten mit kleinen eA_0 und die Antiteilchen in Gebieten mit großen eA_0 auf. Dieses Phänomen nennt man die *Polarisation des Vakuums* oder kurz *Vakuumpolarisation*.

Für wasserstoffähnliche pionische Atome wählen wir das 4-er Potential

$$eA_0 = -\frac{Ze^2}{r} \quad \text{und} \quad A_i = 0 \tag{6.93}$$

mit $r = |\boldsymbol{x}|$ und die entsprechende Klein-Gordon-Gleichung lautet

$$\left(D_0^2 - \Delta + \mu^2\right)\phi(t, \boldsymbol{x}) = 0. \tag{6.94}$$

Sie kann relativ schnell gelöst werden. Setzen wir (6.91) ein, so finden wir

$$\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)^2 \phi(\boldsymbol{x}) + \hbar^2 c^2 \Delta\phi - m^2 c^4 \phi = 0. \tag{6.95}$$

Der Differentialoperator kommutiert mit $\boldsymbol{L}^2$ und mit L_3 und die Lösungen dürfen folgendermaßen angesetzt werden:

$$\phi(\boldsymbol{x}) = f_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi). \tag{6.96}$$

Wegen $r^2\Delta = r\partial_r^2 r - \boldsymbol{L}^2$ lautet die radiale Klein-Gordon-Gleichung für die Funktion $f_{n\ell}$

$$\left(\frac{E^2}{c^2} - m^2c^2\right) f_{n\ell} + \hbar^2\left(\frac{1}{r}\partial_r^2 r - \frac{\ell(\ell+1) - (Z\alpha)^2}{r^2}\right) f_{n\ell} + \frac{2Ze^2}{r}\frac{E}{c^2} f_{n\ell} = 0, \tag{6.97}$$

wobei wir die dimensionslose Sommerfeldsche *Feinstrukturkonstante* $\alpha = e^2/\hbar c$ benutzten. Wir verschieben nun Drehimpuls, Masse und Energie gemäß

$$\ell'(\ell'+1) = \ell(\ell+1) - (Z\alpha)^2, \quad m' = E/c^2 \quad \text{und} \quad 2m'E' = \frac{E^2}{c^2} - m^2c^2. \tag{6.98}$$

Mit diesen neuen Parametern schreibt sich die radiale Gleichung folgendermaßen:

$$\left(2m'E' + \frac{\hbar^2}{r}\partial_r^2 r - \hbar^2\frac{\ell'(\ell'+1)}{r^2} + \frac{2m'Ze^2}{r}\right) f = 0. \tag{6.99}$$

Wir erkennen die Radialgleichung für das Schrödingersche Coulombproblem wieder, allerdings mit dem wichtigen Unterschied, dass ℓ' nicht mehr ganzzahlig ist. Die Lösungen sind durch sogenannte *Whittaker-Funktionen* gegeben und die gebundenen Zustände haben die Energien

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + (Z\alpha/n')^2}}, \tag{6.100}$$

mit

$$n' = \ell' + 1 + \nu, \quad \nu = 0, 1, 2, \dots \quad \text{und} \quad \ell' = -\tfrac{1}{2} + \sqrt{(\ell + \tfrac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2}. \tag{6.101}$$

Die ℓ' und die Energien sind nur reell für

$$\left(\ell + \tfrac{1}{2}\right)^2 > (Z\alpha)^2 \Longleftrightarrow Z < \frac{1}{2\alpha} \sim \frac{137}{2}. \tag{6.102}$$

Um die Verwandtschaft zu Wasserstoffspektrum zu illustrieren schreiben wir n' um

$$\begin{aligned} n' &= \underbrace{(\nu + \ell + 1)}_{\equiv n} - (\ell + \tfrac{1}{2}) + \sqrt{(\ell + \tfrac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2} \\ &= n - (\ell + \tfrac{1}{2}) + \sqrt{\dots}, \quad n = \ell + 1, \ell + 2, \dots . \end{aligned}$$

Offensichtlich spielt n diesselbe Rolle wie die Hauptquantenzahl beim nicht-relativistischen Wasserstoffatom. Entwickeln wir in Potenzen der Feinstrukturkonstanten, so finden wir

$$E_{n\ell} \sim mc^2 - \frac{Z^2e^2}{2an^2}\left(1 + \frac{Z^2\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{\ell + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4}\right)\right). \tag{6.103}$$

Der erste Term ist die Ruheenergie, der zweite die nichtrelativistische Energie eines H-artigen Atoms und der letzte Term ist die relativistische *Feinstruktur*, welche die ℓ-Entartung aufhebt. Werden auch noch die Vakuumpolarisationseffekte (0,5 Prozent-

Effekt) berücksichtigt, dann ist diese Formel für das Termschema von pionischen Atomen in guter Übereinstimmung mit den experimentell gemessenen Spektren. Vernachlässigt man die starke Wechselwirkung so ergeben sich folgende dominante Beiträge zur elektromagnetischen Bindungsenergie des $1s$-Zustandes im pionischen Wasserstoffatom [14]:

Bindungsenergie	[eV]
Coulombwechselwirkung für Punktteilchen	3235.156
Korrekturen aufgrund der endlichen Größe von p und π^-	-0.102
Vakuumpolarisation bis Ordnung α^2	3.246

6.4 Aufgaben zu Kapitel 6

Aufgabe 6.1: Lorentztransformationen

1. Eine beliebige eigentliche orthochrone Lorentztransformation hat die Form

$$\Lambda(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\theta}) = \mathrm{e}^{\omega(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\theta})}, \quad \omega(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\theta}\,) = \begin{pmatrix} 0 & -\alpha_1 & -\alpha_2 & -\alpha_3 \\ -\alpha_1 & 0 & -\theta_3 & \theta_2 \\ -\alpha_2 & \theta_3 & 0 & -\theta_1 \\ -\alpha_3 & -\theta_2 & \theta_1 & 0 \end{pmatrix} .$$

Wie sieht folgend Lorentz-Transformation aus

$$\Lambda(\alpha\boldsymbol{e},0) = \mathrm{e}^{\omega(\boldsymbol{e},0)\alpha} \qquad \text{mit} \qquad \boldsymbol{e} = (1,0,0)\,.$$

2. Zeigen Sie, dass

$$\Lambda(\mathcal{R}\boldsymbol{\alpha},0) = \Lambda(\mathcal{R})\Lambda(\boldsymbol{\alpha},0)\Lambda^{-1}(\mathcal{R}) \quad \text{mit} \quad \Lambda(\mathcal{R}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & & & \\ 0 & & \mathcal{R} & \\ 0 & & & \end{pmatrix}$$

gilt, wobei $\mathcal{R}$ eine Rotationsmatrix ist.
Hinweis: Zeigen zuerst die Identität

$$\omega(\mathcal{R}\boldsymbol{\alpha},0) = \Lambda(\mathcal{R})\omega(\boldsymbol{\alpha},0)\Lambda^{-1}(\mathcal{R})$$

3. Die Lorentzboosts sind

$$\Lambda(\alpha\boldsymbol{e},0)=\mathrm{e}^{\omega(\boldsymbol{e},0)\alpha}=\begin{pmatrix}\cosh(\alpha) & -\sinh(\alpha)\,\boldsymbol{e}^{\mathrm{T}}\\ -\sinh(\alpha)\boldsymbol{e} & \delta_{ij}-(1-\cosh(\alpha))e_ie_j\end{pmatrix}\,,\qquad \alpha\geq 0$$

und bilden das Inertialsystem I auf I' ab:

$$x\mapsto x'=\Lambda x\,.$$

Welche Koordinaten x hat der Ursprung $x'=(x'^0,\boldsymbol{0})$ von I'? Benutzen Sie das Resultat, um α und $\boldsymbol{e}$ als Funktion der Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}$ von I' relativ zu I auszudrücken. Schreiben Sie $\Lambda(\alpha\boldsymbol{e},0)$ als Funktion von $\boldsymbol{v}$.

4. Betrachten Sie einen Urmeter, welcher in I' ruht. Die Endpunkte des Urmeters seien

$$x'=\begin{pmatrix}ct'\\0\\0\\0\end{pmatrix}\,,\quad y'=\begin{pmatrix}ct'\\1\\0\\0\end{pmatrix}\,.$$

Welche Koordinaten (x,y) haben die Endpunkte des Urmeters in I, falls sich I' relativ zu I in der 1-Richtung bewegt:

$$\boldsymbol{v}=\begin{pmatrix}v\\0\\0\end{pmatrix}\ ?$$

Welche Länge des Stabes mißt der Beobachter im Inertialsystem I?

5. Eine Uhr ruhe in I' am Ursprung. Gegeben sind zwei Zeiten $x'^0=0$ und $y'^0=t'$. Berechnen Sie $\Delta t:=y^0-x^0$.

Aufgabe 6.2: Lorentz-Transformation von $F^{\mu\nu}$

Der Feldstärketensor $F^{\mu\nu}$ transformiert bei einem Wechsel des Inertialsystems $I\to I'$ gemäß

$$F^{\mu\nu}(x)\mapsto F'^{\mu\nu}(x')=\Lambda^{\mu}{}_{\alpha}\Lambda^{\nu}{}_{\beta}F^{\alpha\beta}(x)\,.$$

Betrachten Sie den Lorentz-Boost

$$\begin{aligned}x'^0&=\gamma x^0-\beta\gamma x^1, &\qquad x'^2&=x^2\,,\\ x'^1&=\gamma x^1-\beta\gamma x^0, &\qquad x'^3&=x^3\,.\end{aligned}$$

Wie transformiert sich die elektrische Feldstärke $\boldsymbol{E}$ und die magnetische Feldstärke $\boldsymbol{B}$ in

$F^{\mu\nu}$ unter dieser Lorentz-Transformation? Benutzen Sie die Notation und Konventionen in der Vorlesung.

Aufgabe 6.3: Intervalle im Minkowski-Raum

P und Q seien zwei Ereignisse im Minkowski-Raum. Die Koordinaten von P seien $x = (x^\mu)$ und die Koordinaten von Q seien y.

1. Zeigen Sie, dass für raumartig getrennte Ereignisse ein Inertialsystem existiert, in dem P und Q gleichzeitig sind und dass ihre Zeitreihenfolge durch eine geeignete Wahl des Inertialsystems vertauscht werden kann.
2. Zeigen Sie, dass für zeitartig getrennte Ereignisse ein Inertialsystem existiert, in dem P und Q am selben Raumpunkt sind.
3. Für lichtartig getrennte Ereignisse: Bestimmen Sie die Hyperfläche in der Raumzeit, auf der Q bezüglich P liegen kann.

Hinweis: Bitte keine langen Rechnungen anstellen. Argumentieren Sie möglichst geometrisch. Diskutieren Sie die Bildmenge $\{\eta = \Lambda\xi\}$ für raumartige, zeitartige und lichtartige Differenzvektoren $\xi = y - x$ wenn Λ die Menge der Lorentztransformationen durchläuft.

Aufgabe 6.4: Erhaltene Ladung der Klein-Gordon-Gleichung

Zeigen Sie, dass für jedes Wellenpaket $\phi^+(t, \boldsymbol{x})$ bzw. $\phi^-(t, \boldsymbol{x})$ bestehend aus Lösungen der freien Klein-Gordon-Gleichung mit $\epsilon = \hbar\omega \geq mc^2$ oder aus Lösungen mit $\epsilon \leq mc^2$ die erhaltene Größe

$$Q = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2mc^2} \int \left\{ \phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\partial \phi^*}{\partial t} \phi \right\}$$

ein festes Vorzeichen hat.

Aufgabe 6.5: Lösungen der Wellengleichung

Wir betrachten die Wellengleichung $\Box\phi = 0$ in zwei Raumzeit-Dimensionen. Dies ist auch die Klein-Gordon-Gleichung für ein masseloses Teilchen in zwei Raumzeit-Dimensionen.

1. Charakterisieren Sie die allgemeine Lösung der Wellengleichung

   $$\Box\phi = \left(\frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \phi = 0\,.$$

   Hinweis: Führen Sie Lichtkegelkoordinaten $x^- = ct - x$ und $x^+ = ct + x$ ein.

2. Eine Lösung ist eindeutig durch das anfängliche Feld $\phi|_{t=0} = \phi_0(x)$ und das anfängliche „Geschwindigkeitsfeld“ $\partial_t\phi|_{t=0} = c\phi_1(x)$ bestimmt. Wie sieht die allgemeine Lösung für gegebene ϕ_0 und ϕ_1 aus?
3. Es seien
$$\phi_0 = \mathrm{e}^{-x^2/2\sigma^2} \quad \text{und} \quad \phi_1 = \phi_0(x) \cdot \sin(kx)\,.$$
Wie sieht die Lösung für diese Anfangsbedingung aus?
4. Plotten Sie die Lösungen für $ct = 0, 1, 2, 3, 4$ und 5. Wählen Sie dabei $\sigma = 1$ (besser: x und ct werden in Vielfachen von σ angegeben) und $k\sigma = 1$.

Aufgabe 6.6: Das skalare Feld

In der Vorlesung wurde die 4-er Stromdichte j^μ des Klein-Gordon-Feldes ϕ in Anwesenheit eines elektromagnetischen Feldes mit dem Potential A_μ folgendermaßen definiert:
$$j^\mu = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\phi^* D^\mu\phi - \phi(D^\mu\phi)^*\right)$$
Darin tritt die kovariante Ableitung auf:
$$D_\mu\phi = \left(\partial_\mu + \frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}A_\mu\right)\phi\,.$$

1. Zeigen Sie, dass die Stromdichte eichinvariant ist, d.h. invariant unter der Transformation
$$A_\mu \mapsto A_\mu - \partial_\mu\lambda, \quad \phi \mapsto \mathrm{e}^{\mathrm{i}e\lambda/\hbar c}\phi$$
mit beliebiger Eichfunktion λ ist.
2. Zeigen Sie, dass der Strom erhalten ist,
$$\partial_\mu j^\mu = 0,$$
falls ϕ die Klein-Gordon-Gleichung löst,
$$\left(D_\mu D^\mu + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\phi = 0\,.$$

Aufgabe 6.7: Klein'sches Paradoxon

Ein positiv geladenes Teilchen mit Impuls p und Energie E (in $1+1$ Dimensionen mit Koordinaten (t,x)) treffe bei $x = 0$ auf eine elektrostatische Barriere $A_0(x) = U\theta(x)$ mit

$U > 0$ und

$$\theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \\ 1 & \text{für } x > 0\,. \end{cases}$$

Berechnen Sie die Streulösungen der Klein-Gordon-Gleichung

$$\left\{ \frac{1}{c^2} \left(\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} - eA_0 \right)^2 + \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - m^2 c^2 \right\} \phi = 0\,.$$

Nehmen Sie an, dass die Teilchen von links gegen die Barriere anlaufen. Dann ist für $x < 0$

$$\phi(t,x) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar} \left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar} + \mathcal{R}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar} \right)\,,$$

mit Reflexions-Amplitude $\mathcal{R}$. Setzen Sie weiterhin für $x > 0$

$$\phi(t,x) = \mathcal{T}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}qx/\hbar}$$

mit Transmissions-Amplitude $\mathcal{T}$.

1. Wie lautet die Beziehung zwischen Energie und Impuls links und rechts von der Barriere? Welche qualitativen Aussagen können Sie über die Lösungen in den drei Energie-Intervallen

   $$E \geq eU + mc^2, \qquad eU - mc^2 < E < eU + mc^2, \qquad E < eU - mc^2$$

   machen?
2. Fordern Sie bei der Lösung des Streuproblems Stetigkeit für ϕ und $\partial_x\phi$ bei $x = 0$ und berechnen Sie die Koeffizienten $\mathcal{R}$ und $\mathcal{T}$ für obige drei Energie-Intervalle.
3. Was können Sie (ohne weitere Rechnung) über die Reflexionswahrscheinlichkeit $|\mathcal{R}|^2$ in den Intervallen

   $$-mc^2 \leq E \leq -mc^2 + eU \quad \text{und} \quad mc^2 \leq E \leq mc^2 + eU$$

   aussagen?
4. Berechnen Sie die Gruppen-Geschwindigkeit rechts vom Sprung für Energien $E < -mc^2$. Diese Geschwindigkeit sollte positiv sein. Was für eine (scheinbar) unphysikalische Eigenschaft von $\mathcal{R}$ folgt daraus?

Kapitel 7

Das Diracsche Elektron

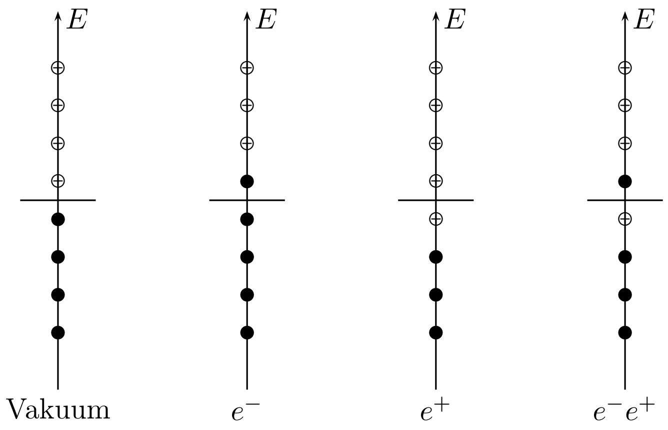
If one is working from the point of view of getting beauty into one's equation, ... one is on a sure line of progress.
P.A.M. Dirac, 1963

Die Diracsche Theorie des Elektrons ist der erste *wirksame* Versuch die Wellenmechanik relativistisch invariant zu machen. Beim Auffinden seiner Gleichung war DIRAC[1] mehr durch die Unverträglichkeit von Wellengleichungen mit zweiter Zeitableitung und seiner in diesen Jahren entwickelten Transformationstheorie irritiert [13]. Deshalb suchte er für das Elektron eine Wellengleichung erster Ordnung in den Ableitungen. 1927 realisierte er, dass für ein *4-komponentiges Elektronenfeld* eine derartige Gleichung erster Ordnung relativ leicht gefunden werden kann. Die entsprechende Dirac-Gleichung impliziert dann automatisch, dass ein Elektron den Spin $\hbar/2$ und ein magnetisches Moment hat. Auch das Wasserstoff-Spektrum mit Feinstruktur wird richtig beschrieben. Allerdings enthält die Theorie unendlich viele Zustände mit beliebig negativer Energie. Hier benutzte DIRAC das Pauli-Prinzip um einen Ausweg aus diesem scheinbaren Dilemma zu finden: Er postulierte, dass im Vakuum alle Zustände mit negativer Energie besetzt sind, wie in der linken Figur der folgenden Abbildung skizziert. Dabei bedeuten ausgefüllte Kreise besetzte und nicht ausgefüllte Kreise unbesetzte Zustände. Löcher in diesem sogenannten Diracsee müssen dann als Spin $\frac{1}{2}$ Teilchen mit positiver Ladung interpretiert werden.

Durch den Übergang eines See-Zustandes in einen Zustand mit positiver Energie entstehen ein e^- und ein Loch, d.h. ein positiv geladenes reales Teilchen, und die Teilchenzahl

[1] Siehe `http://www-groups.dcs.st-and.ac.uk/ history/Mathematicians/Dirac.html` für den Lebenslauf von PAUL ADRIAN MAURICE DIRAC.

ist nicht mehr erhalten. Deshalb ist Diracs Elektronentheorie natürlicherweise eine *Mehrteilchentheorie* und keine Einteilchentheorie.



Da es zu jener Zeit unpopulär war neue Teilchen in eine Theorie einzuführen, hat Dirac seine Gleichung als Theorie für Elektronen und Protonen veröffentlicht. Bald danach zeigte Hermann Weyl jedoch, dass Elektronen und Lochzustände die gleiche Masse haben müssen. Glücklicherweise lies die Entdeckung dieser hypothetischen Lochzustände, der Positronen (e^+) nicht lange auf sich warten. 1932 fand Anderson das Positron in der kosmischen Strahlung.

7.1 Diracgleichung für freie Elektronen

Nachdem wir im letzten Kapitel die Wellengleichung für spinlose Teilchen diskutierten, untersuchen wir hier die Wellengleichungen für Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$, also Elektronen, Muonen, Neutrinos, etc. Da für ein nichtrelativistisches Teilchen mit Spin 1/2 die Wellenfunktion zwei Komponenten hat, erwarten wir, dass auch die Wellenfunktion eines relativistischen Elektrons mehrere Komponenten aufweist. Sei also

$$\psi : M \ni x \longrightarrow \psi(x) \in \mathbb{C}^n \tag{7.1}$$

das Elektronenfeld. Nach unseren Bemerkungen zum Problem mit der Wahrscheinlichkeit für Wellengleichungen die eine Zeitableitung zweiter Ordnung enthalten, suchen wir eine Differentialgleichung erster Ordnung in der Zeit. Eine relativistisch kovariante Wellengleichung muss dann auch erster Ordnung in den räumlichen Koordinaten sein. Deshalb machen wir den Ansatz

$$((\gamma, p) - mc)\,\psi = 0 \quad \text{mit} \quad (\gamma, p) = \gamma^\mu p_\mu \equiv \not{p} \quad \text{und} \quad \gamma^\mu \in \mathcal{L}(\mathbb{C}^n). \tag{7.2}$$

Wir benutzten die Einsteinsche Summenkonvention und $p_\mu = \mathrm{i}\hbar\partial_\mu$. Man schreibt für $\gamma^\mu a_\mu$ meistens $\not{a}$ (a-slash). Die Wellengleichung soll kovariant sein und weiterhin die relativistische Energie-Impuls Relation

$$\left(g^{\mu\nu}p_\mu p_\nu - m^2c^2\right)\psi = 0 \tag{7.3}$$

nach sich ziehen. Man rechnet

$$\left(\not{p} + mc\right)\left(\not{p} - mc\right)\psi = \left(\not{p}\not{p} - m^2c^2\right)\psi = 0 \tag{7.4}$$

und folgert, dass

$$\not{p}\not{p} = \gamma^\mu\gamma^\nu p_\mu p_\nu = \frac{1}{2}\left(\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu\right)p_\mu p_\nu = g^{\mu\nu}p_\mu p_\nu \tag{7.5}$$

gelten muss. Hier ist es angebracht, den *Antikommutator* $\{A,B\} \equiv AB + BA$ von A und B einzuführen. Wir folgern, dass die Gamma-Matrizen γ^μ folgende Antikommutations-Regeln erfüllen müssen:

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}. \tag{7.6}$$

Die Wellengleichung (7.2) erster Ordnung impliziert also die Klein-Gordon-Gleichung (7.3) zweiter Ordnung, falls die 4 Matrizen $\gamma^\mu \in \mathcal{L}(\mathbb{C}^n)$ die Dirac-Algebra (7.6) erfüllen. Der folgende Satz besagt, dass die Wellenfunktion in (7.3) mindestens 4 Komponenten haben muss:

Satz: *Es gibt (bis auf Äquivalenz) nur eine irreduzible Darstellung der Antikommutationsregeln (7.6), und diese ist* 4*-dimensional,* $n = 4$.

Haben wir 4 Matrizen γ^μ gefunden welche die Dirac-Algebra erfüllen, dann erfüllen auch die konjugierten Matrizen

$$\tilde{\gamma}^\mu = U\gamma^\mu U^{-1} \tag{7.7}$$

für jedes invertierbare U die Dirac-Algebra. Darstellungen, welche auf diese Art auseinander hervorgehen heissen äquivalent. Da es zu jeder Darstellung unendlich viele äquivalente Darstellungen gibt, kann ein Eindeutigkeitssatz immer nur bis auf Äquivalenz gelten. Weiterhin erfüllen zum Beispiel auch die 8×8 Matrizen

$$\hat{\gamma}^\mu = \begin{pmatrix} \gamma^\mu & 0 \\ 0 & \gamma^\mu \end{pmatrix} \tag{7.8}$$

die auf $\mathbb{C}^4 \times \mathbb{C}^4$ operieren, die Dirac-Algebra, falls die γ^μ dies tun. Aber die $\hat{\gamma}^\mu$ sind nur zwei

Kopien der ursprünglichen γ's und entsprechend ist die zu ihnen gehörige Dirac-Gleichung nur zweimal die mit γ^μ gebildeten Dirac-Gleichung. Die $\hat{\gamma}^\mu$ lassen die beiden $\mathbb{C}^4$ invariant, d.h. jeder Vektor im ersten (zweiten) Unterraum $\mathbb{C}^4$ wird in denselben Unterraum abgebildet. Eine Darstellung die invariante Unterräume hat heisst *reduzibel* und eine die keinen invarianten (echten) Unterraum hat *irreduzibel*. Aus jeder irreduziblen Darstellung kann man beliebig viele reduzible machen, wie zum Beispiel in (7.8). Deshalb kann sich ein Eindeutigkeitssatz für Darstellungen nur auf irreduzible Darstellungen beziehen.

Um obigen Satz zu beweisen betrachtet man die endliche Gruppe bestehend aus den 32 Elementen

$$\pm\mathbb{1}, \pm\gamma^\mu, \pm\gamma^{\mu_1}\gamma^{\mu_2}, \pm\gamma^{\mu_1}\gamma^{\mu_2}\gamma^{\mu_3}, \pm\gamma^{\mu_1}\gamma^{\mu_2}\gamma^{\mu_3}\gamma^{\mu_4}, \tag{7.9}$$

wobei $\mu_1 < \mu_2 < \mu_3 < \mu_4$ ist. Jede Darstellung der Dirac-Algebra bestimmt eine Darstellung dieser Gruppe und jede Darstellung A dieser Gruppe mit $A(-\mathbb{1}) = -\mathbb{1}$ bestimmt eine Darstellung der Dirac-Algebra. Mit dieser Beobachtung kann man die ausgefeilte Darstellungstheorie für endliche Gruppen benutzen, z.B. dass eine Darstellung einer endlichen Gruppe G genau dann irreduzibel ist, falls

$$\frac{1}{\dim G}\sum_{a\in G} \mathrm{Sp}\, A(a)\mathrm{Sp}\, A^\dagger(a) = 1 \tag{7.10}$$

gilt. Statt den Beweis zu Ende zu führen geben wir die gebräuchlichen Darstellungen an.

7.2 Aufspaltung der Diracgleichung

Wir untersuchen die Dirac-Gleichung in der sogenannten *chiralen* oder *Hochenergie(HE)-Darstellung*. In dieser Darstellung haben die γ-Matrizen die Form

$$\begin{aligned}\gamma^0 &= \sigma_1 \otimes \sigma_0 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_0 \\ \sigma_0 & 0 \end{pmatrix}\\ \gamma^k &= -\mathrm{i}\sigma_2 \otimes \sigma_k = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}\end{aligned} \tag{7.11}$$

Hier sind

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{7.12}$$

die Pauli-Matrizen und σ_0 die 2-dimensionale Einheitsmatrix. Bei der Behandlung des relativistischen Elektrons erweist es sich nämlich als vorteilhaft, die drei Pauli-Matrizen durch $\sigma_0 = \mathbb{1}_2$ zu ergänzen und die hermiteschen Matrizen

$$\sigma_\mu = \tilde{\sigma}^\mu = \{\sigma_0, \sigma_k\} \quad \text{bzw.} \quad \sigma^\mu = \tilde{\sigma}_\mu = \{\sigma_0, -\sigma_k\} \tag{7.13}$$

einzuführen. Offensichtlich ist γ^0 hermitesch und $\gamma^1, \gamma^2, \gamma^3$ antihermitesch. Weiterhin ist

$$\not{p} \equiv \gamma^\mu p_\mu = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^\mu p_\mu \\ \tilde{\sigma}^\mu p_\mu & 0 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 0 & (\sigma, p) \\ (\tilde{\sigma}, p) & 0 \end{pmatrix}. \tag{7.14}$$

Benutzt man die bekannte Relation $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij}\sigma_0 + \mathrm{i}\epsilon_{ijk}\sigma_k$, dann findet man leicht

$$(\sigma, a) \cdot (\sigma, b) = \sigma_0 \left(a^0 b^0 + \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b}\right) + \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(a^0 \boldsymbol{b} + \boldsymbol{a} b^0 + \mathrm{i}\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}\right) \tag{7.15}$$

und insbesondere

$$(\sigma, a) \cdot (\tilde{\sigma}, a) = \sigma_0 \left(a^0 a^0 - \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{a}\right) = \sigma_0\,(a, a). \tag{7.16}$$

Ausgeschrieben hat (σ, a) die Form

$$(\sigma, a) = \begin{pmatrix} a^0 + a^3 & a^1 - \mathrm{i}a^2 \\ a^1 + \mathrm{i}a^2 & a^0 - a^3 \end{pmatrix}, \quad \text{so dass} \quad \det(\sigma, a) = \det(\tilde{\sigma}, a) = (a, a) \tag{7.17}$$

gilt. Falls also $\det(\sigma, a) = 1$ ist, gilt wegen (7.16)

$$(\tilde{\sigma}, a) = (\sigma, a)^{-1}. \tag{7.18}$$

Nach diesen Ausführungen kehren wir zur Dirac-Gleichung zurück und zerlegen den Dirac-Spinor in zwei 2-er Spinoren:

$$\psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}. \tag{7.19}$$

Das Felder ϕ und χ heissen 2-*Spinorfeld* und 2-*Antispinorfeld*. Mit diesen 2-komponentigen Feldern schreibt sich die Dirac-Gleichung wie folgt,

$$(\gamma, p)\psi = \begin{pmatrix} 0 & (\sigma, p) \\ (\tilde{\sigma}, p) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\sigma, p)\chi \\ (\tilde{\sigma}, p)\phi \end{pmatrix} = mc \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}. \tag{7.20}$$

Die Dirac-Gleichung zerfällt in 2 gekoppelte Systeme für das Spinor- und Antispinorfeld,

$$\begin{aligned} (\sigma, p)\chi &= mc\phi \\ (\tilde{\sigma}, p)\phi &= mc\chi. \end{aligned} \tag{7.21}$$

Beide Felder erfüllen wegen (7.3) die Klein-Gordon-Gleichung

$$(p,p)\chi = m^2c^2\chi \quad \text{und} \quad (p,p)\phi = m^2c^2\phi. \tag{7.22}$$

7.3 Lorentz-Kovarianz der Diracgleichung

Wir gehen nun ganz ähnlich vor wie bei der Behandlung von nichtrelativistischen Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$. Im nichtrelativistischen Fall ersetzten wir die klassische Drehgruppe $SO(3)$ durch die quantenmechanische Drehgruppe $SU(2)$. Analog konstruieren wir nun die zweifache Überlagerung $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ der Lorentzgruppe. Spinorfelder transformieren nach Darstellungen der $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ und nicht der Lorentzgruppe.

Jede selbstadjungierte 2×2-Matrix ist eine reelle Linearkombination der 4 sigma-Matrizen und kann als (σ,ξ) mit reellen ξ^μ geschrieben werden. Mit (σ,ξ) ist auch $A(\sigma,\xi)A^\dagger$ selbstadjungiert, und daher gibt es einen reellen 4-er Vektor η, so dass

$$A(\sigma,\xi)A^\dagger = (\sigma,\eta) = \big(\sigma,\Lambda(A)\xi\big), \tag{7.23}$$

wobei wir in der letzten Gleichung benutzten, dass η linear von ξ abhängt. Wegen

$$\begin{aligned}\big(\sigma,\Lambda(A_1A_2)\xi\big) &= A_1A_2\big(\sigma,\xi)(A_1A_2)^\dagger = A_1A_2(\sigma,\xi)A_2^\dagger A_1^\dagger \\ &= A_1\big(\sigma,\Lambda(A_2)\xi\big)A_1^\dagger = \big(\sigma,\Lambda(A_1)\Lambda(A_2)\xi\big)\end{aligned}$$

und $\Lambda(\mathbb{1}_2)=\mathbb{1}_4$, ist $A \longrightarrow \Lambda(A)$ eine Darstellung falls die Matrizen A eine Gruppe bilden. Nun wollen wir annehmen, dass die Matrizen A in der 6-dimensionalen *speziellen linearen Gruppe*

$$SL(2,\mathbb{C}) = \{A\in GL(2,\mathbb{C})\,|\,\det A = 1\} \tag{7.24}$$

liegen. Wegen

$$(\xi,\xi) = \det(\sigma,\xi) \overset{\det A=1}{=} \det A(\sigma,\xi)A^\dagger \overset{(7.23)}{=} \det\big(\sigma,\Lambda(A)\xi\big) = \big(\Lambda(A)\xi,\Lambda(A)\xi\big) \tag{7.25}$$

ist $\Lambda(A)$ eine Lorentz-Transformation für jedes A in $SL(2,\mathbb{C})$. Da

- $SL(2,\mathbb{C})$ zusammenhängend ist,
- die Darstellung $A \longrightarrow \Lambda(A)$ stetig ist,
- und $\Lambda(\mathbb{1}_2)=\mathbb{1}_4$ ist,

kann das Bild von $SL(2,\mathbb{C})$ nur in der Zusammenhangskomponente $L_+^\uparrow$ liegen. Man zeigt aber, dass die Abbildung surjektiv ist, so dass

$$\Lambda\left(SL(2,\mathbb{C})\right) = L_+^\uparrow \tag{7.26}$$

gilt. Im Gegensatz zur eigentlichen orthochronen Lorentzgruppe ist $SL(2,\mathbb{C})$ einfach zusammenhängend und deshalb die universelle Überlagerungsgruppe von $L_+^\uparrow$, genauso wie $SU(2)$ die universelle Überlagerungsgruppe der Drehgruppe $SO(3)$ ist. Der Kern der Abbildung Λ besteht aus den beiden Elementen $\pm\mathbb{1}$ welche die Untergruppe $\mathbb{Z}_2 \subset SL(2,\mathbb{C})$ bilden. Deshalb ist $SL(2,\mathbb{C})$ die doppelte Überlagerung von $L_+^\uparrow$,

$$L_+^\uparrow = SL(2,\mathbb{C})/\mathbb{Z}_2. \tag{7.27}$$

Bilden wir nun die Spur von (7.23) für ein unitäres $A = U \in SU(2)$, so folgt

$$\mathrm{Sp}\, U(\sigma,\xi)U^\dagger = \mathrm{Sp}\,(\sigma,\xi) = 2\xi^0 = \mathrm{Sp}\,\big(\sigma, \Lambda(U)\xi\big) = 2(\Lambda(U)\xi)^0. \tag{7.28}$$

Also ist $\Lambda(U)$ eine Lorentz-Transformation ohne Zeitkontraktion und deshalb eine reine Drehung im Raum:

$$\Lambda(U) = \begin{pmatrix} 1 & \boldsymbol{0}^T \\ \boldsymbol{0} & R(U) \end{pmatrix}, \quad \text{mit} \quad R(U) \in SO(3). \tag{7.29}$$

Folglich enthält die Darstellung $A \longrightarrow \Lambda(A)$ die Darstellung $U \longrightarrow R(U)$ der nichtrelativistischen Quantenmechanik. Wir werden sehen, dass die Wellenfunktion eines relativistischen Spin-$\frac{1}{2}$ Teilchens mit A transformiert. Deshalb nennt man $SL(2,\mathbb{C})$ zurecht die quantenmechanische Lorentzgruppe.

Lorentztransformationen: Nun müssen wir die Transformationen der 2-er Spinoren,

$$(\phi,\chi) \longrightarrow (\phi',\chi'), \tag{7.30}$$

finden, so dass die Dirac-Gleichung unter Poincare-Transformationen

$$x' = \Lambda(A)x + a \quad \text{und} \quad p' = \Lambda(A)p \tag{7.31}$$

kovariant ist. In anderen Worten, die Spinoren müssen so transformieren, dass, falls (ϕ,χ) die Dirac-Gleichung im Inertialsystem mit Koordinaten (x^μ) erfüllen, die transformierten Spinoren (ϕ',χ') die Dirac-Gleichung im Inertialsystem mit Koordinaten (x'^μ) erfüllen.

Wir schliessen, dass folgende Gleichung gelten müssen:

$$
\begin{aligned}
(\sigma, p')\chi' &= \big(\sigma, \Lambda(A)p\big)\chi' = A(\sigma, p)A^\dagger \chi' \stackrel{!}{=} mc\phi' \\
(\tilde{\sigma}, p')\phi' &= (\tilde{\sigma}, \Lambda(A)p)\phi' = A^{\dagger -1}(\tilde{\sigma}, p)A^{-1}\phi' \stackrel{!}{=} mc\chi'.
\end{aligned} \tag{7.32}
$$

Falls wir nun

$$\phi'(x') = A\phi(x) \quad \text{und} \quad \chi'(x') = A^{\dagger -1}\chi(x) \tag{7.33}$$

definieren, dann sind die rechten Gleichheitszeichen in (7.32) gewährleistet und die Dirac-Gleichung im gestrichenen Inertialsystem ist erfüllt, falls sie im ursprünglichen Inertialsystem erfüllt war. Dies beweist, dass unter (7.33) Lösungen im Inertialsystem I in Lösungen im Inertialsystem I' übergehen, falls die beiden Systeme durch eine orthochrone eigentliche Lorentz-Transformation verbunden werden können.

Raumpiegelung: Um zu sehen, wie Spinoren unter der Raumspiegelung

$$x' = Px \quad , \quad p' = Pp, \quad \text{mit} \quad P = G \tag{7.34}$$

transformieren, bemerken wir zuerst, dass $(\sigma, p') = (\tilde{\sigma}, p)$ und $(\tilde{\sigma}, p') = (\sigma, p)$ gilt. Wenn wir nun die Spinoren gemäß

$$\phi'(x') = \chi(x) \quad \text{und} \quad \chi'(x') = \phi(x) \tag{7.35}$$

unter Spiegelungen transformieren, dann erfüllen offensichtlich die transformierten Spinoren die Dirac-Gleichung im gespiegelten System falls die ursprünglichen Felder die Dirac-Gleichung im ursprünglichen Inertialsystem erfüllen. Wir sehen also, dass bei Raumspiegelungen die 2-Spinoren ausgetauscht werden. Es ist also möglich die Kovarianz der Dirac-Gleichung unter eigentlichen Lorentz-Transformation und Spiegelungen zu haben. Deshalb ist die Diractheorie zumindest invariant unter der Gruppe $iL^\uparrow$ von Lorentz-Transformationen ohne Zeitumkehr.

Räumliche Drehungen: Diese sind nach (7.29) ein Spezialfall von (7.33). Für unitäre $A = U$ ist nämlich $\Lambda(U)$ eine Drehung im Raum. Mit $A^\dagger = U^\dagger = U^{-1}$ findet man

$$\phi'(t, R\boldsymbol{x}) = U\phi(t, \boldsymbol{x}) \quad \text{und} \quad \chi'(t, R\boldsymbol{x}) = U\chi(t, \boldsymbol{x}), \tag{7.36}$$

d.h. die aus der nichtrelativistischen Quantenmechanik bekannten Transformationsregeln eines Spin-$\frac{1}{2}$ Teilchens unter der quantenmechanischen Drehgruppe $SU(2)$.

Die Weylgleichung für Neutrinos: Wir haben gesehen, dass unter Spiegelungen das 2-Spinorfeld und das 2-Antispinorfeld vertauscht werden. Deshalb liegt die Wurzel der

Einführung zweier Felder in der besonderen Rolle den die Raumspiegelungen in der Lorentzgruppe spielen. Nichtrelativistische Spinoren transformieren unter P in sich. In der relativistischen Theorie kann P nur eine Symmetrie sein, wenn Spinor- und Antispinorfeld *beide* vorliegen.

Ist die Parität wie in der schwachen Wechselwirkung keine Symmetrie, so kann man für masselose Teilchen (zum Beispiel das Neutrino[2]) offensichtlich auch $L_+^\uparrow$-kovariante Feldgleichungen formulieren, zum Beispiel

$$(\sigma, p)\chi = 0, \tag{7.37}$$

wobei χ wie ein 2-Antispinorfeld transformiert. Die Gleichung (7.37) für das Neutrino ist die bekannte Weyl-Gleichung. Die entsprechende $L_+^\uparrow$-kovariante freie Weyl-Gleichung für das Spinorfeld lautet

$$(\tilde{\sigma}, p)\phi = 0. \tag{7.38}$$

7.3.1 Transformationsgesetz für Spinoren

Unter den Elementen der orthochronen eigentlichen Lorentzgruppe $iL_+^\uparrow$ transformiert der Diracspinor gemäß

$$\psi'(x') = \begin{pmatrix} \phi'(x') \\ \chi'(x') \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & A^{\dagger -1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi(x) \\ \chi(x) \end{pmatrix} \equiv S(A)\psi(x), \tag{7.39}$$

und unter Raumspiegelungen

$$\psi'(x') = \begin{pmatrix} \phi'(x') \\ \chi'(x') \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_0 \\ \sigma_0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi(x) \\ \chi(x) \end{pmatrix} = \gamma^0\psi(x) \equiv S(P)\psi(x). \tag{7.40}$$

Unter Benutzung der expliziten Form von $S(A)$ und (7.23) findet man nun leicht

$$S(A)(\gamma, p)S^{-1}(A) = (\gamma, \Lambda(A)p) = \big(\Lambda^{-1}(A)\gamma, p\big) \tag{7.41}$$

was äquivalent zur wichtigen Formel

$$S^{-1}(A)\gamma^\mu S(A) = \Lambda^\mu{}_\nu \gamma^\nu \tag{7.42}$$

[2]Es gibt inzwischen allerdings gute Evidenz, dass Neutrinos massiv sind.

ist. Weiterhin gelten

$$S^{-1}(P)\gamma^0 S(P) = \gamma^0 \quad \text{und} \quad S^{-1}(P)\gamma^i S(P) = \gamma^0\gamma^i\gamma^0 = -\gamma^i, \tag{7.43}$$

beziehungsweise

$$S^{-1}(P)\gamma S(P) = P\gamma. \tag{7.44}$$

Später benötigen wir noch die adjungierte $S^\dagger$ der Spinortransformation S. Es gilt

$$\gamma^0 S^\dagger \gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_0 \\ \sigma_0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^\dagger & 0 \\ 0 & A^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_0 \\ \sigma_0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^{-1} & 0 \\ 0 & A^\dagger \end{pmatrix} \tag{7.45}$$

was wie folgt geschrieben werden kann,

$$\gamma^0 S^\dagger \gamma^0 = S^{-1}. \tag{7.46}$$

Nach diesen Vorbereitungen können wir das Transformationsverhalten des Dirac konjugierten Spinors $\bar\psi = \psi^\dagger\gamma^0$ bestimmen. Im Gegensatz zum einspaltigen Spinor ψ sind $\psi^\dagger$ und $\bar\psi$ einreihige Objekte. Es gilt

$$\bar\psi'(x') = (S\psi(x))^\dagger\gamma^0 = \psi^\dagger S^\dagger\gamma^0 = \psi^\dagger\gamma^0 S^{-1} = \bar\psi S^{-1}, \tag{7.47}$$

wobei wir (7.46) benutzten. Also gelten die Transformationsformeln

$$\psi'(x') = S(A)\psi(x) \quad \text{und} \quad \bar\psi'(x') = \bar\psi(x) S^{-1}(A) \tag{7.48}$$

für einen Dirac-Spinor und den Dirac-konjugierten Spinor.

Einführung von γ_5: In allen geraden Dimensionen existiert eine Matrix γ_5, welche mit allen γ^μ antikommutiert. In 4 Dimensionen wählen wir $\gamma_5 = \mathrm{i}\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$ und diese Matrix hat in der chiralen Darstellung folgende Form

$$\gamma_5 = \sigma_3 \otimes \sigma_0 = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sigma_0 \end{pmatrix} \quad , \quad \{\gamma_5, \gamma^\mu\} = 0. \tag{7.49}$$

Insbesondere gelten

$$\gamma_5^\dagger = \gamma_5 \quad , \quad (\gamma_5)^2 = \mathbb{1} \quad \text{und} \quad S^{-1}(P)\gamma_5 S(P) = -\gamma_5. \tag{7.50}$$

Es folgt dann, dass

$$P_+ = \frac{1}{2}(1+\gamma_5) \quad \text{und} \quad P_- = \frac{1}{2}(1-\gamma_5) \quad \text{mit} \quad P_+ + P_- = \mathbb{1} \tag{7.51}$$

orthogonale Projektoren sind,

$$P_\pm^2 = P_\pm \quad , \quad P_\pm^\dagger = P_\pm \quad \text{und} \quad P_+P_- = P_-P_+ = 0. \tag{7.52}$$

Aus der expliziten Form von γ_5 in der HE-Darstellung (7.49), sieht man sofort, dass

$$P_+\psi = \begin{pmatrix} \phi \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad P_-\psi = \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix} \tag{7.53}$$

gelten, oder das P_+ und P_- auf das 2-Spinorfeld respektive 2-Antispinorfeld projizieren.

7.3.2 Bilineare (Pseudo)Tensorfelder

Wir betrachten als Beispiel das 4-komponentige Feld $j^\mu = \bar\psi\gamma^\mu\psi$, welches bilinear im Spinorfeld ψ ist. Dieses Objekt transformiert unter Lorentz-Transformation gemäß

$$j'^\mu(x') = \bar\psi'(x')\gamma^\mu\psi'(x') = \bar\psi(x)S^{-1}(A)\gamma^\mu S(A)\psi(x). \tag{7.54}$$

Wegen (7.42) erhalten wir also

$$j'^\mu(x') = \Lambda^\mu_{\ \nu} j^\nu(x) \tag{7.55}$$

und j^μ transformiert unter eigentlichen Lorentz-Transformationen wie ein Vektorfeld. Unter Raumspiegelungen transformiert es wie

$$j'^\mu(x') = \bar\psi(x)S^{-1}(P)\gamma^\mu S(P)\psi(x) = (Pj)^\mu(x). \tag{7.56}$$

Also ist $j^\mu(x)$ ein Vektorfeld unter $L^\uparrow$. Analog beweist man, dass die folgenden 16 Felder (Pseudo)Tensoren sind:

$$\begin{aligned}
S(x) &= \bar\psi(x)\psi(x) \text{ Skalarfeld 1}\\
j^\mu(x) &= \bar\psi(x)\gamma^\mu\psi(x) \text{ Vektorfeld (Strom) 4}\\
T^{\mu\nu}(x) &= \bar\psi(x)[\gamma^\mu,\gamma^\nu]\psi(x) \text{ antisymm. Tensorfeld 6}\\
A^\mu(x) &= \bar\psi(x)\gamma_5\gamma^\mu\psi(x) \text{ Pseudovektorfeld (Axialstrom) 4}\\
P(x) &= \bar\psi(x)\gamma_5\psi(x) \text{ Pseudoskalarfeld 1}
\end{aligned}$$

Zum Beispiel transformiert das Tensorfeld unter Lorentz-Transformationen gemäß

$$T'^{\mu\nu}(x') = \Lambda^\mu{}_\alpha \Lambda^\nu{}_\beta T^{\alpha\beta}(x). \tag{7.57}$$

Dies sind alle Tensoren die bilinear im Elektronenfeld ψ sind! Sie treten in der elektroschwachen und/oder starken Wechselwirkung als Ströme, Axialströme, chirale Kondensate oder Energie-Impulstensoren auf.

7.3.3 Ebene Wellen

Der Zustand eines freien Teilchens mit einem bestimmten Impuls und einer bestimmten Energie wird durch eine ebene Welle der Form

$$\psi_p = \frac{1}{\sqrt{2\omega(\boldsymbol{k})}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} u_p \tag{7.58}$$

beschrieben. Der Index p bezeichnet den 4−er Impuls $p = \hbar k$ und

$$\frac{1}{c}\omega(\boldsymbol{k}) = +\sqrt{\boldsymbol{k}^2 + \mu^2} \tag{7.59}$$

ist die Kreisfrequenz der Lösung. Das Spinorfeld $\psi_p(x)$ löst die freie Dirac-Gleichung falls der konstante Spinor u_p der algebraischen Gleichung

$$(\not{k} - \mu)u_p = 0 \tag{7.60}$$

genügt. Für $p_0 c = \hbar\omega$ beschreibt ψ_p eine Lösung mit positiver Energie und für $p_0 c = -\hbar\omega$ mit negativer Energie. Wir normieren die konstanten Spinoren nach der invarianten Vorschrift

$$\bar{u}_p u_p = 2\mu\ \mathrm{sign}(p_0). \tag{7.61}$$

Die Multiplikation von (7.60) mit $\bar{u}_p$ ergibt

$$\bar{u}_p \not{k} u_p = \mu \bar{u}_p u_p = 2\mu^2 = 2k^2, \quad \text{so dass} \quad \bar{u}_p \gamma^\mu u = 2k^\mu \tag{7.62}$$

gilt. Der 4-Vektor für die Stromdichte ist

$$j^\mu = \bar{\psi}_p \gamma^\mu \psi_p = \frac{1}{2\omega}\bar{u}_p \gamma^\mu u_p = \frac{k^\mu}{\omega}. \tag{7.63}$$

Für eine Lösung mit positiver Energie ist $j = (1, \boldsymbol{v})$ wenn $\boldsymbol{v}$ die Teilchengeschwindigkeit ist. Demnach sind die Funktionen ψ_p auf „ein Teilchen im Volumen $V = 1$„ normiert.

7.4 Ankopplung ans elektromagnetische Feld

Die Kopplung von geladenen spin-$\frac{1}{2}$ Teilchen mit Ladung e an das elektromagnetische Feld, beschrieben durch das 4-er Potential $A_\mu = (\phi, -\boldsymbol{A})$, ergibt sich durch Ersetzen der gewöhnlichen durch die kovariante Ableitung

$$\partial_\mu \longrightarrow D_\mu = \partial_\mu + \frac{\mathrm{i}e}{\hbar c} A_\mu, \tag{7.64}$$

so dass in Anwesenheit von elektromagnetischen Felder die Dirac-Gleichung folgenderma-ßen aussieht:

$$\left(i\not{D} - \mu\right)\psi = 0 \quad , \quad \not{D} = \gamma^\mu D_\mu. \tag{7.65}$$

Wie wir früher gesehen haben, transformiert die kovariante Ableitung, und damit der Diracoperator $\not{D}$, kovariant unter Eichtransformationen

$$\not{D}_{A'} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}e\lambda/\hbar c} \not{D}_A \mathrm{e}^{-\mathrm{i}e\lambda/\hbar c}, \quad \text{wobei} \quad A'_\mu = A_\mu - \partial_\mu \lambda \tag{7.66}$$

ist. Falls also ψ die Dirac-Gleichung im Potential A löst, so löst $\psi' = \mathrm{e}^{\mathrm{i}e\lambda/\hbar c}\psi$ die Dirac-Gleichung im eichtransformierten Potential A'. Offensichtlich ist die lokale Feldtransformation

$$(A, \psi) \longrightarrow (A', \psi') \tag{7.67}$$

die Eichsymmetrie der Dirac-Gleichung.

Nach dem Theorem von Emmy Noether gehört zu dieser $U(1)$-Symmetrie ein erhaltener Strom. Im vorliegenden Fall ist dies der Strom

$$j^\mu(x) = \bar{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x) \quad , \quad \partial_\mu j^\mu = 0. \tag{7.68}$$

Übungsaufgabe: Man beweise explizit, unter Zuhilfenahme der Dirac-Gleichung und der daraus folgenden Dirac-Gleichung für den konjugierten Spinor,

$$\mathrm{i}\left(\partial_\mu - \frac{\mathrm{i}e}{\hbar c} A_\mu\right)\bar{\psi}\gamma^\mu + \mu\bar{\psi} = 0, \tag{7.69}$$

das die elektromagnetische Stromdichte erhalten ist.

7.5 Hamiltonscher Formalismus

Wir wollen die Dirac-Gleichung (7.65) in eine Hamiltonsche Form mit einem hermiteschen Hamilton-Operator bringen. Dazu multiplizieren wir die Gleichung mit γ^0, so dass folgt

$$\mathrm{i}D_0\psi = -\mathrm{i}\gamma^0\gamma^j D_j\psi + \frac{mc}{\hbar}\gamma^0\psi, \tag{7.70}$$

oder durch Auflösung nach der Zeitableitung

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi \quad , \quad H = c\big(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\pi}\big) + mc^2\beta + eA_0, \tag{7.71}$$

wobei wir die Matrizen

$$\alpha_k = \gamma^0\gamma^k \quad \text{und} \quad \beta = \gamma^0 \tag{7.72}$$

definiert haben. Weiterhin ist $\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}$ mit $\boldsymbol{A} = -(A_i)$ der früher eingeführte kinetische Impuls Operator. Die α und β Matrizen spielen eine wichtige Rolle in der Hamiltonschen Formulierung der Dirac-Theorie und wir wollen deshalb ihre Eigenschaften besprechen. Dazu notieren wir zuerst, dass in der chiralen Darstellung $\gamma^{0\dagger} = \gamma^0$ und $\gamma^{j\dagger} = -\gamma^j$ ist, so dass

$$\gamma^0\gamma^{0\dagger}\gamma^0 = \gamma^0 \quad , \quad \gamma^0\gamma^{j\dagger}\gamma^0 = \gamma^j \tag{7.73}$$

gelten und damit die γ-Matrizen die Realitätsbedingungen

$$\gamma^0\gamma^{\mu\dagger}\gamma^0 = \gamma^\mu \tag{7.74}$$

erfüllen. Diese Bedingungen gelten dann in jeder (unitär äquivalenten) Darstellung:

$$\tilde\gamma^\mu = U\gamma^\mu U^{-1} \longrightarrow \tilde\gamma^0\tilde\gamma^{\mu\dagger}\tilde\gamma^0 = U\gamma^0U^{-1}U^{\dagger-1}\gamma^{\mu\dagger}U^\dagger U\gamma^0U^{-1}U\gamma^\mu U^{-1} = \tilde\gamma^\mu. \tag{7.75}$$

Wegen der Realitätseigenschaften (7.74) gilt

$$\beta^\dagger = \beta \quad , \quad \alpha_j^\dagger = \gamma^{j\dagger}\gamma^0 = \gamma^0\underbrace{\gamma^0\gamma^{j\dagger}\gamma^0}_{\gamma^j} = \alpha_j \tag{7.76}$$

und die Matrizen α_j und β sind hermitesch. Damit ist der Hamilton-Operator H in (7.71) (formal) selbstadjungiert

$$H = H^\dagger. \tag{7.77}$$

Unter Benutzung der Dirac-Algebra beweist man leicht die folgenden Antikommuationsregeln

$$\{\beta, \alpha_j\} = 0 \quad , \quad \{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{ij} \quad \text{und} \quad \{\beta, \beta\} = 2. \tag{7.78}$$

Die zweite Identität beweist man zum Beispiel folgendermaßen:

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = \gamma^0\gamma^i\gamma^0\gamma^j + \gamma^0\gamma^j\gamma^0\gamma^i = -(\gamma^0)^2\{\gamma^i, \gamma^j\} = 2\delta_{ij}\mathbb{1}. \tag{7.79}$$

Definieren wir $\alpha_4 = \beta$, so lassen sich die Realitätseigenschaften und Antikommutatoren folgendermaßen zusammenfassen:

$$\alpha_\mu^\dagger = \alpha_\mu \quad \text{und} \quad \{\alpha_\mu, \alpha_\nu\} = 2\delta_{\mu\nu}. \tag{7.80}$$

7.5.1 Lösungen der kräftefreien Dirac-Gleichung

Hier wollen wir die Energien und Eigenfunktionen des freien Dirac-Hamilton-Operators diskutieren:

$$H\psi = E\psi \quad , \quad H = c(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{p}\,) + mc^2\beta \equiv \alpha_\mu\xi_\mu, \tag{7.81}$$

wobei wir $(\xi_\mu) = (cp_1, cp_2, cp_3, mc^2)^T$ eingeführt haben. Mit

$$(\alpha_\mu\xi_\mu)^2 = \xi_\mu\xi_\nu\alpha_\mu\alpha_\nu = \frac{1}{2}\xi_\mu\xi_\nu\{\alpha_\mu, \alpha_\nu\} = \sum \xi_\mu^2 \tag{7.82}$$

finden wir

$$(H + E)(H - E)\psi = (\xi_\mu\xi_\mu - E^2)\psi = (c^2\boldsymbol{p}^2 + m^2c^4 - E^2)\psi = 0. \tag{7.83}$$

Da die Impulse mit dem freien Hamilton-Operator vertauschen, können wir annehmen, dass diese feste Werte haben (uneigentliche Wellenfunktionen). Die Energien sind dann

$$E = \pm c\sqrt{m^2c^2 + \boldsymbol{p}^2} = \pm\hbar\omega(\boldsymbol{p}), \tag{7.84}$$

wobei $\omega(\boldsymbol{p}) > 0$ die zu $\boldsymbol{p}$ gehörende Kreisfrequenz des Teilchens ist. Beide Energien, $\hbar\omega$ und $-\hbar\omega$ kommen vor. Dies sind die beiden einzigen Eigenwerte von H (zu gegebenen Impuls) und beide sind jeweils 2-fach entartet.

H^2 ist diagonal im Spinraum, $H^2 = c^2\boldsymbol{p}^2 + m^2c^4$, und damit leicht zu diagonalisieren. Seine Eigenfunktionen sind ebene Wellen multipliziert mit einem konstanten 4-Spinor. Wir wollen nun die komplizierteren stationären Eigenzustände von H (und nicht nur von H^2) konstruieren. Dazu führen wir die Projektoren auf die Unterräume mit positiver und negativer Energie ein:

$$P_\pm^\omega = \frac{1}{2\hbar\omega}\left(\hbar\omega \pm H\right) = (P_\pm^\omega)^\dagger. \tag{7.85}$$

Aus $H^2\psi = E^2\psi$ mit $E = \pm\hbar\omega$ folgt unmittelbar

$$HP_\pm^\omega\psi = \frac{1}{2\hbar\omega}H\left(\hbar\omega \pm H\right)\psi = \frac{1}{2}\big(H \pm \hbar\omega\big)\psi = \pm\frac{1}{2}\left(\hbar\omega \pm H\right)\psi = \pm\hbar\omega P_\pm^\omega\psi \tag{7.86}$$

und deshalb projizieren $P_\pm^\omega$ auf die Unterräume mit positiver/negativer Energie. Wegen

$$P_+^\omega + P_-^\omega = \mathbb{1} \quad \text{und} \quad P_+^\omega P_-^\omega = P_-^\omega P_+^\omega = 0 \tag{7.87}$$

sind die $P_\pm^\omega$ orthogonale Projektoren. In der Dirac(Standard) Darstellung gilt

$$\gamma^0 = \beta = \begin{pmatrix}\sigma_0 & 0\\ 0 & -\sigma_0\end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \gamma^j = \begin{pmatrix}0 & \sigma_j\\ -\sigma_j & 0\end{pmatrix}, \tag{7.88}$$

so dass $\alpha_j = \sigma_1 \otimes \sigma_j$ gilt. Deshalb haben diese orthogonalen Projektoren in dieser Darstellung die explizite Form

$$P_\pm^\omega = \frac{1}{2\hbar\omega}\begin{pmatrix}(\hbar\omega \pm mc^2)\sigma_0 & \pm c\,(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{p})\\ \pm c\,(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{p}) & (\hbar\omega \mp mc^2)\sigma_0\end{pmatrix}. \tag{7.89}$$

Für ein Teilchen in Ruhe ist $\boldsymbol{p} = 0$ und $\hbar\omega_0 = mc^2$. Dann projizieren $P_\pm$ auf die unteren und oberen Komponenten eines Spinors,

$$P_+^{\omega_0} = \begin{pmatrix}\sigma_0 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix} \quad \text{und} \quad P_-^{\omega_0} = \begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & \sigma_0\end{pmatrix}. \tag{7.90}$$

Also wird in der Dirac-Darstellung ein ruhendes Teilchen mit positiver Energie durch eine konstanten Spinor mit oberen Komponenten beschrieben und „ein Teilchen mit negativer Energie“ durch einen konstanten Spinor mit unteren Komponenten.

7.6 Ladungskonjugation

Im Folgenden wählen wir oft (es sei denn, wir diskutieren den nichtrelativistischen, ultrarelativistischen oder semiklassischen Grenzfall) Einheiten, für welche

$$\hbar = c = 1 \tag{7.91}$$

ist. Diese Wahl ist in der Hochenergiephysik üblich. Die korrekten Potenzen von $\hbar$ und c im Endresultat können über eine Dimensionsanalysis wieder eindeutig reproduziert werden. In diesen genehmen Einheiten werden alle Felder, Massen und Ladungen in Potenzen einer Länge L gemessen:

$$\begin{aligned}
\text{Masse:}\quad & \left[\frac{mc}{\hbar}\right] = [m] = L^{-1} \\
\text{Ladung:}\quad & \left[\frac{\mathrm{e}^2}{\hbar c}\right] = [e^2] = L^0 \\
\text{Potential:}\quad & \left[\frac{e}{\hbar c}A_\mu\right] = [A_\mu] = L^{-1} \Rightarrow [E] = [B] = L^{-2} \\
\text{Spinor:}\quad & [Q] = L^0 \Rightarrow [j^\mu] = [\bar\psi\gamma^\mu\psi] = L^{-3} \Rightarrow [\psi] = L^{-3/2}.
\end{aligned}$$

Nun wollen wir die Ladungskonjugation zuerst in einer Majorana-Darstellung, in welcher alle γ-Matrizen imaginär sind,

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \sigma_2 & 0 \\ 0 & \sigma_2 \end{pmatrix},\ \gamma^1 = \begin{pmatrix} \mathrm{i}\sigma_3 & 0 \\ 0 & \mathrm{i}\sigma_3 \end{pmatrix},\ \gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i}\sigma_1 \\ \mathrm{i}\sigma_1 & 0 \end{pmatrix},\ \gamma^3 = \begin{pmatrix} \mathrm{i}\sigma_1 & 0 \\ 0 & -\mathrm{i}\sigma_1 \end{pmatrix} \tag{7.92}$$

und in der

$$\gamma_5 = \mathrm{i}\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i}\sigma_1 \\ \mathrm{i}\sigma_1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{7.93}$$

ist, diskutieren.

Sei nun $\psi^* = \psi^{\dagger t}$ der zu ψ komplex konjugierte Komplex konjugieren wir die Dirac-Gleichung in der Majorana-Darstellung,

$$\left(\mathrm{i}\gamma^\mu(\partial_\mu + \mathrm{i}eA_\mu) - m\right)\psi = 0 \xrightarrow{c.c.} \left(\mathrm{i}\gamma^\mu(\partial_\mu - \mathrm{i}eA_\mu) - m\right)\psi^* = 0 \tag{7.94}$$

so sehen wir, dass ψ^* eine Lösung der Dirac-Gleichung mit umgekehrter Ladung ist, $e \longrightarrow -e$. Mit Hilfe von

$$\bar\psi = \psi^\dagger\gamma^0 \Longrightarrow \psi^\dagger = \bar\psi\gamma^0 \quad \text{und} \quad \psi^* = \gamma^{0T}\bar\psi^T = -\gamma^0\bar\psi^T \tag{7.95}$$

können wir die Ladungskonjugation eines Spinors folgendermaßen schreiben

$$\psi_c = -\mathrm{i}\psi^* = C\bar\psi^T, \tag{7.96}$$

wobei in der Majorana-Darstellung $C = \mathrm{i}\gamma^0$ ist. In dieser Darstellung gilt offensichtlich

$$CC^\dagger = \mathbb{1} \quad \text{und damit} \quad C^{-1} = C^\dagger, \quad C^T = -C^T. \tag{7.97}$$

In jeder unitär äquivalenten Darstellung,

$$\psi \to \tilde{\psi} = U\psi \quad , \quad \tilde{\gamma}^\mu = U\gamma^\mu U^{-1} \tag{7.98}$$

soll dann entsprechend gelten

$$\tilde{\psi}_c = \tilde{C}\bar{\tilde{\psi}}^T. \tag{7.99}$$

Dies ist äquivalent zu

$$U\psi_c = \tilde{C}(U^{-1})^T\bar{\psi}^T \quad \text{oder auch zu} \quad \psi_c = U^{-1}\tilde{C}(U^{-1})^T\bar{\psi}^T = C\bar{\psi}^T. \tag{7.100}$$

Die letzte Gleichung impliziert, dass in der neuen Darstellung die C-Matrix folgende Form hat

$$\tilde{C} = UCU^T. \tag{7.101}$$

Nun folgt unmittelbar, dass die Eigenschaften (7.97) auch für die getildete C-Matrix gelten und daher darstellungsunabhängig sind. Wie man in der Majorana-Darstellung leicht nachrechnet, ist weiterhin

$$C^{-1}\gamma^\mu C = -(\gamma^\mu)^T, \tag{7.102}$$

und wiederum gilt diese Beziehung in jeder Darstellung.

Durch die Ladungskonjugation (7.96) geht eine Lösung für ein Elektron zu negativer (positiver) Energie, $\psi \sim \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et}$, in eine Lösung für ein Positron (da $e \to -e$) zu positiver (negativer) Energie über. Daraus folgt insbesondere, das $H(e)$ nach unten unbeschränkt ist, da $H(-e)$ sicher nach oben unbeschränkt ist. Dies ist die Schwierigkeit mit den negative Energielösungen, welche wir schon bei der Lösung der Klein-Gordon-Gleichung hatten. Genauso wie für skalare Felder wird dieses Problem durch die Uminterpretation der Lösungen negativer Energie umgangen.

7.7 Nichtrelativistische Näherung

Die Dirac-Darstellung (7.88) ist besonders geeignet zur Untersuchung des nichtrelativistischen Grenzfalls der Dirac-Gleichung in der Hamiltonschen Form (7.71). Für ein langsames Teilchen ist die Energie bis auf kleine Korrekturen die Ruheenergie mc^2 und deshalb ist es angebracht den schnell oszillierenden Faktor $e^{-iEt} \sim e^{-imc^2t}$ abzuspalten,

$$\psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} e^{-imc^2t}. \tag{7.103}$$

In der Dirac-Darstellung lautet der Hamilton-Operator

$$H = \begin{pmatrix} (mc^2 + eA_0)\sigma_0 & c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi} \\ c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi} & (-mc^2 + eA_0)\sigma_0 \end{pmatrix} \tag{7.104}$$

und wir erhalten die gekoppelten Wellengleichungen

$$\begin{aligned} (i\partial_t - eA_0)\phi &= c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}\chi \\ (i\partial_t - eA_0 + 2mc^2)\chi &= c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}\phi. \end{aligned} \tag{7.105}$$

Speziell für $\boldsymbol{p} = 0$ und $A_\mu = 0$ ist $\chi = 0$ und $\phi =$ konstant die Lösung mit positiver Energie. Für kleine Impulse und Felder verglichen mit c wird also χ/ϕ relativ klein sein. In einer Entwicklung nach $1/c$ muss man in 1.Näherung links in der zweiten Gleichung in (7.105) nur den letzten Term mitnehmen, d.h.

$$\chi = \frac{1}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}\phi \quad , \quad \boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}. \tag{7.106}$$

Eingesetzt in die erste Gleichung finden wir dann

$$(i\partial_t - eA_0)\phi = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})^2\phi. \tag{7.107}$$

Mit der Identitäten

$$\sigma_i\sigma_j\pi_i\pi_j = \boldsymbol{\pi}^2 + \frac{i}{2}\epsilon_{ijk}[\pi_i,\pi_j]\sigma_k \quad \text{und} \quad [\pi_i,\pi_j] = ie\epsilon_{ijk}B_k \tag{7.108}$$

finden wir schlussendlich

$$i\hbar\partial_t\phi = H^{(1)}\phi \quad , \quad H^{(1)} = \frac{1}{2m}\boldsymbol{\pi}^2 + eA_0 - \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}. \tag{7.109}$$

Wir erhalten also den nichtrelativistischen Pauli-Hamilton-Operator mit der korrekten Kopplung an das Magnetfeld. Das magnetische Moment des Elektrons ist

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma} = \frac{e}{mc}\boldsymbol{S} \quad , \quad \boldsymbol{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}. \tag{7.110}$$

Der Diracsche Wert $g = 2$ für den gyromagnetische Faktor ist in guter Übereinstimmung mit dem Experiment, $g_{\text{exp}} - 2 \sim \alpha/\pi \sim 2.32 \times 10^{-3}$. Die Abweichung von 2 wird von der Quantenfeldtheorie für Elektronen und Photonen, der QED, erklärt.

Um Korrekturen höherer Ordnung in $1/c$ zu berechnen, lohnt es sich, ein systematische Methode zu entwickeln. Diese wird durch die Foldy-Wouthuysen-Transformation geliefert.

7.7.1 Die Foldy-Wouthuysen Transformation

Für $\boldsymbol{p} = 0$ und $A_\mu = 0$ ist

$$H = \begin{pmatrix} mc^2\sigma_0 & 0 \\ 0 & -mc^2\sigma_0 \end{pmatrix}, \tag{7.111}$$

und hat zwei Arten von Eigenvektoren:

$$E > 0: \quad \begin{pmatrix} * \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad E < 0: \quad \begin{pmatrix} 0 \\ * \end{pmatrix}, \tag{7.112}$$

wobei $*$ für einen beliebigen 2-komponentigen Spaltenvektor und 0 für den 2-komponentigen Nullvektor stehen. Für von Null verschiedenen Impulse und Eichpotentiale sind die „kleinen“ und „großen“ Komponenten des Diracspinors gekoppelt. Ziel der FW-Transformation ist es, die kleinen und großen Komponenten vermittels einer unitären Transformation

$$\psi' = \mathrm{e}^S\psi, \qquad S^\dagger = -S \tag{7.113}$$

zu entkoppeln, d.h. der transformierte Hamilton-Operator soll die Form

$$H' = \begin{pmatrix} H'_+ & 0 \\ 0 & H'_- \end{pmatrix}, \tag{7.114}$$

haben, wenigstens in einer Entwicklung nach $\boldsymbol{p}/mc$. Dazu führen wir zwei Klassen von Operatoren ein:

Definition: Ein Operator $\mathcal{E}$ bzw. $\mathcal{O}$ heisst gerade bzw. ungerade, falls er folgende Form hat

$$\mathcal{E} = \begin{pmatrix} * & 0 \\ 0 & * \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad \mathcal{O} = \begin{pmatrix} 0 & * \\ * & 0 \end{pmatrix}. \tag{7.115}$$

In der Diracdarstellung ist $\beta = \sigma_3 \otimes \sigma_0$, so dass

$$\left[\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \beta\right] = 2\begin{pmatrix} 0 & -b \\ c & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \left\{\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \beta\right\} = 2\begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & -d \end{pmatrix} \tag{7.116}$$

gilt. Deshalb kann man die geraden und ungeraden Operatoren auch durch

$$[\beta, \mathcal{E}] = 0 \quad \text{und} \quad \{\beta, \} = 0 \tag{7.117}$$

charakterisieren. Jeder Operator ist eindeutig eine Summe eines geraden und eines ungeraden Operators, e.g.

$$H = mc^2\beta + \mathcal{E} + \mathcal{O}, \quad \text{mit} \quad \mathcal{E} = eA_0, \quad \mathcal{O} = c(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\pi}). \tag{7.118}$$

Als nächstes studieren wir die Transformation von H unter (7.113). Aus

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\psi = H\psi \quad \text{und} \quad \psi' = \mathrm{e}^S\psi \tag{7.119}$$

folgt unmittelbar

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\psi' = \mathrm{i}\hbar(\mathrm{e}^S)_{,t}\,\psi + \mathrm{i}\hbar\mathrm{e}^S\partial_t\psi = \mathrm{i}\hbar(\mathrm{e}^S)_{,t}\,\mathrm{e}^{-S}\psi' + \mathrm{e}^S H\mathrm{e}^{-S}\psi' \tag{7.120}$$

und damit lautet der transformierte Hamilton-Operator

$$H' = \mathrm{e}^S H\mathrm{e}^{-S} + \mathrm{i}\hbar(\mathrm{e}^S)_{,t}\,\mathrm{e}^{-S}. \tag{7.121}$$

Für verschwindende Impulse und elektromagnetische Potentiale ist $S = 0$. Wir erwarten also, dass S für kleine Impulse und Potentiale „klein“ sein wird und entwickeln deshalb (7.121) in Potenzen von S. Der erste Term hat die Entwicklung

$$\mathrm{e}^S H\mathrm{e}^{-S} = H + [S, H] + \frac{1}{2}[S,[S,H]] + \cdots = \sum_0^\infty \frac{1}{k!}\big(\mathrm{ad}S\big)^k H, \tag{7.122}$$

wobei $\mathrm{ad}S$ die lineare Abbildung $(\mathrm{ad}S)H = [S, H]$ bezeichnet. Den zweiten Term in (7.121) gewinnt man, indem man

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\left((\mathrm{e}^{\lambda S})_{,t}\,\mathrm{e}^{-\lambda S}\right) = \left(\mathrm{e}^{\lambda S}S\right)_{,t}\mathrm{e}^{-\lambda S} - \left(\mathrm{e}^{\lambda S}\right)_{,t}S\mathrm{e}^{-\lambda S} = \mathrm{e}^{\lambda S}S_{,t}\,\mathrm{e}^{-\lambda S} = \sum_0^\infty \frac{\lambda^k}{k}(\mathrm{ad}S)^k S_{,t}\,, \tag{7.123}$$

bezüglich λ von 0 bis 1 integriert,

$$\left(\mathrm{e}^S\right)_{,t}\mathrm{e}^{-S} = \sum_0^\infty \frac{1}{(k+1)!}(\mathrm{ad}S)^k S_{,t}\,. \tag{7.124}$$

Damit finden wir schlussendlich

$$\begin{aligned} H' = H + &\left([S,H] + \frac{1}{2!}[S,[S,H]] + \frac{1}{3!}[S,[S,[S,H]]] + \dots\right) \\ &+ \mathrm{i}\hbar\left(S_{,t} + \frac{1}{2!}[S,S_{,t}] + \frac{1}{3!}[S,[S,S_{,t}]] + \dots\right) \end{aligned} \tag{7.125}$$

Wir wenden dies auf den Dirac-Hamilton-Operator (7.118) an. Wir wählen S so, dass der führende Term in einer Entwicklung nach $1/c$ des ungeraden Operators $\mathcal{O}$ in (7.118) verschwindet. Um dieses S zu finden, betrachten wir nur die führenden Terme $[S,H]+\mathrm{i}\hbar S_{,t}$ in der Transformation (7.125). Da S zeitunabhängig gewählt werden kann, ist

$$H' \sim mc^2\beta + \mathcal{E} + \mathcal{O} + [S, mc^2\beta], \tag{7.126}$$

wobei wir nur den führenden Term von $[S,H]$ in einer Entwicklung nach $1/c$ berücksichtigt haben. Nun müssen wir S so bestimmen, dass $[S, mc^2\beta] = -\mathcal{O}$ ist. Das gesuchte S lautet

$$S = \frac{1}{2mc^2}\beta\cdot\mathcal{O}, \tag{7.127}$$

wie man problemlos beweist:

$$[S, mc^2\beta] = \frac{1}{2}[\beta\mathcal{O},\beta] = \frac{1}{2}\beta[\mathcal{O},\beta] = -\beta^2\mathcal{O} = -\mathcal{O}. \tag{7.128}$$

In der zweitletzten Gleichung benutzten wir, dass ein ungerader Operator mit β antivertauscht. Das so bestimmte S benutzen wir nun in (7.118) und berechnen H' bis zur gewünschten Ordnung in $1/c$. Der transformierte Hamilton-Operator hat die Form

$$H' = mc^2\beta + \mathcal{E}' + \mathcal{O}', \tag{7.129}$$

wobei aber $\mathcal{O}'$ noch nicht von der gewünschten Ordnung in $1/c$ ist. Deshalb wird dieser Schritt iteriert:

$$\psi'' = \mathrm{e}^{S'}\psi' \quad \text{und} \quad H'' = H' + [S', H'] + \dots\,, \tag{7.130}$$

wobei S' so gewählt wird, dass $[S', mc^2\beta] = -\mathcal{O}'$ ist, d.h.

$$S' = \frac{1}{2mc^2}\beta\mathcal{O}'. \tag{7.131}$$

Damit wird

$$H'' = mc^2\beta + \mathcal{E}'' + \mathcal{O}''. \tag{7.132}$$

Nach nochmaliger Iteration findet man dann den bis zur Ordnung $1/c^2$ entkoppelten Hamilton-Operator

$$\begin{aligned} H''' = \beta &\left(mc^2 + \frac{1}{2m}\boldsymbol{\pi}^2 - \frac{1}{8m^3c^2}(\boldsymbol{\pi}^2)^2 + \dots \right) + eA_0 \\ &- \frac{e\hbar}{2mc}\left(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{B}\right)\beta \\ &- \frac{\mathrm{i}e\hbar}{8m^2c^3}\left(\boldsymbol{\sigma},\nabla\times\boldsymbol{E}\right) - \frac{e\hbar}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{p}) \\ &- \frac{\mathrm{e}^2\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla\cdot\boldsymbol{E} + \cdots \end{aligned} \tag{7.133}$$

7.7.2 Interpretation der Terme

Wir werden nun die Terme in (7.133) mit bereits bekannten Termen vergleichen. Wegen

$$c\sqrt{m^2c^2 + \boldsymbol{\pi}^2} + eA_0 \sim mc^2\left(1 + \frac{1}{2m^2c^2}\boldsymbol{\pi}^2 - \frac{1}{8m^4c^4}(\boldsymbol{\pi}^2)^2 \dots\right) + eA_0 \tag{7.134}$$

ist die erste Zeile in (7.133) die semirelativistische Entwicklung der kinetischen Energie eines Teilchens. Die zweite Zeile in (7.133) ist die bekannte Kopplung des magnetischen Moments an das Magnetfeld mit $g = 2$. Zur Interpretation der dritten Zeile wollen wir eine statisches Feld annehmen, $\nabla\times\boldsymbol{E} = 0$, so dass $\boldsymbol{E} = -\nabla\phi$ gilt und weiterhin, dass ϕ nur von r abhängt, $\nabla\phi = \phi_{,r}\,\boldsymbol{x}/r$. Dann vereinfacht sich die dritte Zeile in (7.133) zu

$$\frac{e\hbar}{4m^2c^2}\left(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p}\right)\frac{\phi_{,r}}{r} = \frac{e}{2m^2c^2}(\boldsymbol{S},\boldsymbol{L})\frac{\phi_{,r}}{r} \tag{7.135}$$

und führt zu einer Kopplung des Spins mit dem Drehimpuls. Beachte, dass in dieser *Spin-Bahn-Kopplung* $\hbar$ nicht vorkommt. Dieser klassische Beitrag zu H ist der sogenannte *Thomas-Term* . Seine klassische Erklärung ist, dass im Ruhesystem des Elektrons das elektromagnetische Feld einen magnetischen Anteil hat (im Laborsystem gibt es nur ein elektrisches Feld) und dieses $\boldsymbol{B}$-Feld wechselwirkt mit dem Spin des Elektrons. Der letzte Term in (7.133) ist der sogenannte *Darwin-Term*. Er ist nur innerhalb der Quellen für das äußere Feld von Null verschieden.

7.8 Drehimpuls und kleine Lorentz-Transformationen

Wir wollen untersuchen, für welche äußeren Felder der Hamilton-Operator H drehinvariant ist. H ist drehinvariant falls er in jedem gedrehten Koordinatensystem gleich aussieht wie im ursprünglichen System. Wir müssen uns allerdings daran erinnern, dass unter einer Lorentz-Transformation ein Spinor gemäß

$$\psi(x) \longrightarrow \big(\Gamma(A)\psi\big)(x) = S(A)\psi(\Lambda^{-1}x), \qquad A \in SL(2,\mathbb{C}) \tag{7.136}$$

transformiert. Die auf Spinoren wirkende Operatoren transformieren dann unter Lorentz-Transformationen gemäß

$$H \longrightarrow \Gamma(A)H\Gamma^{-1}(A). \tag{7.137}$$

Deshalb ist ein Hamilton-Operator drehinvariant, falls

$$\Gamma(U)H\Gamma^{-1}(U) = H, \qquad U \in SU(2), \quad \Lambda(U) = \begin{pmatrix} 1 & \boldsymbol{0}^T \\ \boldsymbol{0} & R \end{pmatrix}, \tag{7.138}$$

gilt, wobei R eine eigentliche Drehung im Raum ist. Wegen $S^{-1}\gamma S = \Lambda\gamma$ ist β drehinvariant und $\boldsymbol{\alpha}$ ein Vektoroperator,

$$S(U)\beta S^{-1}(U) = \beta \quad \text{und} \quad S(U)\boldsymbol{\alpha}S^{-1}(U) = R^{-1}\boldsymbol{\alpha}. \tag{7.139}$$

Deshalb findet man für den Hamilton-Operator im gedrehten System ($\hbar = c = 1$)

$$\big(\Gamma(U)H\Gamma^{-1}(U)\,\psi\big)\,(t,\boldsymbol{x}) = \big\{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{p} - R\boldsymbol{A}(t,R^{-1}\boldsymbol{x})) + m\beta + eA_0(t,R^{-1}\boldsymbol{x})\big\}\psi(t,\boldsymbol{x}). \tag{7.140}$$

Wir schliessen, dass H drehinvariant ist für drehinvariante Eichpotentiale,

$$A_0(t,\boldsymbol{x}) = A_0(t,R^{-1}\boldsymbol{x}) \quad \text{und} \quad \boldsymbol{A}(t,\boldsymbol{x}) = R\boldsymbol{A}(t,R^{-1}\boldsymbol{x}). \tag{7.141}$$

Diese Bedingungen implizieren folgende Form des Eichpotentials

$$A_0 = A_0(t,r) \quad \text{und} \quad \boldsymbol{A} = \boldsymbol{x}f(t,r), \tag{7.142}$$

und daraus folgt unmittelbar, dass das magnetische Feld verschwindet und das elektrische Feld ein Zentralfeld ist, $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{x}\cdot g(t,r)$.

Wie wir früher argumentiert haben werden die Transformation der Wellenfunktion bei Drehungen durch den gesamten Drehimpuls erzeugt. Wie bei der Behandlung des Elektronenspin sei also

$$U(\theta,\boldsymbol{e})=\exp(-\mathrm{i}\theta\,\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{\sigma}/2)\in SU(2), \tag{7.143}$$

eine „Drehung“ um die Achse $\boldsymbol{e}$ mit Winkel θ. Dann transformieren Spinorfelder mit

$$\Gamma(\theta,\boldsymbol{e})\equiv\Gamma\left(U(\theta,\boldsymbol{e})\right)=\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\theta\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{J}\right). \tag{7.144}$$

In der chiralen Darstellung haben die den Drehungen zugeordneten Spintransformationen die Form

$$S(U)=\begin{pmatrix}U&0\\0&U\end{pmatrix}=\sigma_0\otimes U. \tag{7.145}$$

Für U wählen wir eine quantenmechanische „Drehung“ (7.143) um die Achse $\boldsymbol{e}$ mit Winkel θ. Die entsprechende Drehung im Raum hat dann die Form

$$R(\theta,\boldsymbol{e})=\exp(\theta\,\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{\Omega}). \tag{7.146}$$

Die Ableitung von

$$\big(\Gamma(\theta,\boldsymbol{e})\psi\big)(t,\boldsymbol{x})=\big(\sigma_0\otimes U(\theta,\boldsymbol{e})\big)\,\psi\big(t,R^{-1}(\theta,\boldsymbol{e})\,\boldsymbol{x}\big) \tag{7.147}$$

nach θ an der Stelle $\theta=0$ ergibt folgenden Gesamtdrehimpuls in der chiralen Darstellung,

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\frac{\hbar}{2}\sigma_0\otimes\boldsymbol{\sigma}. \tag{7.148}$$

Die Drehinvarianz (7.138) ist äquivalent zu

$$[H,\boldsymbol{J}\,]=0,\qquad \boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S},\quad \boldsymbol{S}=\frac{\hbar}{2}\sigma_0\otimes\boldsymbol{\sigma}. \tag{7.149}$$

Im Folgenden werden wir aber die Dirac-Darstellung benutzen, so dass wir uns als Nächstes überlegen, wie der Spin in einer beliebigen Darstellung aussieht. Dazu müssen wir $S(A)$ für beliebige Darstellungen der Dirac-Algebra konstruieren. Wir führen die 6 Matrizen

$$\Sigma^{\alpha\beta}=\frac{1}{4\mathrm{i}}\left[\gamma^\alpha,\gamma^\beta\right] \tag{7.150}$$

ein. Diese haben folgende Vertauschungsrelationen mit den γ-Matrizen und untereinander:

$$\left[\Sigma^{\alpha\beta},\gamma^\mu\right] = \mathrm{i}\left(g^{\alpha\mu}\gamma^\beta - g^{\beta\mu}\gamma^\alpha\right) \tag{7.151}$$
$$\left[\Sigma_{\alpha\beta},\Sigma_{\mu\nu}\right] = \mathrm{i}\left(g_{\alpha\mu}\Sigma_{\beta\nu} + g_{\beta\nu}\Sigma_{\alpha\mu} - g_{\alpha\nu}\Sigma_{\beta\mu} - g_{\beta\mu}\Sigma_{\alpha\nu}\right). \tag{7.152}$$

Es sei nun

$$\Gamma^\mu(\theta) = S^{-1}(\theta)\gamma^\mu S(\theta), \quad \text{wobei} \quad S(\theta) = \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{2}\theta\,\omega_{\alpha\beta}\Sigma^{\alpha\beta}\right), \quad \omega_{\alpha\beta} = -\omega_{\beta\alpha} \tag{7.153}$$

eine einparametrige Gruppe von Transformationen mit $S(0) = \mathbb{1}$. Unter Benutzung von (7.151) findet man die folgende einfache gewöhnliche Differentialgleichung für $S(\theta)$,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\Gamma^\mu(\theta) = \omega^\mu_{\ \nu}\Gamma^\nu(\theta), \tag{7.154}$$

welche mit $\Gamma^\mu(0) = \gamma^\mu$ folgende eindeutige Lösung hat,

$$\Gamma^\mu(\theta) = S^{-1}(\theta)\gamma^\mu S(\theta) = \Lambda(\theta)^\mu_{\ \nu}\gamma^\nu \qquad \Lambda(\theta) = \exp(\theta\omega), \quad \omega = (\omega^\mu_{\ \nu}). \tag{7.155}$$

Nun erinnern wir uns daran, dass die Erzeugenden der Lorentzgruppe nach herunterziehen eines Index die antisymmetrischen Matrizen $(\omega_{\mu\nu})$ sind. Deshalb ist $\Lambda(\theta)$ eine Lorentz-Transformation. Setzen wir noch $\theta = 1$ so erhalten wir

$$S^{-1}\gamma^\mu S = \Lambda^\mu_{\ \nu}\gamma^\nu \quad \text{mit} \quad S = \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{2}\omega_{\alpha\beta}\Sigma^{\alpha\beta}\right) \quad \text{und} \quad \Lambda = \exp(\omega). \tag{7.156}$$

Also ist S die gesuchte Verallgemeinerung von $S(A)$ in (7.40) für beliebige Darstellungen. Jeder Spintransformation S ist eine Lorentz-Transformation Λ gemäß (7.156) zugeordnet. Die Abbildung $S \to \Lambda(S)$ definiert eine Darstellung der „Spintransformationen“ als Lorentz-Transformationen. Nun leiten wir

$$(\Gamma(\theta)\psi)(x) = S(\theta)\psi\left(\Lambda^{-1}(\theta)x\right) \tag{7.157}$$

an der Stelle $\theta = 0$ ab und erhalten für die infinitesimalen Lorentz-Transformationen

$$\left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\right|_{\theta=0}\left(\Gamma(\theta)\psi\right)(x) = (\Gamma_*(\omega))\psi(x) = \frac{\mathrm{i}}{2}\omega_{\alpha\beta}\left(M^{\alpha\beta} + \Sigma^{\alpha\beta}\right)\psi(x), \tag{7.158}$$

wobei wir die Differentialoperatoren erster Ordnung,

$$M_{\alpha\beta} = \frac{1}{\mathrm{i}}\left(x_\alpha\partial_\beta - x_\beta\partial_\alpha\right), \tag{7.159}$$

einführten. Diese Operatoren $M_{\alpha\beta}$ erfüllen diesselben Vertauschungrelationen wie die $\Sigma_{\alpha\beta}$ in (7.152). Damit erfüllen die infinitesimalen Erzeugenden der Lorentzgruppe,

$$J_{\alpha\beta} = M_{\alpha\beta} + \Sigma_{\alpha\beta}, \tag{7.160}$$

ebenfalls die Vertauschungrelationen (7.152) der Lorentz-Algebra.

Die Drehimpulse sind die Erzeugenden der Raumdrehungen und als solche mit den räumlichen Komponenten J^{ij} von $J^{\mu\nu}$ verbunden. Wegen

$$\epsilon_{kij}M^{ij} = -\frac{2}{\hbar}L_k \quad \text{und} \quad \epsilon_{kij}\Sigma^{ij} = \frac{1}{2\mathrm{i}}\epsilon_{kij}\gamma^i\gamma^j \tag{7.161}$$

müssen wir den Spin eines Teilchens in $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$ folgendermaßen definieren:

$$S_k = -\frac{\hbar}{4\mathrm{i}}\,\epsilon_{kij}\gamma^i\gamma^j = -\frac{\hbar}{2}\,\epsilon_{kij}\Sigma^{ij}. \tag{7.162}$$

In der Dirac- und der chiralen Darstellung findet man für die Spinoperatoren,

$$\boldsymbol{S} = \frac{\hbar}{2}\sigma_0 \otimes \boldsymbol{\sigma} \tag{7.163}$$

und in der Majorana-Darstellung lauten sie

$$\boldsymbol{S} = \frac{\hbar}{2}\left\{-\sigma_2\otimes\sigma_0, -\sigma_3\otimes\sigma_2, \sigma_1\otimes\sigma_2\right\}. \tag{7.164}$$

7.9 Elektronen in elektromagnetischen Wellenfeldern

Die Diracsche Gleichung wurde 1928 publiziert [24] und sieben Jahre später veröffentlichte Volkov seine Lösung für die Bewegung von Elektronen in ebenen elektromagnetischen Wellen [25]. Diese Lösung taucht öfter in Arbeiten über Laseroptik auf und soll hier besprochen werden. Zur Vorbereitung untersuchen wir die aus der Diracgleichung abgeleitete zweite-Ordnungs-Gleichung. Sie ist ähnlich der Klein-Gordon-Gleichung, enthält aber einen zusätzlichen Pauli-Term.

7.9.1 Zweite Ordnungs-Gleichung

Für einige Anwendungen ist es nützlich, die Dirac-Gleichung in eine Differentialgleichung zweiter Ordnung in der Zeit umzuwandeln. Es sei ψ eine Lösung der Dirac-Gleichung

$$\left(\mathrm{i}\not{D} - \mu\right)\psi = 0, \tag{7.165}$$

wobei μ die inverse Compton-Wellenlänge des Elektrons bezeichnet. Wir multiplizieren mit $\not{D} + \mu$ und finden die zweite-Ordnungsgleichung

$$\left(\not{D}^2 + \mu^2\right)\psi = 0. \tag{7.166}$$

Um das Quadrat des Dirac-Operator auszurechnen benutzen wir die Dirac-Algebra (7.6), die Matrizen (7.150) und den Kommutator zweier kovarianter Ableitungen in (6.79),

$$\begin{aligned}\not{D}\not{D} &= \gamma^\mu\gamma^\nu D_\mu D_\nu = \frac{1}{2}\left(\{\gamma^\mu,\gamma^\nu\} + [\gamma^\mu,\gamma^\nu]\right) D_\mu D_\nu \\ &= g^{\mu\nu} D_\mu D_\nu + \frac{1}{4}[\gamma^\mu,\gamma^\nu][D_\mu, D_\nu] = D_\mu D^\mu - \frac{e}{\hbar c}\Sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}.\end{aligned}$$

Die führt auf die gesuchte Wellengleichung

$$\left(-D_\mu D^\mu + \frac{e}{\hbar c}F_{\mu\nu}\Sigma^{\mu\nu} - \mu^2\right)\psi = 0. \tag{7.167}$$

Es ist die Klein-Gordon-Gleichung mit einem zusätzlichen Term proportional zu $F_{\mu\nu}\Sigma^{\mu\nu}$, der die direkte Kopplung des elektromagnetischen Feldes an das magnetische und elektrische Moment des Teilchens beschreibt. Jede Lösung der Dirac-Gleichung ist eine Lösung von (7.167). Die Umkehrung ist nicht immer wahr. Für jede Lösung ψ von (7.167) ist aber $(\mathrm{i}\not{D} + \mu)\psi$ eine Lösung der Dirac-Gleichung.

7.9.2 Die Lösung von Volkov

Das elektromagnetische Potential einer ebenen Welle hängt von Raum und Zeit nur über die Kombination $\varphi = kx = k_\mu x^\mu$ ab,

$$\frac{e}{\hbar c}A_\mu = a_\mu(\varphi), \quad \text{mit} \quad \varphi = kx, \quad k^2 = 0. \tag{7.168}$$

Das Feld a^μ hat die Dimension 1/Länge. Wir wählen die kovariante Lorentzeichung

$$\frac{e}{\hbar c}\partial_\mu A^\mu = k_\mu a'^\mu = (k_\mu a^\mu)' = 0, \tag{7.169}$$

wobei der Strich die Ableitung nach dem Argument φ bezeichnet. Es folgt die Konstanz von $k_\mu a^\mu$. Wir dürfen die Konstante Null setzen, so dass

$$k_\mu a^\mu \equiv ka = 0 \tag{7.170}$$

gilt. Der Feldstärketensor hat die Gestalt

$$\frac{e}{\hbar c}F_{\mu\nu} = k_\mu a'_\nu - k_\nu a'_\mu. \tag{7.171}$$

Anstelle der Dirac-Gleichung betrachten wir die zweite-Ordnungs Gleichung (7.167). In der Lorentzeichung ist

$$D^\mu D_\mu = \Box + 2\mathrm{i}a\partial - a^2 \tag{7.172}$$

und wegen (7.171) und (7.170) gilt

$$\frac{e}{\hbar c}F_{\mu\nu}\Sigma^{\mu\nu} = \frac{1}{2\mathrm{i}}\left(\not{k}\not{a}' - \not{a}'\not{k}\right) = -\mathrm{i}\not{k}\not{a}', \tag{7.173}$$

so dass die zweite-Ordnungs Gleichung folgende Form annimmt,

$$\left(-\Box - 2ia\partial + a^2 - \mathrm{i}\not{k}\not{a}' - \mu^2\right)\psi = 0. \tag{7.174}$$

Hier folgen wir VOLKOV und machen den folgenden Lösungsansatz,

$$\psi = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}qx}F(\varphi) \quad \text{mit} \quad q^2 = \mu^2. \tag{7.175}$$

Mit Hilfe von $k^2 = ka = 0$ findet man für die Amplitude F folgende gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung,

$$2\mathrm{i}(qk)F' = \left(2aq - a^2 + \mathrm{i}\not{k}\not{a}'\right)F. \tag{7.176}$$

Die Lösung dieser Gleichung lautet

$$F = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{kq}\int^\varphi \left(aq - \frac{a^2}{2}\right)d\varphi'\right)\left(1 + \frac{1}{2}\frac{\not{k}\not{a}}{kq}\right)\frac{1}{\sqrt{2\omega}}\,u_p, \tag{7.177}$$

mit einem konstanten Bispinor $u_p/2\omega$. Beim Beweis benutzt man die Lorentzeichung in

$$\not{a}\not{k} = -\not{k}\not{a} + \{\not{a}, \not{k}\} = -\not{k}\not{a} + 2k_\mu a^\mu = -\not{k}\not{a} \tag{7.178}$$

und dass k ein lichtartiger Vektor ist, so dass

$$(\not{k}\not{a}')(\not{k}\not{a}) = -(\not{k}\not{k})(\not{a}'\not{a}) = -k^2(\not{a}'\not{a}) = 0 \tag{7.179}$$

gilt. An dieser Stelle wird of the *Hamilton-Jacobi-Funktion*

$$S = -qx - \frac{1}{kq}\int_0^{kx}\left(aq - \frac{a^2}{2}\right)\mathrm{d}\varphi \tag{7.180}$$

eingeführt. Damit schreibt sich die Lösung der zweiten Ordnungs-Gleichung

$$\psi = \left(1 + \frac{1}{2}\frac{\not{k}\not{a}}{kq}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}S}\frac{1}{\sqrt{2\omega}}u_p. \tag{7.181}$$

Dies ist im Allgemeinen noch keine Lösung der ersten-Ordnungs Gleichung. Aber wegen

$$\mathrm{i}\not{D}\psi = \left(1 + \frac{1}{2}\frac{\not{k}\not{a}}{kq}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}S}\frac{1}{\sqrt{2\omega}}\not{q}u_p. \tag{7.182}$$

ist sie eine derartige Lösung falls der konstante Spinor die freie Dirac-Gleichung erfüllt

$$(\not{q} - \mu)u_p = 0 \quad \text{bzw.} \quad \bar{u}_p(\not{q} - \mu) = 0. \tag{7.183}$$

Durch diese Bedingung werden die überflüssigen Lösungen der Gleichung zweiter Ordnung eliminiert. u_p ist also die Amplitude einer freien ebenen Welle. Als Normierungsvorschrift werden wir wie für ebene Wellen $\bar{u}_p u_p = 2\mu$ wählen. Mit der Identität

$$\not{a}^\dagger\gamma^0 = \gamma^0\not{a} \tag{7.184}$$

finden wir mit $\not{k}^2 = \{\not{k}, \not{A}\} = 0$ einen konstanten bilinearen Skalar

$$\begin{aligned}\bar{\psi}\psi &= \frac{1}{2\omega}u_p^\dagger\left(1 + \frac{1}{2kq}\not{a}^\dagger\not{k}^\dagger\right)\gamma^0\left(1 + \frac{1}{2kq}\not{k}\not{a}\right)u_p\\ &= \frac{1}{2\omega}\bar{u}_p\left(1 + \frac{1}{2kq}\not{a}\not{k}\right)\left(1 + \frac{1}{2kq}\not{k}\not{a}\right)u_p = \frac{\mu}{\omega}.\end{aligned}$$

Dagegen hängt die Stromdichte von Raum und Zeit ab. Mit Hilfe der Identitäten

$$\not{a}\not{k}\gamma^\mu + \gamma^\mu\not{k}\not{a} = 2(k^\mu\not{a} - a^\mu\not{k}) \quad \text{und} \quad \not{a}\not{k}\gamma^\mu\not{k}\not{a} = -2k^\mu a^2\not{k} \tag{7.185}$$

und der aus (7.183) abgeleiteten Gleichung

$$\mu\,\bar{u}_p\gamma^\mu u_p = q^\mu\,\bar{u}_p u_p = 2\mu q^\mu \tag{7.186}$$

findet man die Stromdichte

$$\begin{aligned}\bar{\psi}\gamma^\mu\psi &= \frac{1}{2\omega}\bar{u}_p\left(\gamma^\mu + \frac{1}{kq}\left(k^\mu \not{a} - a^\mu \not{k}\right) - \frac{1}{2(kq)^2}\left(k^\mu a^2 \not{k}\right)\right)u_p \\ &= \frac{1}{\omega}\left(q^\mu - a^\mu + k^\mu\left(\frac{aq}{kq} - \frac{a^2}{2kq}\right)\right)\end{aligned} \tag{7.187}$$

Für periodische Funktionen $a^\mu(\varphi)$ sind die (zeitlichen) Mittelwerte Null, und der Mittelwert der Stromdicht ist

$$\bar{j}^\mu = \frac{1}{\omega}\left(q^\mu - \frac{1}{2kq}\overline{a^2}\,k^\mu\right). \tag{7.188}$$

Also ist die Stromdichte in einer harmonischen ebenen Welle $a^\mu(x) = a_0^\mu\cos(kx)$ gleich

$$\bar{j}^\mu = \frac{1}{\omega}\left(q^\mu - \frac{a_0^2}{4kq}\,k^\mu\right). \tag{7.189}$$

7.10 Aufgaben zu Kapitel 7

Aufgabe 7.1: Pauli-Matrizen

Zeigen Sie, dass die Pauli-Matrizen $\{\sigma_0, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$ eine Basis für die komplexen 2×2-Matrizen bilden. Beweisen Sie dazu, dass $\mathrm{Spur}(\sigma_\mu\sigma_\nu) = 2\delta_{\mu\nu}$ gilt und verwenden Sie diese Gleichung, um zu zeigen, dass $a_\mu\sigma^\mu = 0$ nur für $a_\mu = 0$ möglich ist.

Aufgabe 7.2: Dirac-Matrizen I

Gegeben sind die Matrizen $\{\mathbb{1}_4, \gamma^\mu, \gamma^{\mu\nu}, \gamma_5\gamma^\mu, \gamma_5\}$, wobei die γ^μ die Cliffordalgebra $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu}$ erfüllen, $\gamma^{\mu\nu} = \frac{1}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu]$ und $\gamma_5 = \mathrm{i}\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$ ist. Zeigen Sie folgende Eigenschaften:

1. $(\gamma_5)^2 = \mathbb{1}_4$
2. $\{\gamma_5, \gamma^\mu\} = 0$
3. $\mathrm{Spur}(\gamma^{\mu_1}...\gamma^{\mu_n}) = \mathrm{Spur}(\gamma^{\mu_1}...\gamma^{\mu_n}\gamma_5) = 0$ für ungerades n
4. $\mathrm{Spur}(\gamma^\mu\gamma^\nu) = 4\eta^{\mu\nu}$
5. $\mathrm{Spur}(\gamma_5) = \mathrm{Spur}(\gamma^{\mu\nu}) = \mathrm{Spur}(\gamma_5\gamma^\mu\gamma^\nu) = 0$
6. $\mathrm{Spur}(\gamma^{\alpha\beta}\gamma^{\mu\nu}) = -4(\eta^{\alpha\mu}\eta^{\beta\nu} - \eta^{\alpha\nu}\eta^{\beta\mu})$.

Aufgabe 7.3: Dirac-Matrizen II

Zeigen Sie, dass die Matrizen $\{\mathbb{1}_4, \gamma^\mu, \gamma^{\mu\nu}, \gamma_5\gamma^\mu, \gamma_5\}$ eine Basis für die komplexen 4×4-Matrizen bilden, d. h. dass sie linear unabhängig sind. Multiplizieren Sie dazu die Gleichung

$$a\mathbb{1}_4 + b_\mu\gamma^\mu + c_{\mu\nu}\gamma^{\mu\nu} + d_\mu\gamma_5\gamma^\mu + e\gamma_5 = 0$$

mit den Matrizen $\{\mathbb{1}_4, \gamma^\mu, \gamma^{\mu\nu}, \gamma_5\gamma^\mu, \gamma_5\}$ und bilden Sie die Spur. Zeigen Sie mit Hilfe der in der vorherigen Aufgabe berechneten Spuren, dass $a = b_\mu = c_{\mu\nu} = d_\mu = e = 0$ sein muss.

Aufgabe 7.4: Dirac-Matrizen III

In der chiralen Darstellung haben die Dirac-Matrizen die Form

$$\gamma^0 = \sigma_1 \otimes \sigma_0 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_0 \\ \sigma_0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^k = -\mathrm{i}\sigma_2 \otimes \sigma_k = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}$$

und in der Dirac-Darstellung

$$\gamma^0 = \sigma_3 \otimes \sigma_0 = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sigma_0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^k = \mathrm{i}\sigma_2 \otimes \sigma_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ -\sigma_k & 0 \end{pmatrix}.$$

1. Zeigen Sie, dass diese Matrizen jeweils die Antikommutationsregeln $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}$ erfüllen.
   Hinweis: Die Rechnungen sind einfacher, wenn Sie Tensorprodukt-Regeln verwenden, z.B. $(A \otimes B)(C \otimes D) = AC \otimes BD$.
2. Was sind die Hermizitätseigenschaften der γ^μ? Warum kann z.B. γ^1 nicht hermitesch sein?
3. Berechnen Sie $\gamma_5 = \mathrm{i}\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$ für beide Darstellungen.
4. Benutzen Sie nur die Antikommutationsregeln für die γ^μ um zu zeigen, dass γ_5 mit den γ^μ antikommutiert, $\{\gamma_5, \gamma^\mu\} = 0$.
5. Zeigen Sie unter Benutzung der Antikommutationsregeln die folgenden Identitäten

$$\begin{aligned} &\gamma^\mu\gamma_\mu = 4\mathbb{1} \\ &\gamma^\mu \not{p} \gamma_\mu = -2\not{p} \\ &\gamma^\mu \not{p}\not{q} \gamma_\mu = 4p \cdot q\mathbb{1}, \end{aligned}$$

   wobei $\not{p} = p^\mu\gamma_\mu$ und $p \cdot q = p^\mu q_\mu$ sind (Aufteilung: 0.5+0.5+1 Punkte).

Aufgabe 7.5: Infinitesimale Spin-Transformationen

Wir definieren die Matrizen $\Sigma_{\mu\nu}$ und Operatoren $M_{\mu\nu}$ gemäß

$$\Sigma_{\mu\nu} = \frac{1}{4\mathrm{i}}[\gamma_\mu, \gamma_\nu], \qquad M_{\mu\nu} = x_\mu p_\nu - x_\nu p_\mu\,,$$

worin $p_\mu = -\mathrm{i}\hbar\partial_\mu$ ist.

1. Berechnen Sie die Kommutatoren

$$\left[\Sigma_{\mu\nu}, \gamma_\alpha\right] \quad \text{und} \quad \left[\Sigma_{\mu\nu}, \Sigma_{\alpha\beta}\right].$$

   Hinweis: benutzen Sie in dieser Teilaufgabe nur die Eigenschaft $\gamma_\nu\gamma_\alpha = -\gamma_\alpha\gamma_\nu + 2g_{\nu\alpha}$ und nicht etwa eine der expliziten Darstellungen!
2. Bestimmen Sie die Kommutatoren der Operatoren $M_{\mu\nu}$.
3. Eine infinitesimale Lorentztransformation eines Skalarfeldes ist gegeben durch

$$\delta_\omega\phi(x) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\Big|_{s=0}\phi\left(\Lambda^{-1}(s)x\right), \quad \Lambda(s) = \mathrm{e}^{s\omega}$$

   wobei $\omega^\mu{}_\nu$ nach herunter ziehen des Index μ anti-symmetrisch ist, $\omega_{\mu\nu} = -\omega_{\nu\mu}$. Wie hängt $\delta_\omega\phi$ mit den $M_{\mu\nu}$ zusammen?
4. Was erzeugen wohl die Matrizen $\Sigma_{\mu\nu}$? (ohne Punkte)

Bemerkung: die Bedeutung von $J_{\mu\nu} = M_{\mu\nu} + \Sigma_{\mu\nu}$ wird in der Vorlesung diskutiert werden.

Aufgabe 7.6: Weyl-Spinoren

Der zwei-komponentige Spinor $\phi(p)$ erfüllt die Gleichung

$$p_0\phi(p) = \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\phi(p)\,.$$

Zeigen Sie: Es gibt nicht-verschwindende Lösungen für ϕ nur für

$$p_0 = \pm|\boldsymbol{p}| = \frac{E}{c}\,.$$

Hinweis: Wenden Sie den Helizitätsoperator $\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{\sigma}$ oder $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}$ auf beide Seiten der Gleichung an.

Aufgabe 7.7: Kovariant erhaltener Strom

Das Spinorfeld ψ erfülle die Dirac-Gleichung

$$\left(\mathrm{i}\gamma^\mu D_\mu - \frac{mc}{\hbar}\right)\psi = 0\,.$$

Welche Gleichung erfüllt dann der Dirac-konjugierte Spinor $\bar{\psi}$? Zeigen Sie weiterhin, dass

$$j^\mu = e\bar{\psi}\gamma^\mu\psi$$

kovariant erhalten ist, d. h. dass $\partial_\mu j^\mu = 0$ gilt.

Aufgabe 7.8: Tensorfeld

Zeigen Sie, dass

$$T^{\mu\nu}(x) = \bar{\psi}(x)[\gamma^\mu, \gamma^\nu]\psi(x)$$

ein (antisymmetrisches) Tensorfeld zweiter Stufe ist.

Aufgabe 7.9: Zweite-Ordnungs Wellengleichung

Ein Spinorfeld erfülle die Dirac-Gleichung $(\mathrm{i}\not{D} - \mu)\psi = 0$. Wirken Sie nun mit $\mathrm{i}\not{D} + \mu$ auf diese Gleichung. Was folgt dann für eine Wellengleichung zweiter Ordnung für ψ?
Hinweis: Benutzen Sie $\gamma^\mu\gamma^\nu = g^{\mu\nu}\mathbb{1} + \frac{1}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu]$ und den aus der Vorlesung bekannten Ausdruck für $[D_\mu, D_\nu]$ um das Quadrat des Dirac-Operators als ein Vielfaches von $\mathbb{1}$ bzw. der $[\gamma^\mu, \gamma^\nu]$ zu schreiben.

Kapitel 8

Das relativistische Zentralkraftproblem

Eine wichtige Anwendung der Dirac-Gleichung ist die Berechnung des H-Atom Spektrums und hier insbesondere der Feinstruktur. Wie in der nichtrelativistischen Schrödingertheorie kann die Dirac-Gleichung im statischen Coulombfeld exakt gelöst werden. Die Resultate (wenn man Strahlungkorrekturen berücksichtigt) sind in hervorragender Übereinstimmung mit den experimentellen Befunden. Die relevante Längenskala in der Atomphysik, der Bohrradius, ist etwa 137-mal größer als die Wellenlänge des Elektrons. Deshalb spielen für kleine Atome die Probleme mit den negativen Energien keine wesentliche Rolle. Für sehr große Atome wird der Diracsee aber zunehmend wichtiger, und die im Folgenden benutzte Einteilchen-Interpretation der Dirac-Theorie ist nicht mehr gerechtfertigt; es müssen andere Methoden angewandt werden.

Für wasserstoffähnliche Ionen mit

$$\boldsymbol{A} = 0 \quad \text{und} \quad eA_0 = V(r) \tag{8.1}$$

ist der Hamilton-Operator drehinvariant. Bis zur expliziten Lösung der radialen Dirac-Gleichung wollen wir aber ein beliebiges radialsymmetrisches Potential $V(r)$ zulassen. Erst gegen Schluss dieses Kapitels werden wir uns auf das wichtige Coulomb-Potential von H-ähnlichen Ionen beschränken. Für jedes $V(r)$ vertauscht der Gesamtdrehimpuls

$$J_k = L_k - \frac{\hbar}{4\mathrm{i}}\epsilon_{kij}\gamma^i\gamma^j \tag{8.2}$$

mit dem Hamilton-Operator

$$H = c(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{p}) + \beta mc^2 + V(r). \tag{8.3}$$

In der Dirac-Darstellung lauten die auftretenden Matrizen

$$\beta = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sigma_0 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_0 \\ \sigma_0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \equiv \rho_1 \boldsymbol{\sigma}, \tag{8.4}$$

wobei wir die im Folgenden oft benutzte Matrix ρ_1 einführten. Der Gesamtdrehimpuls ist blockdiagonal

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{x} \times \boldsymbol{p} + \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S} = \hbar\left(\boldsymbol{M} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\right). \tag{8.5}$$

Ob mit $\boldsymbol{\sigma}$ die 2 oder 4-dimensionalen Matrizen gemeint sind, geht jeweils aus dem Zusammenhang hervor. In (8.5) sind die σ_i offensichtlich 4×4-Matrizen. Wir werden öfter die Eigenschaften

$$\rho_1 \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma} \rho_1, \qquad \rho_1^2 = \mathbb{1} \quad \text{und} \quad \{\beta, \rho_1\} = 0 \tag{8.6}$$

benutzen. Im letzten Kapitel sahen wir, daß der gesamte Drehimpuls $\boldsymbol{J}$ erhalten ist, $[\boldsymbol{J}, H] = 0$. Entsprechend gibt es folgende Integrale in Involution (Konstanten der Bewegung):

$$\boldsymbol{J}^2, \quad J_3 \quad \text{und} \quad H. \tag{8.7}$$

Ich erinnere daran, daß die Eigenwerte m von $L_3/\hbar$ die ganzen Zahlen zwischen $-\ell$ und ℓ sind. Da aber $S_3 = \hbar\sigma_3/2$ ist, sind die möglichen Eigenwerte von $J_3/\hbar$ gleich $-(\ell + \frac{1}{2}), -(\ell - \frac{1}{2}), \dots, (\ell + \frac{1}{2})$ und deshalb sind die Eigenwerte des Gesamtdrehimpuls gleich

$$\hbar^2 j(j+1) \quad \text{mit} \quad j \in \frac{1}{2} + \mathbb{N}_0. \tag{8.8}$$

Insbesonders tritt die Quantenzahl $j = 0$ nicht auf.

8.1 Transformation auf Polarkoordinaten

Ähnlich wie in der Schrödingertheorie wollen wir die Winkelvariablen abspalten. Wegen der Spinfreiheitsgrade des relativistischen Elektrons ist diese Transformation auf Polarkoordinaten aber etwas komplizierter als in der nichtrelativistischen Theorie.

Zuerst projizieren wir die Vektoroperatoren $\boldsymbol{\alpha}$ und $\boldsymbol{p}$ auf den Vektoroperator $\boldsymbol{x}$. Dazu definieren wir die drehinvariante r-Komponente α_r von $\boldsymbol{\alpha}$:

$$r \cdot \alpha_r \equiv (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\alpha}). \tag{8.9}$$

Offensichtlich gilt

$$\alpha_r^\dagger = \alpha_r, \qquad \alpha_r^2 = \frac{1}{r^2} x_i x_j \frac{1}{2}\{\alpha_i, \alpha_j\} = \mathbb{1} \quad \text{und} \quad \{\alpha_r, \beta\} = 0. \tag{8.10}$$

Der drehinvariante radiale Impuls ist gegeben durch

$$r \cdot p_r \equiv (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}) = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} r \frac{\partial}{\partial r}. \tag{8.11}$$

In der Quantenmechanik I haben sie gelernt, daß der Operator p_r nicht hermitisch ist,

$$p_r^\dagger = \frac{2\hbar}{\mathrm{i}r} + p_r \quad \text{aber} \quad \left(p_r + \frac{\hbar}{\mathrm{i}r}\right)^\dagger = \left(p_r + \frac{\hbar}{\mathrm{i}r}\right). \tag{8.12}$$

Nach diesen Vorbereitungen wollen wir nun die Terme im Dirac-Hamilton-Operator umschreiben. Um $(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{p})$ durch drehinvariante Größen auszudrücken, berechnen wir zuerst

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\alpha})(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{p}) &= (\boldsymbol{x}, \rho_1 \boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{p}, \rho_1 \boldsymbol{\sigma}) \overset{(8.6)}{=} \rho_1^2 (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{\sigma}) \\ &= (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}) + \mathrm{i}(\boldsymbol{x} \times \boldsymbol{p}, \boldsymbol{\sigma}) = r p_r + \mathrm{i}(\boldsymbol{L}, \boldsymbol{\sigma}).\end{aligned}$$

Mit $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\alpha}) = r\alpha_r$ und $\alpha_r^2 = \mathbb{1}$ können wir diese Gleichung nach $(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{p})$ auflösen:

$$(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{p}) = \alpha_r p_r + \frac{\mathrm{i}}{r} \alpha_r (\boldsymbol{L}, \boldsymbol{\sigma}). \tag{8.13}$$

Eingesetzt in Hamilton-Operator finden wir

$$H = c\left(\alpha_r p_r + \mathrm{i}\alpha_r \frac{\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{r}\right) + \beta m c^2 + V(r). \tag{8.14}$$

Im nächsten Schritt ersetzen wir das Produkt von Drehimpuls und Spin durch eine von Dirac eingeführte erhaltene Größe.

8.2 Der Diracsche Erhaltungssatz

Bei der Berechnung des Spektrums von H wird der folgende drehinvariante hermitesche 4×4 Matrixoperator

$$k = \beta\,(\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{\sigma} + \mathbb{1})\,, \qquad \boldsymbol{M} = \boldsymbol{L}/\hbar \tag{8.15}$$

eine außerordentlich nützliche Rolle spielen. Dieser Operator mißt die Parallelität des Spins und Bahndrehimpulses. Wir werden zeigen, daß k mit H vertauscht. Doch zuerst wollen wir seine Eigenwerte bestimmen. Dazu berechnen wir sein Quadrat.

Da β mit $\boldsymbol{\sigma}$ vertauscht und $\boldsymbol{M}\times\boldsymbol{M} = i\boldsymbol{M}$ ist, rechnen wir

$$\begin{aligned} k^2 &= \beta\big(\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{\sigma}+\mathbb{1}\big)\beta\big(\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{\sigma}+\mathbb{1}\big) = (\boldsymbol{M},\boldsymbol{\sigma})^2 + 2(\boldsymbol{M},\boldsymbol{\sigma}) + \mathbb{1} \\ &= (\boldsymbol{M},\boldsymbol{M}) + \mathrm{i}(\boldsymbol{M}\times\boldsymbol{M},\boldsymbol{\sigma}) + 2(\boldsymbol{M},\boldsymbol{\sigma}) + \mathbb{1} = (\boldsymbol{M},\boldsymbol{M}) + (\boldsymbol{M},\boldsymbol{\sigma}) + \mathbb{1} \\ &= \big(\boldsymbol{M}+\tfrac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\big)^2 - \tfrac{1}{4}\boldsymbol{\sigma}^2 + \mathbb{1} = (\boldsymbol{J}/\hbar)^2 + \tfrac{1}{4}\mathbb{1}. \end{aligned} \tag{8.16}$$

Als Skalarprodukt von zwei Vektoroperatoren vertauscht der skalare Operator k mit dem Gesamtdrehimpuls

$$[\boldsymbol{J}, k] = 0. \tag{8.17}$$

Wir können deshalb $\boldsymbol{J}^2$ und k gleichzeitig diagonalisieren. Dies benutzen wir in der gerade abgeleiteten Formel für k^2, um die Eigenwerte dieses Operators mit denjenigen von $\boldsymbol{J}^2$ in Verbindung zu bringen. Wegen

$$j(j+1) + \frac{1}{4} = \big(j+\tfrac{1}{2}\big)^2\,, \qquad j \in \tfrac{1}{2} + \mathbb{N}_0 \tag{8.18}$$

ist das Spektrum von k gleich

$$k = \{\dots, -2, -1, 1, 2, \dots\} \quad \text{(0 fehlt)}. \tag{8.19}$$

Wir müssen noch beweisen, daß k mit dem Hamilton-Operator (8.14) vertauscht. Dazu berechnen wir die Kommutatoren der verschiedenen Terme in H mit k:

- Der orbitale Drehimpuls $\boldsymbol{L}$ vertauscht mit einem radialsymmetrischen Potential und daher ist
$$[k, V(r)] = 0. \tag{8.20}$$

- Da $\boldsymbol{\sigma}$ mit β kommutiert, gilt auch
$$[k, \beta] = 0 \quad \text{und} \quad [k, \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{\sigma}] = 0. \tag{8.21}$$

- $p_r = \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{p}/r$ ist drehinvariant und vertauscht mit $\boldsymbol{L}$ und deshalb mit k:

$$[k, p_r] = 0. \tag{8.22}$$

- Es verbleibt noch zu zeigen, daß α_r mit k kommutiert. Dies wollen wir nun beweisen. Da β mit $\boldsymbol{x\sigma}$ und ρ_1 mit $\boldsymbol{M\sigma}$ vertauscht, ist

$$[r\alpha_r, k] = [\rho_1 \boldsymbol{x\sigma}, \beta(\boldsymbol{M\sigma}+1)] = \rho_1\beta[\boldsymbol{x\sigma}, \boldsymbol{M\sigma}+1] + [\rho_1, \beta](\boldsymbol{M\sigma}+1)\boldsymbol{x\sigma} \tag{8.23}$$

Nun benutzen wir, daß ρ_1 und β antivertauschen, so daß $[\rho_1, \beta] = 2\rho_1\beta$ gilt und entsprechend ist

$$[r\alpha_r, k] = \rho_1\beta\left([\boldsymbol{x\sigma}, \boldsymbol{M\sigma}] + 2(\boldsymbol{M\sigma}+1)\boldsymbol{x\sigma}\right) = \rho_1\beta\left(\{\boldsymbol{x\sigma}, \boldsymbol{M\sigma}\} + 2\boldsymbol{x\sigma}\right). \tag{8.24}$$

Um zu zeigen, daß der Ausdruck in der Klammer verschwindet benutzen wir, daß $\boldsymbol{x}$ ein Vektoroperator ist, d.h. daß $M_j x_i = -\mathrm{i}\epsilon_{jpi}x_p + x_i M_j$ gilt, und finden

$$\{\boldsymbol{x\sigma}, \boldsymbol{M\sigma}\} = x_i M_j\{\sigma_i, \sigma_j\} - \mathrm{i}\epsilon_{jpi}x_p\sigma_j\sigma_i = 2\boldsymbol{xM} + \epsilon_{jpi}\epsilon_{jik}x_p\sigma_k = -2\boldsymbol{x\sigma}\,, \tag{8.25}$$

wobei wir berücksichtigten, dass $\boldsymbol{xM} = 0$ verschwindet. Damit wäre bewiesen, daß der von Dirac eingeführte Operator k mit $r\alpha_r$ vertauscht.

Also vertauschen alle Terme in H mit k, was zu zeigen war. Nun können wir schlussendlich noch $\boldsymbol{L\sigma}$ im Hamilton-Operator (8.14) durch k ersetzen,

$$k = \beta(\boldsymbol{M\sigma}+1) \Longrightarrow \boldsymbol{L\sigma} = \hbar\big(\beta k - 1\big). \tag{8.26}$$

und finden

$$\begin{aligned} H &= c\left(\alpha_r p_r + \mathrm{i}\hbar\frac{\alpha_r}{r}\big(\beta k - 1\big)\right) + \beta mc^2 + V(r) \\ &= c\left(\alpha_r\left(p_r + \frac{\hbar}{\mathrm{i}r}\right) + \frac{\mathrm{i}\hbar}{r}\alpha_r\beta k\right) + \beta mc^2 + V(r). \end{aligned} \tag{8.27}$$

Wir haben die folgenden Integrale mit den angegebenen Eigenwerten in Involution:

$$\begin{array}{ll} \boldsymbol{J}^2/\hbar^2: & j \in \{1/2, 3/2, \dots\} \\ J_3/\hbar: & \mu \in \{\pm 1/2, \pm 3/2, \dots\} \\ k: & k \in \{\pm 1, \pm 2, \dots\} \\ H: & E_{j,\mu,k} = ? \end{array}$$

Wir wählen die Energie-Eigenzustände als Eigenzustände der kommutierenden Operatoren $\boldsymbol{J}^2, J_3$ und k, und bezeichnen sie entsprechend mit $\psi_{j,\mu,k}$. Nach Diagonalisierung dieser Operatoren wird erwartungsgemäß die Dirac-Gleichung zu einem System von gekoppelten gewöhnlichen Differentialgleichungen für die radialen Wellenfunktionen. Wir diagonalisieren zuerst J_3 und danach k. Der Operator $\boldsymbol{J}^2$ ist dann ebenfalls diagonal.

Diagonalisierung von J_3: Wir benutzen wieder die zweier-Block Schreibweise, in der die Eigenwertgleichung für J_3 folgende Form annimmt:

$$J_3\psi_{j,\mu,k} = \begin{pmatrix} L_3 + \frac{1}{2}\hbar\sigma_3 & 0 \\ 0 & L_3 + \frac{1}{2}\hbar\sigma_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \mu \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}. \tag{8.28}$$

Für die Komponenten des 2-er Spinor ϕ bedeutet dies

$$L_3\phi_1 = \hbar(\mu - \tfrac{1}{2})\phi_1 \quad \text{und} \quad L_3\phi_2 = \hbar(\mu + \tfrac{1}{2})\phi_2 \tag{8.29}$$

und analog für die Komponenten von χ. Wegen $L_3 Y_{\ell m} = \hbar m Y_{\ell m}$ können wir daher setzen

$$\phi = \begin{pmatrix} f_1(r) Y_{\ell,\mu-\frac{1}{2}} \\ f_2(r) Y_{\ell,\mu+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \chi = \begin{pmatrix} g_1(r) Y_{\ell,\mu-\frac{1}{2}} \\ g_2(r) Y_{\ell,\mu+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}. \tag{8.30}$$

Diagonalisierung von k: Wegen

$$k = \begin{pmatrix} \boldsymbol{M}\boldsymbol{\sigma} + \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\boldsymbol{M}\boldsymbol{\sigma} - \sigma_0 \end{pmatrix} \tag{8.31}$$

lauten die Eigenwertgleichungen für k folgendermaßen:

$$(\boldsymbol{M}\boldsymbol{\sigma} + \sigma_0)\phi = k\phi \quad \text{und} \quad -(\boldsymbol{M}\boldsymbol{\sigma} + \sigma_0)\chi = k\chi. \tag{8.32}$$

Mit Hilfe der Aufsteige- und Absteigeoperatoren,

$$L_\pm = L_1 \pm \mathrm{i} L_2 \Longrightarrow [L_3, L_\pm] = \pm L_\pm, \tag{8.33}$$

nimmt die Eigenwertgleichung für ϕ folgende Form an,

$$\begin{pmatrix} L_3 + \hbar & L_- \\ L_+ & -L_3 + \hbar \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 Y_{\ell,\mu-\frac{1}{2}} \\ f_2 Y_{\ell,\mu+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \hbar k \begin{pmatrix} f_1 Y_{\ell,\mu-\frac{1}{2}} \\ f_2 Y_{\ell,\mu+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}. \tag{8.34}$$

Der Aufsteige- bzw. Absteigeoperator L_+ und L_- erhöhen bzw. erniedrigen die magnetische Quantenzahl um Eins,

$$L_\pm Y_{\ell,m} = \hbar\sqrt{(\ell \mp m)(\ell \pm m + 1)}\,Y_{\ell,m\pm 1}, \tag{8.35}$$

und die Eigenwertgleichung für ϕ schreibt sich gemäß

$$\begin{pmatrix} \mu + \frac{1}{2} & \sqrt{(\ell + \mu + \frac{1}{2})(\ell - \mu + \frac{1}{2})} \\ \sqrt{(\ell - \mu + \frac{1}{2})(\ell + \mu + \frac{1}{2})} & -\mu + \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = k \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}. \tag{8.36}$$

Diese algebraische Gleichung hat nur eine nichtverschwindende Lösung falls

$$\left(\mu + \frac{1}{2} - k\right)\left(-\mu + \frac{1}{2} - k\right) = \left(\mu + \frac{1}{2} + \ell\right)\left(-\mu + \frac{1}{2} + \ell\right) \tag{8.37}$$

gilt. Offensichtlich hat diese quadratische Gleichung die beiden Lösungen:

$$\begin{aligned} k = \ell + 1 > 0: &\quad f_2 = \left(\frac{\ell - \mu + \frac{1}{2}}{\ell + \mu + \frac{1}{2}}\right)^{1/2} f_1 \\ k = -\,\ell < 0: &\quad f_2 = -\left(\frac{\ell + \mu + \frac{1}{2}}{\ell - \mu + \frac{1}{2}}\right)^{1/2} f_1. \end{aligned} \tag{8.38}$$

Die entsprechenden ϕ und χ diagonalisieren wegen (8.16) auch das Quadrat des Gesamtdrehimpulses. Die Beziehung (8.16) zwischen $\boldsymbol{J}^2$ und k^2 führt auf

$$\begin{aligned} k = \ell + 1 > 0 &\Longrightarrow j(j+1) = k^2 - \tfrac{1}{4} = (\ell + \tfrac{1}{2})(\ell + \tfrac{3}{2}) \quad \text{oder} \quad j = \ell + \tfrac{1}{2} \\ k = -\ell < 0 &\Longrightarrow j(j+1) = k^2 - \tfrac{1}{4} = (\ell - \tfrac{1}{2})(\ell + \tfrac{1}{2}) \quad \text{oder} \quad j = \ell - \tfrac{1}{2}. \end{aligned}$$

Wir können also die folgenden Ersetzungen vornehmen:

$$j = \ell + \tfrac{1}{2} \longleftrightarrow k = j + \tfrac{1}{2} \quad \text{und} \quad j = \ell - \tfrac{1}{2} \longleftrightarrow k = -\left(j + \tfrac{1}{2}\right), \tag{8.39}$$

oder zusammengefasst

$$k = (-)^{\ell + 1/2 - j}\left(j + \tfrac{1}{2}\right). \tag{8.40}$$

Normieren wir die numerischen Koeffizienten von ϕ_1 und ϕ_2, so finden wir, wenn wir noch die analogen Resultate für die Komponenten von χ hinzufügen, folgende Eigenfunktionen:

$$\begin{aligned} k = \ell + \tfrac{1}{2} > 0,\; j = \ell + \tfrac{1}{2}: \quad \psi_{j,\mu,k} &= \begin{pmatrix} f(r)\,\xi^+_{j\mu} \\ g(r)\,\xi^-_{j\mu} \end{pmatrix} \\ k = -\ell < 0,\; j = \ell - \tfrac{1}{2}: \quad \psi_{j,\mu,k} &= \begin{pmatrix} f(r)\,\xi^-_{j\mu} \\ g(r)\,\xi^+_{j\mu} \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{8.41}$$

Bezeichnet c^j_μ die positive Wurzel von $(j+\mu)/2j$, dann lauten die *Spinor-Harmonischen*

$$\xi^+_{j\mu} = \begin{pmatrix} c^j_\mu\, Y_{j-1/2,\mu-1/2} \\ c^j_{-\mu}\, Y_{j-1/2,\mu+1/2} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \xi^-_{j\mu} = \begin{pmatrix} c^{j+1}_{-\mu}\, Y_{j+1/2,\mu-1/2} \\ -c^{j+1}_{\mu}\, Y_{j+1/2,\mu+1/2} \end{pmatrix} \tag{8.42}$$

Damit haben wir bis auf den Hamilton-Operator alle kommutierenden Integrale der Bewegung diagonalisiert. Ähnlich wie in der Schrödinger-Theorie vereinfacht sich die Eigenwertgleichung für H zu gewöhnlichen Differentialgleichungen für die radialen Funktionen f und g. Für die Dirac-Gleichung haben wir es aber mit zwei radialen Funktionen zu tun. Dies ist nicht ganz unerwartet, da die Dirac-Gleichung, im Gegensatz zur Schrödinger-Gleichung, eine Differentialgleichung erster Ordnung ist.

Um die radiale Dirac-Gleichung abzuleiten und damit die Energieeigenwerte zu bestimmen, brauchen wir die Wirkung von α_r auf den 4−komponentigen Wellenfunktionen: Wegen

$$\alpha_r = \frac{1}{r}\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{n\sigma} \\ \boldsymbol{n\sigma} & 0 \end{pmatrix} \tag{8.43}$$

ist für positive k

$$\alpha_r\psi_{j,\mu,k} = \begin{pmatrix} g(r)\boldsymbol{\sigma n}\;\xi^-_{j\mu} \\ f(r)\boldsymbol{\sigma n}\;\xi^+_{j\mu} \end{pmatrix}. \tag{8.44}$$

Wir müssen also herausfinden wie $\boldsymbol{\sigma n}$ auf die Spinor-Harmonischen $\xi^\pm$ wirkt. Wir notieren noch einmal, daß aufgrund der Form von k,

$$k = \begin{pmatrix} \kappa & 0 \\ 0 & -\kappa \end{pmatrix}, \qquad \kappa = \boldsymbol{M\sigma} + 1 \tag{8.45}$$

die Spinor-Harmonischen $\xi^\pm$ eindeutig charakterisiert sind durch:

$$\begin{aligned} \xi^+_{j\mu}: &\quad j,\; \mu,\; \kappa\xi^+_{j\mu} = k\xi^+_{j\mu} \\ \xi^-_{j\mu}: &\quad j,\; \mu,\; \kappa\xi^-_{j\mu} = -k\xi^-_{j\mu}, \end{aligned} \tag{8.46}$$

wobei k ein positiver Eigenwert von k ist.

- Da $\boldsymbol{\sigma n}$ nur von den Winkelvariablen abhängt und sein Quadrat Eins ist, muß $\xi \to (\boldsymbol{\sigma n})\xi$ eine Kombination von Spinor-Harmonischen mit derselben Norm als ξ sein. Weitherhin ist $\boldsymbol{\sigma n}$ drehinvariant, d.h. vertauscht mit $\boldsymbol{J}$, und deshalb haben ξ und $(\boldsymbol{\sigma n})\xi$ dieselben Quantenzahlen j und μ.

- Als nächstes zeigen wir, daß $(\boldsymbol{\sigma n})\xi$ ein Eigenzustand von κ ist, falls ξ ein solcher war. Dazu beweisen wir, daß
$$\{\boldsymbol{\sigma n}, \kappa\} = 0 \tag{8.47}$$
ist. In der Tat ist
$$\{\boldsymbol{\sigma n}, \kappa\} = \{\boldsymbol{\sigma n}, \boldsymbol{M\sigma} + \mathbb{1}\} = \{\boldsymbol{\sigma n}, \boldsymbol{M\sigma}\} + 2\boldsymbol{\sigma n} \overset{(8.25)}{=} 0. \tag{8.48}$$

Damit haben wir
$$\kappa(\boldsymbol{\sigma n})\xi^\pm = -(\boldsymbol{\sigma n})\kappa\xi^\pm = \mp k(\boldsymbol{\sigma n})\xi^\pm. \tag{8.49}$$
Also haben $(\boldsymbol{\sigma n})\xi^\pm_{j\mu}$ und $\xi^\pm_{j\mu}$ dieselben j und μ, aber entgegengesetztes k. Wir schließen, daß
$$(\boldsymbol{\sigma n})\xi^\pm_{j\mu} = d_{j\mu}\xi^\mp_{j\mu} \tag{8.50}$$
gelten muß. Um die Koeffizienten $d_{j\mu}$ zu finden, benutzen wir daß $\boldsymbol{\sigma n}$ drehinvariant ist und daher mit $\boldsymbol{J}$ vertauscht. Also gilt insbesondere $[J_\pm, \boldsymbol{\sigma n}] = 0$. Wir folgern
$$(\boldsymbol{\sigma n})\xi^\pm_{j\mu} = d_{j\mu}\xi^\mp_{j\mu} \Longrightarrow (\boldsymbol{\sigma n})J_\pm\xi^\pm_{j\mu} = d_{j\mu}J_\pm\xi^\mp_{j\mu}. \tag{8.51}$$
Da $J_\pm\xi_{j\mu} \sim \xi_{j,\mu\pm 1}$ ist, folgt unmittelbar, daß die Koeffizienten unabhängig von μ sind:
$$(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{n})\xi^\pm_{j\mu} = d_j\xi^\mp_{j\mu}. \tag{8.52}$$
Nun erinnern wir uns daran, daß die hermitesche Matrix $\boldsymbol{\sigma n}$ zu $\mathbb{1}$ quadriert und deshalb normerhaltend ist,
$$|d_j|^2\left(\xi^\mp_{j\mu}, \xi^\mp_{j\mu}\right) = \left(\boldsymbol{\sigma n}\,\xi^\pm_{j\mu}, \boldsymbol{\sigma n}\,\xi^\pm_{j\mu}\right) = \left(\xi^\pm_{j\mu}, \xi^\pm_{j\mu}\right) \tag{8.53}$$
Also ist d_j eine von μ unabhängige Phase, welche durch Umdefinition der ξ^- relativ zu den ξ^+ Eins gesetzt werden kann. Mit dieser Phasenkonvention folgt dann
$$\boldsymbol{\sigma n}\,\xi^\pm_{j\mu} = \xi^\mp_{j\mu}, \tag{8.54}$$
d.h. das $\boldsymbol{\sigma n}$ die Spinor-Harmonische $\xi^+_{j\mu}$ in $\xi^-_{j\mu}$ abbildet und umgekehrt.

8.3 Die radiale Dirac-Gleichung

Wir wenden nun den Dirac-Operator (8.27) auf die Spinoren

$$\psi_{j,\mu,k} = \begin{pmatrix} f(r)\xi^+_{j\mu} \\ g(r)\xi^-_{j\mu} \end{pmatrix}, \qquad k > 0, \tag{8.55}$$

an mit dem Resultat

$$H\psi_{j,\mu,k} = \begin{pmatrix} mc^2 + V & c(\boldsymbol{\sigma n})\left((p_r + \frac{\hbar}{\mathrm{i}r}) - \frac{\mathrm{i}\hbar k}{r}\right) \\ c(\boldsymbol{\sigma n})\left((p_r + \frac{\hbar}{\mathrm{i}r}) + \frac{\mathrm{i}\hbar k}{r}\right) & -mc^2 + V \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f\xi^+_{j\mu} \\ g\xi^-_{j\mu} \end{pmatrix}. \tag{8.56}$$

Benutzen wir die Formeln (8.54), so finden wir folgende Gleichungen für die radialen Funktionen (die Spinor-Harmonischen können wie erwartet gekürzt werden) f und g:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar c}{\mathrm{i}}\left(g' + \frac{1}{r}g\right) - \frac{\mathrm{i}c\hbar k}{r}g + \left(V + mc^2\right)f &= Ef \\ \frac{\hbar c}{\mathrm{i}}\left(f' + \frac{1}{r}f\right) + \frac{\mathrm{i}c\hbar k}{r}f + \left(V - mc^2\right)g &= Eg. \end{aligned} \tag{8.57}$$

Für $k < 0$ haben die Eigenfunktionen die Form

$$\psi_{j,\mu,k} = \begin{pmatrix} f(r)\xi^-_{j\mu} \\ g(r)\xi^+_{j\mu} \end{pmatrix}, \qquad k < 0. \tag{8.58}$$

Wiederum benutzt man (8.54) um die Gleichungen für die radialen Funktionen zu finden. Man findet exakt dieselben Gleichungen wie für $k > 0$, d.h. die gekoppelten gewöhnlichen Differentialgleichungen (8.57).

Wie in der Schrödingertheorie führen wir die neuen Radialfunktionen

$$F = rf \Rightarrow F' = rf' + f \quad \text{und} \quad G = \mathrm{i}rg \Rightarrow G' = \mathrm{i}rg' + ig \tag{8.59}$$

ein. Mit diesen reskalierten Funktionen vereinfachen sich die Differentialgleichungen zu

$$\begin{aligned} G' + \frac{k}{r}G &= \frac{mc^2 - E}{\hbar c}F + \frac{V}{\hbar c}F \\ F' - \frac{k}{r}F &= \frac{mc^2 + E}{\hbar c}G - \frac{V}{\hbar c}G. \end{aligned} \tag{8.60}$$

Gebundene Zustände sind normierbar. Für die reskalierten Funktionen bedeutet dies, daß

$$\int dr\,\left(|F|^2+|G|^2\right)=1 \tag{8.61}$$

gelten muß, damit der Zustand gebunden ist.

Asymptotisches Verhalten der Radialfunktionen:
Wir setzen

$$a_1=\frac{mc^2-E}{\hbar c}\quad\text{und}\quad a_2=\frac{mc^2+E}{\hbar c}. \tag{8.62}$$

Für gebundene Zustände mit $0<E<mc^2$ sind beide Zahlen positiv. Für $r\to\infty$ vereinfachen sich die Differentialgleichungen zu

$$G'\sim a_1F\quad\text{und}\quad F'\sim a_2G\Longleftrightarrow F''\sim a_1a_2F\quad\text{und}\quad G''\sim a_1a_2G. \tag{8.63}$$

Also haben die Lösungen der radialen Dirac-Gleichung die asymptotische Form

$$F\sim \mathrm{e}^{-ar}\quad\text{und}\quad G\sim\mathrm{e}^{-ar},\quad\text{wobei}\quad a=\sqrt{a_1a_2}=\frac{1}{\hbar c}\sqrt{m^2c^4-E^2} \tag{8.64}$$

ist. Wir wollen nun dieses asymptotische Verhalten abspalten und definieren neue Radialfunktionen gemäß

$$F=\mathrm{e}^{-ar}\tilde f\quad\text{und}\quad G=\mathrm{e}^{-ar}\tilde g. \tag{8.65}$$

Für die neuen Funktionen sehen die radialen Dirac-Gleichungen folgendermaßen aus

$$\tilde f'-\left(a+\frac{k}{r}\right)\tilde f=\left(a_2-\frac{V}{\hbar c}\right)\tilde g\quad,\quad \tilde g'-\left(a-\frac{k}{r}\right)\tilde g=\left(a_1+\frac{V}{\hbar c}\right)\tilde f. \tag{8.66}$$

Wir machen nun einen Potenzreihenansatz für die geschlängelten Radialfunktionen:

$$\tilde f=\sum_{s\in s_0+\mathbb{N}_0}c_sr^s\quad\text{und}\quad \tilde g=\sum_{s\in s_0+\mathbb{N}_0}c'_sr^s, \tag{8.67}$$

wobei $\mathbb{N}_0=\{0,1,2,\dots\}$ die natürlichen Zahlen (inklusive Null) bezeichnet. Um den Koeffizientenvergleich vorzunehmen, wollen wir jetzt annehmen, daß V das *Coulomb-Potential* von wasserstoffähnlichen Ionen ist,

$$\frac{V}{\hbar c}=-\frac{\mathrm{e}^2}{\hbar c}\frac{Z}{r}=-\frac{\alpha Z}{r}. \tag{8.68}$$

Hier bezeichnet α die dimensionslose Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante, $\alpha\sim 1/137$. Nun setzen wir die Potenzreihenansätze in die Dirac-Gleichung für die geschlängelten

Radialfunktionen ein. Durch Koeffizientenvergleich von r^{s-1} findet man folgendes lineare Gleichungssystem für die Koeffizienten,

$$\begin{aligned}(s-k)c_s - ac_{s-1} &= Z\alpha c'_s + a_2 c'_{s-1}\\ (s+k)c'_s - ac'_{s-1} &= -Z\alpha c_s + a_1 c_{s-1},\end{aligned}$$

beziehungsweise die folgenden Rekursionsrelationen:

$$\begin{pmatrix} s-k & -Z\alpha \\ Z\alpha & s+k \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_s \\ c'_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & a_2 \\ a_1 & a \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_{s-1} \\ c'_{s-1} \end{pmatrix}. \tag{8.69}$$

Wegen $a = a_1 a_2$ hat die Matrix auf der rechten Seite eine verschwindende Determinante und ist singulär. Deshalb hat sie einen (links) Eigenvektor mit Eigenwert Null:

$$(a, -a_2)\begin{pmatrix} a & a_2 \\ a_1 & a \end{pmatrix} = 0. \tag{8.70}$$

Multiplizieren wir also (8.69) skalar von links mit $(a, -a_2)$, so finden wir folgende Beziehung zwischen den c und c':

$$\Big[(s-k)a - Z\alpha a_2\Big]c_s - \Big[(s+k)a_2 + Z\alpha a\Big]c'_s = 0. \tag{8.71}$$

Schlussendlich müssen wir noch die *Abbruchbedingung* für s_0 studieren: für $s = s_0$ müssen die c_{s-1} und c'_{s-1}, und damit die rechte Seite in (8.69), verschwinden. Deshalb muß die Determinante der Matrix auf der linken Seite in (8.69) Null sein:

$$s_0^2 = k^2 - Z^2\alpha^2 \Longrightarrow s_0 = \sqrt{k^2 - Z^2\alpha^2}. \tag{8.72}$$

Hier müssen wir die positive Wurzel wählen, da $\tilde{f}$ und $\tilde{g}$ quadratintegrierbar sein müssen. Wir sehen also, daß offensichtlich

$$1 - Z^2\alpha^2 > 0 \quad \text{oder} \quad Z < \alpha^{-1} \sim 137 \tag{8.73}$$

gelten muß, damit wir mit unserer Methode gebundene Zustände konstruieren können.

Vermittels der Rekursionsformel (8.69) kann man untersuchen wie die c_s für große s anwachsen. Man findet, daß die geschlängelten Funktionen im Unendlichen exponentiell anwachsen, $\sim \mathrm{e}^{2ar}$, falls die Reihe (8.67) nicht abbricht. Wir müssen also fordern, daß für $s > s_1$, wobei

$$s_1 = s_0 + n_r \quad \text{mit} \quad n_r \in \mathbb{N}_0 \tag{8.74}$$

ist, die c_s und c'_s verschwinden. Für $s-1=s_1$ ist die linke Seite in (8.69) Null, so dass

$$ac_{s_1}+a_2c'_{s_1}=0 \tag{8.75}$$

gelten muß. Für die folgenden Betrachtungen wollen wir eine Fallunterscheidung vornehmen. Zuerst betrachten wir positive n_r.

$n_r>0$:
In diesem Fall gilt die Gleichung (8.71)

$$\big((s_1-k)a-Z\alpha a_2\big)c_{s_1}-\big((s_1+k)a_2+Z\alpha a\big)c'_{s_1}=0. \tag{8.76}$$

Man rechnet nun leicht nach, daß die beiden linearen Gleichungen (8.75,8.76) nur dann eine Lösung zulassen (Determinantenbedingung), wenn

$$2as_1=Z\alpha(a_2-a_1)\Longleftrightarrow s_1^2(m^2c^4-E^2)=Z^2\alpha^2E^2 \tag{8.77}$$

gilt. Dies ist gleichbedeutend mit

$$E^2=\frac{m^2c^4s_1^2}{Z^2\alpha^2+s_1^2} \tag{8.78}$$

wobei wir uns daran erinnern müssen, daß

$$s_1=n_r+s_0=n_r+\sqrt{k^2-Z^2\alpha^2} \tag{8.79}$$

gilt. Setzen wir dies in die obige Formel für das Quadrat der Energie ein, so ergibt sich

$$\frac{E}{mc^2}=\left(1+\frac{Z^2\alpha^2}{\big(n_r+\sqrt{k^2-Z^2\alpha^2}\big)^2}\right)^{-1/2}>0 \qquad n_r>0. \tag{8.80}$$

Diese Formel wurde von Arnold Sommerfeld bereits im Jahre 1916, also etwa 10 Jahre vor Entdeckung der Quantenmechanik durch Heisenberg und Schrödinger und insbesondere der Dirac-Gleichung, gefunden. Nachdem wir die Energie-Eigenwerte für positive Quantenzahlen n_r bestimmt haben, betrachten wir nun $n_r=0$.

$n_r=0$:
In diesem zweiten Fall ist also $s_1=s_0$ und neben (8.75), was nach Division durch $\sqrt{a_2}$ folgendermaßen geschrieben werden kann,

$$\sqrt{a_1}c_{s_0}+\sqrt{a_2}c'_{s_0}=0, \tag{8.81}$$

haben wir wegen (8.69) jetzt statt (8.76) die stärkere zweite Bedingung

$$(s_0 - k)c_{s_0} - Z\alpha c'_{s_0} = 0. \tag{8.82}$$

Diese beiden Gleichungen haben nur eine nichtverschwindende Lösung falls die Determinante der entsprechenden Matrix verschwindet, was äquivalent zu

$$k = s_0 + \sqrt{\frac{a_1}{a_2}} Z\alpha \tag{8.83}$$

ist. Aus der asymptotischen Form der Lösungen am Ursprung für $n_r = 0$ sieht man, dass die Wellenfunktionen nur für $k > 0$ normierbar sind. Um die Energien der gebundenen Zustände zu bestimmen, erinnern wir uns an die Definition der a_1, a_2. Aus dieser folgt unmittelbar, dass

$$\frac{a_1}{a_2} = \frac{1-\epsilon}{1+\epsilon}, \quad \text{wobei} \quad \epsilon = E/mc^2 \tag{8.84}$$

ist. Dies setzten wir in die nach a_1/a_2 aufgelöste Formel für k ein und finden nach einer einfachen Rechnung

$$\frac{E}{mc^2} = \sqrt{1 - \frac{Z^2\alpha^2}{k^2}} \quad \text{für} \quad s_0 = s_1. \tag{8.85}$$

Diese Formel stimmt mit der Sommerfeldschen Formel (8.80) überein wenn wir in dieser $n_r = 0$ setzen. Wir haben also als Schlussresultat die wohlbekannte *Feinstruktur-Formel*

$$\frac{E}{mc^2} = \left(1 + \frac{Z^2\alpha^2}{\left(n_r + \sqrt{k^2 - Z^2\alpha^2}\right)^2}\right)^{-1/2} \qquad \begin{array}{ll} n_r = 0: & k = 1, 2, 3, \ldots \\ n_r > 0: & k = \pm 1, \pm 2, \ldots. \end{array} \tag{8.86}$$

Sie ist aus der Diracschen Theorie des Elektrons gleichzeitig von Gordon und Darwin abgeleitet worden.

8.4 Wasserstoff Spektrum und Feinstruktur

Um Anschluss an das *nichtrelativistische Resultat* zu gewinnen setzen wir jetzt $n = n_r + |k|$. Die natürliche Zahl n entspricht der Hauptquantenzahl in der Schrödingerschen Theorie des Wasserstoffatoms. Nach der Ersetzung finden wir

$$\frac{E}{mc^2} = \left(1 + \frac{Z^2\alpha^2}{\left(n - |k| + \sqrt{k^2 - Z^2\alpha^2}\right)^2}\right)^{-1/2}, \quad n = 1, 2, 3\ldots, \quad |k| = 1, 2, 3\ldots. \tag{8.87}$$

Wir entwickeln diesen Ausdruck für die Eigenwerte des Dirac-Hamilton-Operators nach Potenzen von $Z\alpha$,

$$E = mc^2\left(1 - \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} + \frac{3}{8}\frac{(Z\alpha)^4}{n^4} - \frac{1}{2}\frac{(Z\alpha)^4}{n^3}\frac{1}{j+\frac{1}{2}} + O\left((Z\alpha)^6\right)\right), \tag{8.88}$$

mit

$$|k| = j + \tfrac{1}{2}, \qquad n \in j + \tfrac{1}{2} + \{0, 1, 2, 3, \dots\}. \tag{8.89}$$

Man sieht, dass alle Zustände, mit Ausnahme derer mit $n = j + \frac{1}{2}$, doppelt entartet sind.

Die Energieeigenwerte hängen also nur von der Hauptquantenzahl n, von $|k|$ und von der Kernladungszahl Z ab. Für verschwindendes Potential ($Z = 0$) ist der Energieeigenwert mc^2. Mit Potential schließen die gebundenen Elektronenzustände an das bei mc^2 beginnende Kontinuum positiver Energie an. Durch „Aufdrehen des Potentials" werden Elektronenzustände aus dem positiven Energiekontinuum in die Energielücke zwischen mc^2 und $-mc^2$ als gebundene Zustände „hineingezogen". Die *Ionisationsgrenze* des Atoms liegt offensichtlich bei mc^2 und deshalb ist die Ionisierungsenergie gleich $mc^2 - E$ und entsprechend ist die Bindungsenergie

$$E_{\text{B}} = E - mc^2 = mc^2\left(1 + \frac{Z^2\alpha^2}{\left(n - |k| + \sqrt{k^2 - Z^2\alpha^2}\right)^2}\right)^{-1/2} - mc^2. \tag{8.90}$$

Für $n = 1$ und $j = \frac{1}{2}$ ($|k| = 1$) ist

$$E_{\text{B}} = mc^2\left(\sqrt{1 - Z^2\alpha^2} - 1\right). \tag{8.91}$$

Für $Z\alpha = 1$ ist $E = 0$ oder $E_{\text{B}} = -mc^2$ und für $Z > 1/\alpha$ werden die Energien imaginär. Dieses seltsame Ergebnis wird als *Instabilität des Vakuums* interpretiert. Bei diesen starken Feldern werden spontan Elektronen (Positronen) aus dem Vakuum erzeugt. Dieser Vorgang kann natürlich nicht mehr im Rahmen einer Einteilchentheorie erklärt werden.

Für die numerischen Werte der Energien setzen wir für die Ruhemasse des Elektrons $mc^2 = 0.5110041\,\text{MeV}$ ein. Die Niveaus mit gleichem $|k|$ aber verschiedenem Bahndrehimpuls ℓ sind entartet. Für $Z\alpha \ll 1$ sind die Bindungsenergien, gemessen in Einheiten der Elektronen-Ruheenergie

$$\frac{E - mc^2}{mc^2} \sim -(Z\alpha)^2\left(\frac{1}{2n^2} + \frac{(Z\alpha)^2}{2n^3}\left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right)\right). \tag{8.92}$$

Die relativistischen Korrekturen für die Energieniveaus im Coulombfeld sind $O(Z^2\alpha^2)$

verglichen mit den nichtrelativistischen Energien und sind nur für kleine Hauptquantenzahlen und schwere Kerne von Bedeutung. Die Zustände bezeichnet man mit nL_j. Die tiefsten Niveaus sind in der nächsten Tabelle enthalten.

In der Abbildung nach der Tabelle sind die tiefsten Energieniveaus eingezeichnet. Wir sehen hier explizit, dass die Zustände mit derselben Hauptquantenzahl und demselben Bahndrehimpuls verschiedene Energien haben, falls der Gesamtdrehimpuls j (oder k) verschieden ist. Die Bohrschen Niveaus spalten in Komponenten auf, deren Gesamtheit man als *Feinstruktur* bezeichnet. Die möglichen Dipolübergänge von den Zuständen mit $n = 3$ zu denjenigen mit $n = 2$ sind ebenfalls dargestellt. Der Übergang von $j = 5/2$ nach $j = 1/2$ ist in der Dipolnäherung verboten.

Wir erinnern uns an die Relationen zwischen den Quantenzahlen

$$
\begin{aligned}
&n_r \in \mathbb{N}_0, \quad k \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}, \quad |k| = j + \frac{1}{2} \\
&n = n_r + |k| = n_r + j + \frac{1}{2} \in \mathbb{N} \\
&j = \ell + \frac{1}{2} \Rightarrow k = \ell + 1 = j + \frac{1}{2} > 0 \\
&j = \ell - \frac{1}{2} \Rightarrow k = -\ell = -(j + \frac{1}{2}) < 0
\end{aligned}
$$

Bezeichnung	n	ℓ	j	n_r	k	E_B[eV]
$1s_{1/2}$	1	0	1/2	0	1	−13.606
$2s_{1/2}$	2	0	1/2	1	1	−3.402
$2p_{1/2}$	2	1	1/2	1	−1	−3.402
$2p_{3/2}$	2	1	3/2	0	2	−3.401
$3s_{1/2}$	3	0	1/2	2	1	−1.512
$3p_{1/2}$	3	1	1/2	2	−1	−1.512
$3p_{3/2}$	3	1	3/2	1	2	−1.512
$3d_{3/2}$	3	2	3/2	1	−2	−1.512
$3d_{5/2}$	3	2	5/2	0	3	−1.512
$4s_{1/2}$	4	0	1/2	3	1	−0.850

(8.93)

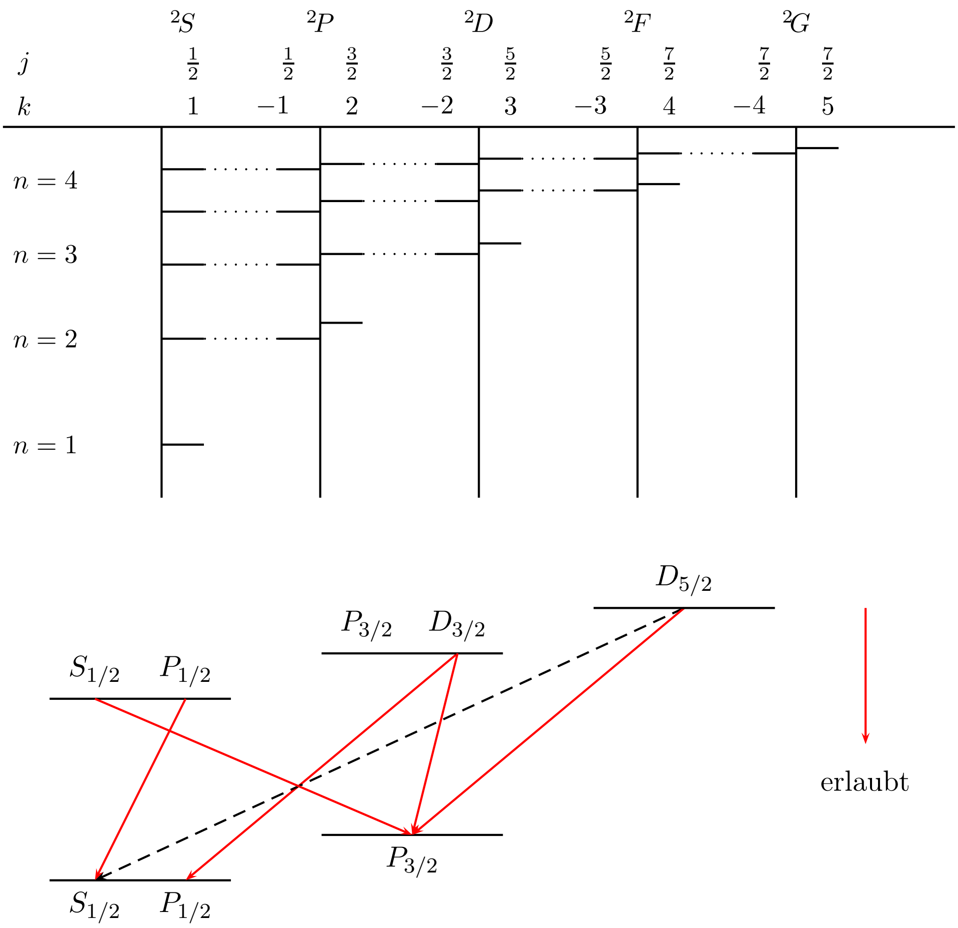


Abbildung 8.1: *Das Spektrum des Wasserstoffs in der Diractheorie und erlaubte Übergänge von $n = 3$ nach $n = 2$.*

Beim Wasserstoffatom hat der Zustand mit $n = 2$ in der Feinstruktur drei Unterniveaus und der Zustand mit $n = 3$ fünf Unterniveaus. Mehrere Übergänge sind aber durch Erhaltungssätze verboten, so dass von den 15 möglichen nur 7 Linien auftreten. Als Dirac seine Theorie aufstellte, konnten im Experiment nur zwei Komponenten sicher beobachtet werden. Eine dritte machte sich als Verbreiterung einer der beiden Komponenten bemerkbar.

Weitere, als *Lamb-Verschiebungen* bezeichnete Aufspaltungen ergeben sich durch die Wechselwirkung des Elektrons mit Fluktuationen des elektromagnetischen Feldes im Atom. Aufgrund der Lamb-Verschiebung werden alle s-Zustände nach oben versetzt. Zum Beispiel hat der $2S_{1/2}$ Zustand eine um 1051MHz höhere Energie als der $2P_{1/2}$ Zustand. Dieser Frequenzbereich ist der Mikrowellenspektroskopie gut zugänglich. Der Versuch von E. Lamb und C. Retherford (1947), in welchem diese Verschiebung experimentell nachgewiesen wurde, markierte den Anfang der *Quantenelektrodynamik*. Die Lamb-Verschiebung insbesondere der s-Zustände informiert über die Physik kleinster Dimensionen, da die Wellenfunktionen dieser Zustände im Kern nicht verschwinden. Als weiteres muß man noch den Kernspin berücksichtigen. Die Wechselwirkung zwischen den magnetischen Momenten des Elektrons und des Atomkerns führt zur weiteren Aufspaltung der Feinstrukturniveaus in Komponenten, die man zusammenfassend als *Hyperfeinstruktur* bezeichnet. Die wohlbekannte, und in der Radioastronomie bedeutende 21cm Linie des Wasserstoffs rührt von der Hyperfeinaufspaltung des s-Niveaus. Die seit etwa 1979 verfügbare Technik

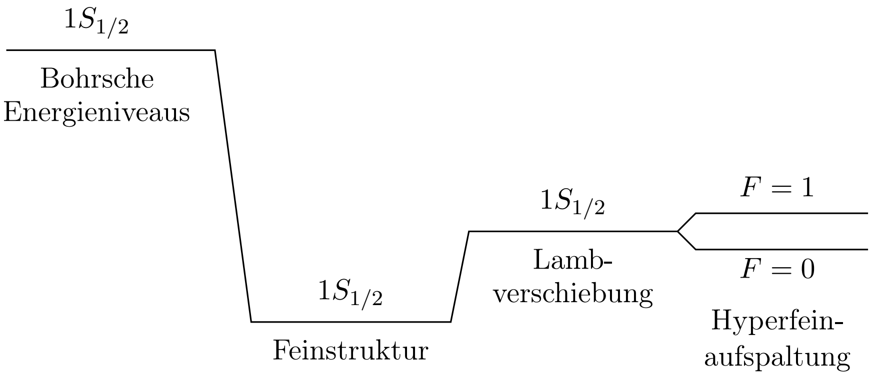


Abbildung 8.2: *Die Feinstruktur, Lamb-Verschiebung und Hyperfeinstruktur des Grundzustandes.*

der Laser-Spektroskopie hat die Auflösung der Spektrallinien wesentlich verbessert, da sie die Anwendung neuer Methoden (durchstimmbare Farblaser, Sättigungspektroskopie, Polarisationsspektroskopie) zur Vermeidung der Doppler-Verbreiterung ermöglicht. Die Auflösung der Hyperfeinstruktur gelingt mit der 2-Photonen-Spektroskopie.

8.5 Aufgaben zu Kapitel 8

Aufgabe 8.1: Diracgleichung für Topfpotential

Lösen Sie die Dirac-Gleichung für ein anziehendes Topfpotential mit Tiefe V_0 und Radius a. Was sind die Anschluss-Bedingungen bei $r=a$? Finden Sie einen explizite Ausdruck für die kleinste Tiefe V_0, für die ein Teilchen der Masse m gebunden ist.

Aufgabe 8.2: Relativistisches Elektron im konstanten Magnetfeld

Wir betrachten die zeitunabhängige Dirac-Gleichung

$$E\psi(\boldsymbol{x}) = H\psi(\boldsymbol{x})$$

in einem zeitunabhängigen 4-er Potential $A^\mu(\boldsymbol{x}) = (0, 0, Bx^1, 0)$ mit konstantem B. Zeigen Sie, dass für Lösungen der Form $\psi = \exp(\mathrm{i}p_2x^2 + \mathrm{i}p_3x^3)u(x^1)$ die Energien gegeben sind durch

$$E^2 = m^2 + p_3^2 + (2n+1)|eB| \pm eB, \quad n \in \{0, 1, 2, \dots\}\,.$$

Hinweis: wenn Sie eine Darstellung für die γ^μ brauchen, dann benutzen Sie die Dirac-Darstellung.

Aufgabe 8.3: Gesamtdrehimpuls

In der Vorlesung wurden Generatoren der Lorentztransformationen eingeführt, welche die Kommutatorrelationen

$$[\Lambda_i, \Lambda_j] = -\epsilon_{ijk}\Omega_k\ , \quad [\Omega_i, \Omega_j] = \epsilon_{ijk}\Omega_k\ , \quad [\Lambda_i, \Omega_j] = \epsilon_{ijk}\Lambda_k \quad \text{mit } i, j, k \in \{1, 2, 3\}$$

erfüllen. Im Folgenden fassen wir diese Generatoren in $\Lambda_{\mu\nu} = -\Lambda_{\nu\mu}$ zusammen: $\Lambda_{0i} = \Lambda_i$ und $\Lambda_{ij} = \mathrm{i}\epsilon_{ijk}\Omega_k$. Dann lassen sich die Kommutatorrelationen schreiben als

$$[\Lambda_{\mu\nu}, \Lambda_{\rho\sigma}] = \mathrm{i}(g_{\mu\rho}\Lambda_{\nu\sigma} + g_{\nu\sigma}\Lambda_{\mu\rho} - g_{\mu\sigma}\Lambda_{\nu\rho} - g_{\nu\rho}\Lambda_{\mu\sigma})\ .$$

Zeigen Sie, dass

(a) $M_{\mu\nu} = (x_\mu p_\nu - x_\nu p_\mu)$, $\Sigma_{\mu\nu} = \frac{1}{4\mathrm{i}}[\gamma_\mu, \gamma_\nu]$ und damit auch $J_{\mu\nu} = M_{\mu\nu} + \Sigma_{\mu\nu}$ dieselben Kommutatorrelationen erfüllen.

(c) Welche Kommutatorrelationen erfüllen die Komponenten

$$J_i = \frac{1}{2}\epsilon_{ijk}J_{jk}\ , \qquad \text{mit } i, j, k \in \{1, 2, 3\}?$$

(d) Welche Interpretation hat dann wohl

$$S_i = \frac{1}{2}\epsilon_{ijk}\Sigma_{jk}?$$

Kapitel 9

Zweite Quantisierung

Eine Umformulierung der Theorie für identische Teilchen - etwas irreführend als *zweite Quantisierung* bezeichnet (ein besserer Name wäre Besetzungszahldarstellung) - erzeugt die geforderte Symmetrieeigenschaften für identische Bosonen oder Fermionen schon algebraisch. Dabei kann die Anzahl Teilchen ändern und diese Flexibilität ist in einer Quantenfeldtheorie der Festkörper oder Elementarteilchen notwendig. Es gibt Prozesse bei denen Elektronen, Positronen, Photonen, Phononen oder andere (Quasi)Teilchen erzeugt oder vernichtet werden können.

Diese Besetzungszahldarstellung soll hier dargelegt werden. Ausgangspunkt unserer Betrachtungen ist der Hilbert-Raum $\mathcal{H}$ eines Teilchens und die Wahl einer beliebigen *Orthonormalbasis* in $\mathcal{H}$,

$$|\xi_i\rangle \in \mathcal{H}, \qquad i \in \mathbb{N}. \tag{9.1}$$

In Anwendungen gibt es oft ausgezeichnete Basissysteme. Dies ist vorerst jedoch irrelevant. Aufgrund unserer Betrachtungen im Abschnitt (2.2) wissen wir, dass für ein System aus N *identischen* Teilchen nur total antisymmetrische oder symmetrischen Wellenfunktionen auftreten. Die Zustandsraum für N identische Teilchen ist ein Unterraum von

$$\mathcal{H}^{(N)} = \underbrace{(\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \cdots \otimes \mathcal{H})}_{\text{N}-\text{mal}} \tag{9.2}$$

also des durch Abschließung der von Vektoren der Form

$$|\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N\rangle \equiv |\xi_1\rangle \otimes |\xi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\xi_N\rangle \tag{9.3}$$

aufgespannten linearen Raums.

9.1 Identische Teilchen

Identische Bosonen: Wir entwickeln den Formalismus zunächst für Bosonen und gehen von den in Abschnitt (2.2) untersuchten symmetrischen Zuständen für N Teilchen aus. Wie dort bemerkt wurde, ist es für diese Zustände nicht möglich zu sagen, welchem der Teilchen eine durch bestimmte Quantenzahlen vorgegebene Eigenschaft zukommt und deshalb ist der Hilbert-Raum das symmetrische N-fache Tensorprodukt

$$\mathcal{H}_s^{(N)} = \big(\underbrace{\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}}_{\text{N}-\text{mal}}\big)_s. \tag{9.4}$$

d.h. die Abschließung des linearen Raumes aller endlichen Linearkombinationen aus vollständig symmetrischen Vektoren der Form

$$|\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_N}\rangle_s = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\pi \in S_N} P(\pi) |\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_N}\rangle \tag{9.5}$$

Es ist wichtig zu wissen, ob sich mehrere Teilchen im gleichen Zustand befinden und wenn ja, wieviele das sind. Es muss möglich sein, den Zustand durch Angabe der *Besetzungszahlen* für die in Frage kommenden Eigenschaften zu charakterisieren. Wir bezeichnen die zugehörige Besetzungszahl mit $n_i \equiv n(\xi_i)$. Damit ist also die Zahl der Teilchen mit der Einteilcheneigenschaft (Quantenzahl(en)) ξ_i gemeint. Diese Besetzungszahlen kann man in eindeutiger Weise finden. Betrachten wir zum Beispiel den symmetrischen Dreiteilchenzustand

$$|\xi_2, \xi_2, \xi_6\rangle_s = \frac{2}{\sqrt{3!}} \left(|\xi_2, \xi_2, \xi_6\rangle + |\xi_2, \xi_6, \xi_2\rangle + |\xi_6, \xi_2, \xi_6\rangle\right). \tag{9.6}$$

Die Besetzungszahlen ungleich Null sind

$$n_2 = 2 \quad \text{und} \quad n_6 = 1. \tag{9.7}$$

Da die Besetzungszahlen die symmetrischen Zustände eindeutig charakterisieren, wählen wir die Besetzungszahldarstellung für die Zustände:

$$|n_1 n_2 \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!\, n_2! \cdots}} \big|\, \underbrace{\xi_1, \dots, \xi_1}_{n_1-\text{mal}}, \underbrace{\xi_2, \dots, \xi_2}_{n_2-\text{mal}}, \xi_3, \dots \big\rangle_s \tag{9.8}$$

Der Normierungsfaktor sorgt dafür, dass die Zustände $|n_1, n_2, \dots\rangle$ auf Eins normiert sind. Zum Beispiel ist

$$|0, 2, 0, 0, 0, 1, 0, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \big|\xi_2, \xi_2, \xi_6\big\rangle_s \tag{9.9}$$

mit dem symmetrischen Zustand (9.6) auf Eins normiert.

Die Vollständigkeitsrelation in der Besetzungszahldarstellung hat die Form

$$\mathbb{1} = \sum_{n_1,n_2,\dots} |n_1, n_2, \dots\rangle\langle n_1, n_2, \dots|. \tag{9.10}$$

die Summe läuft über alle Zustände mit fester Teilchenzahl N. Lassen wir nun N der Reihe nach alle Werte in $\mathbb{N}_0$ annehmen, so erhalten wir für

- $N = 0$ den Vakuumzustand $|0\rangle = |0, 0, \dots\rangle$
- $N = 1$ die Einteilchenzustände mit $n_i = 1$: $|0, \dots 0, 1, 0, \dots, 0\rangle = |\xi_i\rangle_s$
- $N = 2$ die Zweiteilchenzustände mit $n_i = n_j = 1$ bzw. $n_i = 2$:

$$\begin{aligned}
|0, \dots 0, 1, 0, \dots, 0, 1, 0 \dots, 0\rangle &= |\xi_i \xi_j\rangle_s \\
|0, \dots 0, 2, 0, \dots, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |\xi_i \xi_j\rangle_s
\end{aligned}$$

Die Charakterisierung der Zustände durch sehr viele n_i, die zum großen Teil verschwinden, ist etwas unpraktisch. Hier lohnt es sich die Analogie zum Oszillatorsystem zunutze zum machen. Wie beim Oszillator kann jeder Zustand beliebig oft besetzt werden und die Besetzungszahl ist der Eigenwert des Besetzungszahloperators

$$N_i = a_i^\dagger a_i \quad \text{mit} \quad a_i = a(\xi_i). \tag{9.11}$$

Wir verlangen wie beim Oszillator folgende algebraischen Regeln für die Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren,

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0, \tag{9.12}$$

so dass $a_i^\dagger$ die Besetzungszahl N_i um Eins erhöht und a_i um Eins erniedrigt,

$$[N_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij} a_j^\dagger \quad \text{und} \quad [N_i, a_j] = -\delta_{ij} a_j. \tag{9.13}$$

Die Fockzustände können dann aus dem Vakuum durch Anwendung der Erzeugungsoperatoren aufgebaut werden,

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!\, n_2! \cdots}}\, a_1^{\dagger n_1} a_2^{\dagger n_2} \cdots |0\rangle. \tag{9.14}$$

Ein Erzeugungsoperator $a_i^\dagger$ fügt zu einem Zustand mit N ununterscheidbaren Bosonen ein weiteres Boson im Einteilchenzustand $|\xi_i\rangle$ so hinzu, dass es von den übrigen Bosonen ununterscheidbar ist,

$$a_i^\dagger|n_1,\dots,n_i,\dots\rangle = \sqrt{n_i+1}\,|n_1,\dots,n_i+1,\dots\rangle. \tag{9.15}$$

Entsprechend entfernt a_i ein Boson aus dem N-Teilchenzustand

$$a_i|n_1,\dots,n_i,\dots\rangle = \sqrt{n_i}\,|n_1,\dots,n_i-1,\dots\rangle \tag{9.16}$$

Insbesonders wird das Vakuum wird von allen Absteigeoperatoren annihiliert,

$$a_1|0\rangle = a_2|0\rangle = \dots = 0. \tag{9.17}$$

Man beweist schnell, dass der zum Erzeugungsoperator $a_i^\dagger$ adjungierte Operator der Vernichtungsoperator a_i ist. Der nicht-negative hermitesche Operator der *gesamten* Teilchenzahl

$$N = \sum_i N_i \tag{9.18}$$

hat als Eigenwert die Zahl der vorhandenen Teilchen.

Identische Fermionen: Eine Besetzungszahldarstellung für Fermionen kann in ähnlicher Weise entwickelt werden. Der wesentliche Unterschied zu einem System identischer Bosonen besteht darin, dass der Hilbert-Raum für N identische Fermionen das total *antisymmetrische* N-fache Tensorprodukt

$$\mathcal{H}_a^{(N)} = \underbrace{\big(\mathcal{H}\otimes\mathcal{H}\otimes\dots\otimes\mathcal{H}\big)_a}_{\text{N}-\text{mal}} \tag{9.19}$$

ist, d.h. die Abschließung des linearen Raumes aller endlichen Linearkombinationen aus vollständig antisymmetrischen Vektoren der Form

$$|\xi_{i_1},\dots,\xi_{i_N}\rangle_a = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\pi\in S_N}\operatorname{sgn}(\pi)P(\pi)|\xi_{i_1},\dots,\xi_{i_N}\rangle. \tag{9.20}$$

Wegen des Pauliprinzips können alle Besetzungszahlen nur die Werte 0 und 1 annehmen. Mit Oszillatoroperatoren erhält man die Besetzungszahldarstellung, wenn in den algebraischen Regeln für Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren der Kommutator durch den Antikommutator $\{A,B\} = AB + BA$ ersetzt wird,

$$\{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \qquad \{a_i, a_j\} = \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0. \tag{9.21}$$

Man kann sich mit folgender Überlegung davon überzeugen, das diese Algebra zur geforderten Antisymmetrie der Zustände führt: Wir betrachten zunächst einen Zustand, bei dem die i-te Besetzungszahl verschwindet,

$$|\dots, n_i = 0, \dots\rangle, \tag{9.22}$$

und fügen ein Teilchen in diesen Zustand hinzu,

$$|\dots, n_i = 1, \dots\rangle = a_i^\dagger |\dots, n_i = 0, \dots\rangle. \tag{9.23}$$

Fügt man noch ein Teilchen in diesen Zustand hinzu, so darf es den entsprechenden Zustand nicht geben, andernfalls wären zwei identische Fermionen im gleichen Zustand. Es muss ihm als die Null im Zustandsraum entsprechen,

$$0 = a_i^\dagger a_i^\dagger \big|\dots, n_i = 0, \dots\big\rangle = \frac{1}{2}\{a_i^\dagger, a_i^\dagger\}\big|\dots, n_i = 0, \dots\big\rangle. \tag{9.24}$$

Für $\{a_i^\dagger, a_i^\dagger\} = 0$ ist die Gleichung offenbar erfüllt. Durch Konjugation findet man daraus $\{a_i, a_i\} = 0$. Um die verbleibenden Relationen zu testen betrachten wir den Anzahloperator

$$N_i = a_i^\dagger a_i. \tag{9.25}$$

Für seinen Kommutator mit $a_j^\dagger$ finden wir

$$[N_i, a_j^\dagger] = a_i^\dagger a_i a_j^\dagger - a_j^\dagger a_i^\dagger a_i = a_i^\dagger \delta_{ij} - a_i^\dagger a_j^\dagger a_i - a_j^\dagger a_i^\dagger a_i = \delta_{ij} a_i^\dagger. \tag{9.26}$$

und das führt auf die korrekten N_i-Eigenwerte für die beiden Eigenzustände mit $n_i \in \{0, 1\}$.

9.2 Fockraum

Wir fassen unsere bisherigen Resultate zusammen und formalisieren sie weiter. Der Zustandsraum für *identische* Bosonen oder *identische* Fermionen ist der Fockraum über dem entsprechenden Einteilchen-Hilbert-Raum $\mathcal{H}$

$$\mathcal{F}_\epsilon(\mathcal{H}) = \mathcal{H}^{(0)} \oplus \mathcal{H}_\epsilon^{(1)} \oplus \mathcal{H}_\epsilon^{(2)} \oplus \mathcal{H}_\epsilon^{(3)} \cdots = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_\epsilon^{(N)}, \qquad \epsilon \in \{s, a\}. \tag{9.27}$$

Hierbei beschreibt der eindimensionale Vektorraum $\mathcal{H}^{(0)} = \mathbb{C}$ das 'Nullteilchensystem'. Der normierte Basisvektor dieses Raumes wird als *Vakuum* bezeichnet. Der Einteilchenraum $\mathcal{H}_\epsilon^{(1)}$ ist gleich dem unterliegenden Einteilchen Hilbert-Raum $\mathcal{H}$. Für Bosonen mit $\epsilon = s$ ist $\mathcal{H}_\epsilon^{(N)}$ das N-fache symmetrisierte Tensorprodukt des Einteichen Hilbert-Raums $\mathcal{H}$ und für Fermionen mit $\epsilon = a$ das N-fache antisymmetrische Tensorprodukt. Die Elemente des Fockraum sind also Folgen von Vektoren

$$F = (F^{(0)}, F^{(1)}, F^{(2)}, F^{(3)}, \dots) \tag{9.28}$$

mit $F^{(N)}$ aus dem N-Teilchenraum $\mathcal{H}_\epsilon^{(N)}$. Zunächst betrachtet man nur Folgen mit einer endlichen Anzahl von Gliedern ungleich Null. Der Fockraum $\mathcal{F}_\epsilon(\mathcal{H})$ ist ein Vektorraum auf dem die Addition und Multiplikation mit einer komplexen Zahl gliedweise definiert ist,

$$(F+G)^{(N)} = F^{(N)} + G^{(N)} \quad \text{und} \quad (\alpha F)^{(N)} = \alpha F^{(N)}, \qquad \forall\, N. \tag{9.29}$$

Das Skalarprodukt auf $\mathcal{H}$ definiert ein Skalarprodukt auf jedem Produktraum $\mathcal{H}_\epsilon^{(N)}$ und entsprechend auf dem Folgenraum

$$\big(F, G\big) = \sum_{N=0}^{\infty} \big(F^{(N}, G^{(N)}\big)_{\mathcal{H}_\epsilon^{(N)}} \tag{9.30}$$

Der Fockraum ist die Abschließung der obigen Vektormenge bezüglich der von diesem Skalarpodukt erzeugten Norm, also die Gesamtheit aller Folgen (9.28), die der Bedingung

$$\|F\|^2 = \big(F, F\big) = \sum_{N=0}^{\infty} \|F^{(N)}\|^2_{\mathcal{H}_\epsilon^{(N)}} < \infty \tag{9.31}$$

genügen, und keiner weiteren Einschränkung. Im Fockraum sind Vektoren in verschiedenen Teilchenzahlsektoren senkrecht zueinander.

Auf dem Fockraum lassen sich Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren definieren, die zwischen Sektoren verschiedener Teilchenzahl transformieren. Es handelt sich um unendlich viele Kopien der Leiteroperatoren für den harmonischen Oszillator. Für einen beliebigen 'Einteilchenzustand' $f \in \mathcal{H}$ definieren wir die Operatoren $a^\dagger(f)$ und $a^\dagger(f)$ im Fockraum

$$\begin{aligned} a(f): &\quad \mathcal{H}_s^{(N)} \longrightarrow \mathcal{H}_\epsilon^{(N-1)}, \qquad \mathcal{H}_\epsilon^{(0)} \longrightarrow 0 \\ a^\dagger(f): &\quad \mathcal{H}_\epsilon^{(N)} \longrightarrow \mathcal{H}_\epsilon^{(N+1)} \end{aligned} \tag{9.32}$$

Diese Operatoren wirken auf die Zustände $|\xi_1, \xi_2, \dots\rangle_\epsilon$ wie folgt,

$$\begin{aligned} a(f)|\xi_1, \dots, \xi_N\rangle_\epsilon &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N} (\pm 1)^{i-1} \langle f|\xi_i\rangle \left|\xi_1, \dots, \check{\xi}_i, \dots, \xi_N\right\rangle_\epsilon \\ a^\dagger(f)|\xi_1, \dots, \xi_N\rangle_\epsilon &= \sqrt{N+1} \left|f, \xi_1, \dots, \xi_N\right\rangle_\epsilon \end{aligned}$$

Das $(+)$-Vorzeichen gilt für Bosonen und das $(-)$-Vorzeichen für Fermionen.

9.2.1 Mehrteilchenoperatoren

Wir versuchen nun die wichtigen Operatoren der Mehrteilchenphysik im Fockraum darzustellen. Dadurch erhalten wir die Möglichkeit, eine Theorie von wechselwirkenden Teilchen zu formulieren. Wir betrachten zunächst *Einteilchenoperatoren*[1]

$$A = \sum_i A^{(1)}(i). \tag{9.33}$$

Der Summand $A(j)$ wirkt nur auf dem Einteilchen-Zustandsraum des j'ten Teilchens. Schreiben wir die Fockzustände in der ursprünglichen Form als direkte Produkte von Einteilchenzuständen, so wirkt jeder Summand in A nur auf einen der Faktoren. Er kann daher durch Einteilchenmatrixelemente dargestellt werden,

$$A^{(1)} = \sum_{ij} |\xi_i\rangle\langle\xi_i|A^{(1)}|\xi_i\rangle\langle\xi_i|. \tag{9.34}$$

Angewandt auf einen als direktes Produkt geschriebenen Mehrteilchket entfernt $\langle\xi_i|$ eine zugehörigen Faktor $|\xi_i\rangle$. Wegen des Faktors $|\xi_i\rangle$ wird er durch $|\xi_i\rangle$ ersetzt. Im der Besetzungszahldarstellung bedeutet dies, dass ein Teilchen im Zustand $|\xi_i\rangle$ entfernt und eines im Zustand $|\xi_i\rangle$ hinzugefügt wird. Dies wird aber gerade vom Produkt $a_i a_j^\dagger$ geleistet. Daher lautet die Darstellung von A im Fockraum

$$A = \sum_{ij} a_i^\dagger \langle\xi_i|A^{(1)}|\xi_i\rangle a_i. \tag{9.35}$$

Ein wichtiges Beispiel ist der Hamilton-Operator eines Systems von nicht-wechselwirkenden Teilchen. Wählen wir für $|\xi_i\rangle$ die Energie-Eigenzustände,

$$H_0 = \sum_i H^{(1)}(i), \quad H^{(1)}|\xi_i\rangle = \varepsilon_i|\xi_i\rangle, \qquad \langle\xi_i|\xi_i\rangle = \delta_{ij} \tag{9.36}$$

[1]siehe Kapitel 2

dann folgt

$$H_0 = \sum_i \varepsilon_i \, a_i^\dagger a_i. \tag{9.37}$$

Als nächstes betrachten wir Zweiteilchenoperatoren. Damit sind Operatoren gemeint, die additiv aus Beiträgen jedes Teilchens in folgender Form aufgebaut sind,

$$A = \frac{1}{2} \sum_{ij} A^{(2)}(i,j). \tag{9.38}$$

Der Operator $A^{(2)}(i,j)$ wirkt dabei nur auf den Zustandsraum der $\mathcal{H}_\epsilon^{(2)}$ der beiden Teilchen mit den Nummern i und j. Die Darstellung im Besetzungszahlraum ist analog wie für Einteilchenoperatoren und lautet

$$A = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} a_i^\dagger a_i^\dagger \;{}_\epsilon\langle \xi_i, \xi_i | A^{(2)} | \xi_j, \xi_l \rangle_\epsilon \; a_j a_l. \tag{9.39}$$

Das wohl wichtigste Beispiel ist die Wechselwirkung zwischen jeweils zwei Teilchen in einem Mehrkörersystem. In der Besetzungsdarstellung lautet diese

$$V = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ijkl} a_i^\dagger a_i^\dagger a_j a_l, \qquad V_{ijkl} = {}_\epsilon\langle \xi_i \xi_i | V^{(2)} | \xi_j \xi_l \rangle_\epsilon \,. \tag{9.40}$$

Mit Hilfe der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren können die physikalisch wichtigen Operatoren so geschrieben werden, dass die Fockzustände den Charakter von Basiszuständen haben. Dabei ist wichtig, dass diese Zustände vollständig sind.

In der Theorie der kondensierten Materie wird der hier vorgestellte Formalismus auch auf Zustände angewandt, die nicht als Teilchen im gewöhnlichen Sinn anzusehen sind, sonder als geeignete niederenergetische Anregungszustände des Systems. Dabei handelt es sich zum Beispiel um kollektive Anregungen des Gesamtsystems. Derartige Anregungen nennt man *Quasiteilchen* (Phononen, Exzitonen, Magnonen, usw.). Um eine gute Beschreibung derartiger Anregungszustände zu erhalten sucht man zunächst einen anfänglichen Hamilton-Operator der Form

$$H_0 = E_0 \mathbb{1} + \sum \varepsilon_i a_i^\dagger a_i. \tag{9.41}$$

9.3 Aufgaben zu Kapitel 9

Aufgabe 9.1: Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Zeigen Sie, dass die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren in (9.15,9.16) die Vertauschungrelationen ufgabe

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0$$

erfüllen.

Literaturverzeichnis

[1] L.H. Thomas, *The calculation of atomic fields*, Proc. Cambridge philos. Soc. 23 (1927) 542

[2] E. Fermi, *Eine statistische Methode zur Bestimmung einiger Eigenschaften des Atoms und ihre Anwendung auf die Theorie des periodischen Systems der Elemente*, Z. Phys. 48 (1928) 73; *Statistische Berechnung der Rydbergkorrektionen ders-Terme*, 49 (1928) 550.

[3] A. Sommerfeld, *Asymptotische Integration der Differentialgleichung des Thomas-Fermischen Atoms*, Z. Phys. 78 (1932) 283

[4] V. Fock, *Näherungsmethode zur Lösung des Quantenmechanischen Mehrkörperproblems*, Zeitschr. f. Phys. 61 (1930) 126

[5] R. Latter, *Atomic energy levels for the Thomas-Fermi and Thomas-Fermi-Dirac potential*, Phys. Rev. 99, (1955) 510

[6] V. Fock und M.J. Petraschen, Phys. Z. Sowjet. 6 (1934) 368

[7] P. Amore, J.P. Boyd and F.M. Fernández, *Accurate calculation of the solutions to the Thomas-Fermi equations*, arXiv:1205.1704v2 [quant-phys]

[8] G.W. Kellner, *Die Ionisierungsspannung des Heliums nach der Schrödinger'schen Theorie*, Z. Phys. 44 (1928) 469

[9] E. Hylleraas, *Reminiscences from early quantum mechanics of two-electron atoms*, Rev. Modern Phys. 35 (1963) 421

[10] R.N. Hill, *A new tight lower bound to eigenvalues of the Schrödinger equation*, Phys. Rev. Letters, 38 (1977) 643

[11] E.C. Condon and G.H. Shortley, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge Univ. Press, London (1935)

[12] C.L. Pekeris, *1^1S, 2^1S, and 2^3S States of Li^+*, Phys. Rev. 126 (1962) 1470

[13]

[14]

[15] M. Born, *Quantenmechanik der Stoßvorgänge*, Zeitschrift für Physik 38 (1926) 803

[16] G. Baym, *Lectures on Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, 1973, Seite 202

[17] siehe z.B. Abramowicz, Seite 504 ff

[18] N.F. Mott, *The Collision between two electrons*, Proc. Soc. London 126 (1930) 259

[19] C. Gerthsen, *Streuungsmessungen von H-Strahlen in Wasserstoff als Beitrag zur Klärung ihrer Wellennatur*, Annalen der Physik 9 (1931) 769

[20] E.J. Williams, *Passage of Slow β-Particles through Matter-Production of Branches*, Proceedings Royal Society London 128 (1930) 459

[21] A.A. Michelson, *On a method of making the wave-length of sodium light the actual and practical standard of length*, Phil. Mag **24** (1887) 463; *On the application of interference methods to spectroscopic measurements*, **34** (1892) 280.

[22] G. Hansen, Annalen der Physik **78** (1925) 558

[23] O. Klein, Zeitschrift für Physik 37 (1926) 895; V. Fock, Zeitschrift für Physik 38 (1926) 242 und 39 (1926) 226; J. Kudar, Annalen der Physik 81 (1926) 632; W. Gordon, Zeitschrift für Physik 40 (1926) 117.

[24] P.A.M. Dirac, *The Quantum Theory of the Electron*, Proc. Roy. Soc. **A117** (1928) 610 und **118** (1928) 351.

[25] D.M. Volkov, *Über eine Klasse von Lösungen der Diracschen Gleichung*, Zeitschrift für Physik 94 (1935) 250

Index