

Quantenmechanik II

Andreas Wipf
Theoretisch-Physikalisches-Institut
Friedrich-Schiller-Universität, Max Wien Platz 1
07743 Jena

WS 2008/09

©2009 Andreas Wipf, Universität Jena

Kopieren für den privaten Gebrauch unter Angabe des Autors gestattet. Kommerzielle
Verwertung ist nicht gestattet.

Hinweise auf Druckfehler nehme ich gerne entgegen (wipf@tpi.uni-jena.de)

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung, Literatur	1
1.1	Einführung	1
2	Mehrkörpersysteme	3
2.1	Hamiltonoperator und Hilbertraum	3
2.2	Identische Teilchen	7
2.2.1	Permutationen und Symmetrien	8
2.2.2	Nichtwechselwirkende identische Teilchen	10
2.2.3	Ideales Fermigas	13
2.2.4	Thomas-Fermi Näherung	17
2.2.5	Thomas-Fermi Atome	21
2.2.6	Hartree-Fock-Näherung	22
2.3	Aufgaben zu Kapitel 2	27
3	Addition von Drehimpulsen mit Anwendungen	29
3.1	Addition von Drehimpulsen	30
3.2	Clebsch-Gordan Koeffizienten	33
3.3	Tensoroperatoren	37
3.3.1	Skalare Operatoren	37

3.3.2	Tensoroperatoren	38
3.3.3	Berechnung von Landé-Faktoren	42
3.4	Das reale Wasserstoffatom	44
3.4.1	Feinstruktur	45
3.4.2	Die Hyperfeinstruktur	49
3.5	Aufgaben zu Kapitel 3	51
4	Zeitabhängige Störungen	52
4.1	Dysonsche Reihe	52
4.2	Erste Ordnungs Übergänge und goldene Regel	55
4.2.1	Plötzliches Einschalten	56
4.2.2	Adiabatische Näherung	58
4.2.3	Periodische Störungen	60
4.3	Zweite Ordnungs Übergänge	61
4.4	Absorption und Emission von Strahlung	62
5	Streutheorie	67
5.1	Wirkungsquerschnitte	68
5.2	Potentialstreuung	69
5.2.1	Bornsche Reihe	73
5.2.2	Elastische Streuung von Elektronen an Atomen	75
5.3	Die Coulombstreuung	77
5.4	Partialwellen	81
5.4.1	Optisches Theorem	83
5.4.2	Analytische Eigenschaften der Streuamplitude	84

5.4.3	Das attraktive Exponentialpotential: s -Wellen Kanal	90
5.5	Elastische Streuung gleichartiger spinloser Teilchen	93
5.6	Elastische Streuung gleichartiger Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen	95
5.7	Formale Streutheorie	97
5.7.1	Møller-Operatoren	97
5.7.2	Der Streuoperator	100
6	Klein-Gordon-Gleichung	103
6.1	Poincare Transformationen	104
6.1.1	Die Lie-Algebra der Lorentzgruppe	108
6.2	Klein-Gordon Gleichung	110
6.2.1	Probleme mit der Wahrscheinlichkeit	112
6.2.2	Lösungen mit positiver und negativer Energie	113
6.2.3	Kopplung ans elektromagnetische Feld	115
6.2.4	Ladungskonjugation	117
6.3	Pionische Atome	118
7	Das Diracsche Elektron	121
7.1	Diracgleichung für freie Elektronen	122
7.2	Aufspaltung der Diracgleichung	124
7.3	Lorentz-Kovarianz der Diracgleichung	126
7.3.1	Transformationsgesetz für ψ	129
7.3.2	Bilineare (Pseudo)Tensorfelder	130
7.3.3	Ebene Wellen	131
7.4	Ankopplung ans elektromagnetische Feld	132

7.5	Hamiltonscher Formalismus	133
7.5.1	Kräftefreie Lösungen der Dirac-Gleichung	134
7.6	Ladungskonjugation	136
7.7	Nichtrelativistische Näherung	138
7.7.1	Die Foldy-Wouthuysen Transformation	139
7.7.2	Interpretation der Terme	142
7.8	Drehimpuls und kleine Lorentz-Transformationen	142
7.9	Elektronen in elektromagnetischen Wellenfeldern	146
7.9.1	Zweite Ordnungs-Gleichung	146
7.9.2	Die Lösung von Volkov	147
8	Das relativistische Zentralkraftproblem	150
8.1	Transformation auf Polarkoordinaten	151
8.2	Der Diracsche Erhaltungssatz	152
8.3	Die radiale Dirac-Gleichung	158
8.4	Wasserstoff Spektrum und Feinstruktur	163
9	Einführung in Pfadintegrale	167
	Index	170

Kapitel 1

Einführung, Literatur

Zusätzlich zu der in der Vorlesung Quantenmechanik I angegebenen Literatur kann ich folgende Bücher empfehlen:

- D. GRIFFITHS, *Introduction to Quantum Mechanics*; Prentice Hall 1995
- L.I. SCHIFF, *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, 1968
- A.S. DAWYDOW, *Quantenmechanik*; J.A. Barth, 1992
- J. SAKURAI, *Modern Quantum Mechanics*; 2. Auflage, Pearson 1993
- J. TOWNSEND, *A modern Approach to Quantum Mechanics*; Mc.Graw-Hill, 2000
- R. JOST, *Quantenmechanik I, II*; Verlag der Fachvereine der ETH Zürich, 1969 und 1973
- A. GALINO UND P. PASCUAL, *Quantum Mechanics I und II*; Springer, 1990 und 1991
- S. GASIOROWICZ, *Quantenphysik*; 8. Auflage, Oldenbourg, 2002
- H. ROLLNIK, *Quantentheorie I und II*; Springer, 2003 und 2002
- V. MLLER, *Quantenmechanik*; Oldenbourg, 2000
- R. BECKER UND F. SAUTER, *Theorie der Elektrizität 2*, 10. Auflage, Teubner, 1970

1.1 Einführung

Im letzten Semester haben Sie die Grundlagen der Quantenmechanik kennengelernt. In der Schrödingerschen 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 *Schrödingergleichung* für ein Teilchen im Zentralfeld gelöst und dabei wesentlichen Gebrauch von der 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 verschiedenen Bildern formuliert werden. Neben dem *Schrödinger-* und *Heisenberg-**bild* ist in der wichtigen Streutheorie das *Wechselwirkungsbild* von Interesse. 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 der Teilchen sind die Wellenfunktionen vollständig symmetrisch oder vollständig antisymmetrisch in den Teilchenkoordinaten. Als Anwendung behandeln wir ideale Fermigase, sogenannte Thomas-Fermi-Atome und 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 die *Streutheorie*. Hier werden die goldene Regel von FERMI und verschiedene Einschaltvorgänge diskutiert. In der Streutheorie wird zuerst 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. Danach 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 Diracsche Theorie des Elektrons einen großen Raum einnehmen. Die *Diracgleichung* ist die relativistische Verallgemeinerung der wohlbekannten Schrödingergleichung. 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 ist sie das Werkzeug zum Verständnis der Elementarteilchen und den Vermittlern ihrer gegenseitigen Wechselwirkungen.

Kapitel 2

Mehrkörpersysteme

In der Quantenmechanik I wurden das nichtrelativistische Wasserstoffatom ausführlich behandelt. Nach Abspaltung der Schwerpunktsbewegung vereinfacht es sich auf ein exakt lösbares Einkörperproblem. 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 Schrödingerschen Störungstheorie oder der Variationsmethode berechnet werden. In diesem Kapitel werden wir weitere Methoden kennen lernen, um die Dynamik von N 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 aller Teilchen des Systems definieren.

2.1 Hamiltonoperator und Hilbertraum

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

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

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle. \quad (2.2)$$

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,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N. \quad (2.3)$$

Für das Tensorprodukt von Vektoren der Teilräume schreiben wir

$$|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N\rangle \equiv |\psi_1 \psi_2 \dots \psi_N\rangle \quad (2.4)$$

Das Tensorprodukt ist *linear in jedem Faktor*. Das Skalarprodukt von zwei Produktzuständen ist das Produkt der Skalarprodukte seiner Faktoren,

$$\langle \phi_1 \dots \phi_N | \psi_1 \dots \psi_N \rangle_{\mathcal{H}} = \langle \phi_1 | \psi_1 \rangle_{\mathcal{H}_1} \dots \langle \phi_N | \psi_N \rangle_{\mathcal{H}_N}. \quad (2.5)$$

Die Tensorprodukte

$$|n_1 \dots n_N\rangle \equiv |n_1\rangle \otimes \dots \otimes |n_N\rangle$$

der Basisvektoren der einzelnen Hilberträume bilden eine Basis des gesamten Hilbertraumes \mathcal{H} .

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

$$A_i : \mathcal{H}_i \rightarrow \mathcal{H}_i, \quad (2.6)$$

dann ist ihr Tensorprodukt eine Observable des Gesamtsystems. Sie wirkt folgendermaßen auf den Produktzuständen im Hilbertraum \mathcal{H} :

$$(A_1 \otimes \dots \otimes A_N) (|\psi_1\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N\rangle) = |A_1 \psi_1\rangle \otimes \dots \otimes |A_N \psi_N\rangle. \quad (2.7)$$

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 es gilt

$$A_1 + \dots + A_N = A_1 \otimes \mathbb{1} \otimes \dots \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} + \dots + \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \dots \otimes \mathbb{1} \otimes A_N. \quad (2.8)$$

Mit dieser Übereinkunft ist

$$(A_1 + \dots + A_N) (|\psi_1\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N\rangle) = |A_1\psi_1\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N\rangle + \dots \\ \dots + |\psi_1\rangle \otimes \dots \otimes |A_N\psi_N\rangle. \quad (2.9)$$

Diese Notation wurde bereits in der Quantenmechanik I benutzt, als die Drehimpulse verschiedener Teilchen addiert wurden.

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

$$|a_1\rangle \otimes \dots \otimes |a_N\rangle \equiv |a_1 \dots a_N\rangle \quad (2.10)$$

automatisch Eigenzustand der Summe und des Tensorprodukts der Operatoren A_i ,

$$(A_1 + \dots + A_N) |a_1 \dots a_N\rangle = (a_1 + \dots + a_N) |a_1 \dots a_N\rangle \\ (A_1 \otimes \dots \otimes A_N) |a_1 \dots a_N\rangle = (a_1 \dots a_N) |a_1 \dots a_N\rangle. \quad (2.11)$$

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

$$|\xi_1\rangle \otimes \dots \otimes |\xi_N\rangle \equiv |\xi_1 \dots \xi_N\rangle \quad (2.12)$$

eine Basis von \mathcal{H} .

Zum Beispiel können wir die *gemeinsamen* Eigenzustände

$$|\mathbf{x}_1 s_1, \dots, \mathbf{x}_N s_N\rangle = |\mathbf{x}_1 s_1\rangle \otimes \dots \otimes |\mathbf{x}_N s_N\rangle \quad (2.13)$$

der verträglichen Orts- und Spinoperatoren wählen. Ein beliebiger Zustand lässt sich zerlegen als

$$|\psi\rangle = \sum_{s_1, \dots, s_N} \int d^3x_1 \dots d^3x_N \psi(\mathbf{x}_1, s_1, \dots, \mathbf{x}_N, s_N) |\mathbf{x}_1 s_1, \dots, \mathbf{x}_N s_N\rangle \quad (2.14)$$

mit N -Teilchen-Wellenfunktion

$$\psi(\mathbf{x}_1, s_1, \dots, \mathbf{x}_N, s_N) = \langle \mathbf{x}_1 s_1, \dots, \mathbf{x}_N s_N | \psi \rangle. \quad (2.15)$$

Das Skalarprodukt zweier Zustandsvektoren lautet

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_{s_1, \dots, s_N} \int d^3x_1 \dots d^3x_N \bar{\phi}(\mathbf{x}_1, s_1, \dots, \mathbf{x}_N, s_N) \psi(\mathbf{x}_1, s_1, \dots, \mathbf{x}_N, s_N). \quad (2.16)$$

Für einen auf Eins normierten Zustand ist die Wellenfunktion (2.15) die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, das erste Teilchen am Ort \mathbf{x}_1 mit dritter Spinkomponenten s_1 , das zweite Teilchen am Ort \mathbf{x}_2 mit dritter Spinkomponenten s_2, \dots und das N 'te Teilchen am Ort \mathbf{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 weiter unten ausführlich besprechen.

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

$$\langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N | \psi_1 \cdots \psi_N \rangle = \langle \mathbf{x}_1 | \psi_1 \rangle \cdots \langle \mathbf{x}_N | \psi_N \rangle = \psi_1(\mathbf{x}_1) \cdots \psi_N(\mathbf{x}_N). \quad (2.17)$$

Für spinlose Teilchen bedeutet die Eigenschaft (2.3)

$$L_2(\mathbb{R}^3) \otimes \cdots \otimes L_2(\mathbb{R}^3) = L_2(\mathbb{R}^{3N}), \quad (2.18)$$

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

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

beliebig genau approximiert werden. Der Hilbertraum für N spinlose Teilchen ist also ein Unterraum von

$$\mathcal{H}^{(N)} = L^2(\mathbb{R}^{3N}) \quad (2.19)$$

und für N Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$ ein Unterraum von

$$\mathcal{H}^{(N)} = L^2(\mathbb{R}^{3N}) \otimes \underbrace{\mathbb{C}^2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{C}^2}_{N \text{ mal}}. \quad (2.20)$$

Im allgemeinen Fall ist er ein *Unterraum* von

$$\mathcal{H}^{(N)} = L^2(\mathbb{R}^{3N}) \otimes \mathcal{H}_S^{(N)}, \quad (2.21)$$

wobei der zweite Faktor von der Teilchensorte abhängt.

2.2 Identische Teilchen

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

$$|\xi_1 \dots \xi_N\rangle \quad (2.22)$$

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 ihnen im Formalismus Variablen zuordnen. Dies heißt nicht, dass wir die Teilchen physikalisch unterscheiden können. Die Ununterscheidbarkeit der Teilchen bedeutet, dass bei einer Vertauschung zweier Argumente in (2.22) der Zustand unverändert bleibt.

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

$$|\xi_1 \xi_2 \dots \xi_N\rangle \quad \text{und} \quad P(\pi) |\xi_1 \xi_2 \dots \xi_N\rangle = |\xi_{\pi(1)} \xi_{\pi(2)} \dots \xi_{\pi(N)}\rangle \quad (2.23)$$

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

$$\langle P(\pi)\phi | P(\pi)\psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle, \quad P(e) = \mathbb{1}_{\mathcal{H}}, \quad P(\pi_1)P(\pi_2) = P(\pi_1\pi_2). \quad (2.24)$$

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. Beispiele von symmetrischen

Observablen sind der Gesamtimpuls und gesamte Bahndrehimpuls

$$\mathbf{p} = \sum_i \mathbf{p}_i \quad \text{und} \quad \mathbf{L} = \sum_i \mathbf{L}_i, \quad (2.25)$$

sowie der (Modell)-Hamilton-Operator

$$H = \frac{1}{2m} \sum_i \mathbf{p}_i^2 + \sum_{i<j} V(r_{ij}), \quad (2.26)$$

wobei $r_{ij} = |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|$ der Abstand zwischen dem i 'ten und j 'ten Teilchen bezeichnet. Identische Teilchen haben natürlich gleiche Massen m . Symmetrische Operatoren ändern sich nicht wenn die Teilchenkoordinaten permutiert werden.

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

$$P_{ij}|\xi_1\xi_2\dots\xi_i\dots\xi_j\dots\xi_N\rangle = |\xi_1\xi_2\dots\xi_j\dots\xi_i\dots\xi_N\rangle \quad (2.27)$$

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} & P_{ij}A(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N)P_{ij}^{-1}|\xi_1\dots\xi_i\dots\xi_j\dots\xi_N\rangle \\ &= P_{ij}A(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N)|\xi_1\dots\xi_j\dots\xi_i\dots\xi_N\rangle \\ &= A(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N)|\xi_1\dots\xi_i\dots\xi_j\dots\xi_N\rangle \end{aligned}$$

oder

$$P_{ij}A(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = A(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N)P_{ij}. \quad (2.28)$$

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

$$A \text{ symmetrisch: } P(\pi)AP^{-1}(\pi) = A. \quad (2.29)$$

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

$$HP|\psi\rangle = PH|\psi\rangle = PE|\psi\rangle = EP|\psi\rangle. \quad (2.30)$$

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

$$\begin{aligned} |\xi_1\xi_2\rangle_s &= |\xi_1\xi_2\rangle + P_{12}|\xi_1\xi_2\rangle = |\xi_1\xi_2\rangle + |\xi_2\xi_1\rangle \\ |\xi_1\xi_2\rangle_a &= |\xi_1\xi_2\rangle - P_{12}|\xi_1\xi_2\rangle = |\xi_1\xi_2\rangle - |\xi_2\xi_1\rangle \end{aligned} \quad (2.31)$$

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,

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

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

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

Diese tiefliegende Beziehung zwischen Spin und Statistik, nach der identische Teilchen mit ganzzahligem Spin (Bosonen) symmetrische Wellenfunktionen und identische Teilchen mit halbzahligem 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:

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

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

Wir wollen nun untersuchen, was für Symmetrieeigenschaften die Wellenfunktionen von *zusammengesetzten Teilchen* haben müssen. Als Beispiel betrachten wir die Wellenfunktion $\psi(e_1, p_1, e_2, p_2)$, welche 2 *Wasserstoffatome* beschreibt. e_1 bezeichnet 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

$$\psi(e_2, p_2, e_1, p_1) = -\psi(e_1, p_2, e_2, p_1) = \psi(e_1, p_1, e_2, p_2)$$

ändert sich ψ nicht. Wasserstoffatome verhalten sich wie 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 $\psi(\xi_1, \xi_1, \dots) = 0$. Die Amplitude dafür, zwei identische Fermionen im selben Zustand zu finden, ist Null. Insbesondere müssen zwei Elektronen am selben Ort verschiedene Spineinstellungen aufweisen.

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,

$$H_0 = \sum_{i=1}^N H(i), \quad (2.32)$$

wobei diese Summe auf dem gesamten Hilbertraum in (2.8) erklärt wurde. Die orthonormierten Einteilchen-Zustände $|\xi\rangle$ seien Eigenzustände von H mit Energien ε_n ,

$$H|\xi\rangle = \varepsilon_n|\xi\rangle, \quad |\xi\rangle = |\varepsilon_n a\rangle.$$

Dann sind die Lösungen der stationären Schrödingergleichung

$$H_0|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (2.33)$$

offensichtlich die Produkt-Wellenfunktionen

$$|\xi_1 \xi_2 \dots \xi_N\rangle = |\xi_1\rangle \otimes |\xi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\xi_N\rangle. \quad (2.34)$$

Die Energien dieser Zustände sind nach (2.11) gleich die Summe der Einteilchen-Energien,

$$E = \varepsilon_{n_1} + \dots + \varepsilon_{n_N}. \quad (2.35)$$

In der Lösung (2.34) 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 Austauschbarkeit gibt es viele andere Lösungen von (2.33) mit gleicher Energie. Alle Produktzustände

$$P(\pi)|\xi_1 \xi_2 \dots \xi_N\rangle \quad (2.36)$$

haben die gleiche Energie wie der Zustand in (2.34). Aber weder der Zustand (2.34) noch eine der anderen mittels 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

$$|\xi_1 \dots \xi_N\rangle_s \sim \sum_{\pi} |\xi_{\pi(1)} \dots \xi_{\pi(N)}\rangle.$$

Die Summe erstreckt sich über alle $N!$ Permutationen der Indizes $1, \dots, N$. Die Energie dieses Zustandes ist gerade (2.35). Der Zustand ψ_s ist vollständig symmetrisch: vertauschen wir zwei seiner Argumente, dann bedeutet dies nur eine Umordnung der Summanden auf der rechten Seite.

Für *identische Fermionen* müssen wir vollständig antisymmetrische Zustandsvektoren

konstruieren. Wie man leicht einsieht, ist

$$|\xi_1 \dots \xi_N\rangle_a = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\pi} \text{sign}(\pi) |\xi_{\pi(1)} \dots \xi_{\pi(N)}\rangle$$

vollständig antisymmetrisch, genauso wie die zugehörige Wellenfunktion,

$$\begin{aligned} \psi_{n_1 \dots n_N}^{\text{SD}}(\xi_1, \dots, \xi_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\pi} \text{sign}(\pi) \langle \xi_{\pi(1)} \dots \xi_{\pi(N)} | \psi_{n_1} \dots \psi_{n_N} \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\pi} \text{sign}(\pi) \psi_{\pi(n_1)}(\xi_1) \dots \psi_{\pi(n_N)}(\xi_N). \end{aligned} \quad (2.37)$$

Die Energie dieser Zustände ist ebenfalls durch (2.35) gegeben. Diese alternierende Summe kann auch als Determinante geschrieben werden:

$$\psi_{n_1 \dots n_N}^{\text{SD}}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \psi_{n_1}(\xi_1) & \psi_{n_1}(\xi_2) & \dots & \psi_{n_1}(\xi_N) \\ \psi_{n_2}(\xi_1) & \psi_{n_2}(\xi_2) & \dots & \psi_{n_2}(\xi_N) \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \psi_{n_N}(\xi_1) & \psi_{n_N}(\xi_2) & \dots & \psi_{n_N}(\xi_N) \end{pmatrix}. \quad (2.38)$$

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, $\psi_n(\xi) = \phi_n(\mathbf{x}) |sm_s\rangle$. Der Bahnanteil $\phi_{n_1}(\mathbf{x}_1) \dots \phi_{n_N}(\mathbf{x}_N)$ der Wellenfunktion des Gesamtsystems 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,

$$\varepsilon_1 \leq \varepsilon_2 \leq \varepsilon_3 \leq \dots \quad (2.39)$$

Die Grundzustandsenergie für nicht-wechselwirkende Fermionen ist offenbar

$$E_0 = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i, \quad (2.40)$$

und der *Grundzustand* hat die Form

$$\psi_0^{\text{SD}}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \psi_1(\xi_1) & \psi_1(\xi_2) & \dots & \psi_1(\xi_N) \\ \psi_2(\xi_1) & \psi_2(\xi_2) & \dots & \psi_2(\xi_N) \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \psi_N(\xi_1) & \psi_N(\xi_2) & \dots & \psi_N(\xi_N) \end{pmatrix}. \quad (2.41)$$

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 freien Fermigases 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 nie denselben quantenmechanischen Zustand einnehmen. Das führt dazu, dass nicht alle Teilchen in Ruhe sein können. In einem ultra-kalten Gas suchen die Teilchen Zustände mit möglichst kleiner kinetischer Energie. Aufgrund des Pauliprinzips können aber nur wenige Teilchen die minimal mögliche Energie haben. Die anderen müssen Zustände höherer Energie besetzen. So kommt es, dass die einzelnen Teilchen in einem Fermigas, selbst wenn das Gas extrem kalt ist, eine sehr hohe Energie haben können. Die höchste Energie ist die *Fermi-Energie* ϵ_F .

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

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}, m_s) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} |sm_s\rangle, \quad \text{mit Energien} \quad \varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2. \quad (2.42)$$

Wegen der Periodizität der Wellenfunktion sind die Wellenzahlvektoren quantisiert,

$$\mathbf{k} \in \frac{2\pi}{L}\boldsymbol{\nu}, \quad \boldsymbol{\nu} \in \mathbb{Z}^3. \quad (2.43)$$

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

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

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

$$dN = (2s + 1) \frac{V}{(2\pi)^3} d^3k, \quad (2.44)$$

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

Aus der Dispersionsrelation (2.42) folgt

$$d\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{m} k dk \quad (2.45)$$

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

$$d^3k = d\Omega_k \frac{m}{\hbar^2} k d\varepsilon = \frac{1}{2} d\Omega_k \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon. \quad (2.46)$$

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

$$\frac{dN}{V} = D(\varepsilon) d\varepsilon, \quad \text{wobei} \quad D(\varepsilon) = \frac{2s + 1}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon} \quad (2.47)$$

die *Spektraldichte* bezeichnet. Nach Integration über ε finden wir folgenden Ausdruck für

die Anzahl Zustände pro Volumen mit Energien im Intervall $[0, \varepsilon_F]$,

$$\frac{N}{V} = \int_0^{\varepsilon_F} D(\varepsilon) d\varepsilon \equiv \left(\frac{\varepsilon_F}{\gamma}\right)^{3/2} \quad \text{mit} \quad \gamma = \left(\frac{6\pi^2}{2s+1}\right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m}. \quad (2.48)$$

Für Elektronen ist die eingeführte Konstante gleich

$$\gamma_e \approx 5.842263 \text{ Joule} \cdot \text{m}^2 \approx 0.364645 \text{ eV} \cdot \text{nm}^2.$$

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

$$\varepsilon_F \equiv \frac{1}{2m} p_F^2 = \gamma n^{2/3}, \quad (2.49)$$

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

$$\frac{E}{V} = \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon D(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{3}{5} \gamma n^{5/3}. \quad (2.50)$$

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

$$U(T=0) = E = \frac{3}{5} \gamma N n^{2/3} = \frac{3}{5} N \varepsilon_F. \quad (2.51)$$

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

$$p = - \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_N \stackrel{(2.51)}{=} \frac{2U}{3V} = \frac{2}{5} \gamma n^{5/3} \quad (2.52)$$

und man findet für den *Kompressionsmodul*

$$B = -V \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_N = \frac{10U}{9V} = \frac{2}{3} n \varepsilon_F. \quad (2.53)$$

Betrachten wir zum Beispiel das kubisch raumzentrierte (bcc) Kalium mit einem Gitterparameter von $a = 0.525 \text{ nm}$. 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

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

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

$$B \approx 3.2 \text{ GPa}. \quad (2.54)$$

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

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

Approximieren wir nun die Protonen und Neutronen im Kern durch ein ideales Fermigas, und setzen wir $n(0) \sim n$ in die Formel (2.49) ein, so findet man für $N = Z = A/2$ etwa folgende maximale kinetische Energie eines Teilchens:

$$\varepsilon_F = \frac{1}{2m} p_F^2 \sim 37 \text{ MeV} \quad (2.55)$$

Für die gesamte kinetische Energie des Nukleonen-Gases erhält man gemäß (2.51)

$$E = \frac{3}{5} (N\varepsilon_F^n + Z\varepsilon_F^p) \sim \frac{3}{5} A\varepsilon_F. \quad (2.56)$$

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 $A\varepsilon_F \sim \text{GeV}$ 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

ihre Anzahldichte

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

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

$$\rho_c \sim 3.3 \cdot 10^7 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}, \quad T_c \sim 2.2 \cdot 10^7 \text{ } ^\circ\text{K} \quad (2.57)$$

und die tatsächliche Elektronendichte

$$n_e \sim \frac{\rho_c}{m_p} = 2 \cdot 10^{31} \frac{1}{\text{cm}^3} \quad (2.58)$$

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

$$n_{\text{kl,e}}(T_c) \sim 5 \cdot 10^{26} \frac{1}{\text{cm}^3} \ll n_e.$$

Deshalb sind die Elektronen in Sirius B in guter Näherung vollständig entartet. Sie werden durch das Pauli-Verbot zu höheren Impulsen gezwungen als der Maxwell-Boltzmann-Verteilung entspräche. Die klassische Anzahldichte der Protonen

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

ist dagegen größer als $n_p = n_e$ und man darf die Protonen als nicht-entartetes ideales Gas behandeln. Man kann leicht abschätzen, dass im Innern des Sirius-Begleiters $p_F \sim mc$ 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*. 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 hohen 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 (2.50) beschrieben. Allerdings wird seine Dichte, oder wegen (2.44) seine Fermi-Energie, auch ortsabhängig sein.

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

$$E[n] = \frac{3\gamma}{5} \int d^3x n^{5/3}(\mathbf{x}) - Ze^2 \int d^3x \frac{n(\mathbf{x})}{|\mathbf{x}|} + \frac{e^2}{2} \int d^3x d^3y \frac{n(\mathbf{x})n(\mathbf{y})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}. \quad (2.59)$$

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*

$$\int d^3x n(\mathbf{x}) = N \quad (2.60)$$

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

$$E[n] - \mu \left(\int d^3x n(\mathbf{x}) - N \right). \quad (2.61)$$

Bei einer Variationen der Elektronendichte ändert sich die Energie gemäß

$$\delta E[n] = \int d^3x \delta n(\mathbf{x}) \left(\gamma n^{2/3}(\mathbf{x}) - \frac{Ze^2}{|\mathbf{x}|} + e^2 \int d^3y \frac{n(\mathbf{y})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \right), \quad (2.62)$$

und wir finden folgende Bestimmungsgleichung für die minimierende Elektronendichte,

$$\gamma n^{2/3}(\mathbf{x}) - \frac{Ze^2}{|\mathbf{x}|} + e^2 \int d^3y \frac{n(\mathbf{y})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} = \mu. \quad (2.63)$$

Dies ist die gesuchte *Thomas-Fermi-Gleichung* für $n(\mathbf{x})$. 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,

$$\phi(\mathbf{x}) = \frac{Ze}{|\mathbf{x}|} - e \int d^3y \frac{n(\mathbf{y})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}. \quad (2.64)$$

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

$$\gamma n^{2/3}(\mathbf{x}) = \varepsilon_F(\mathbf{x}) = e\phi(\mathbf{x}) - e\phi_0. \quad (2.65)$$

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

Das Thomas-Fermi Potential ϕ erfüllt die Poisson-Gleichung

$$\Delta\phi(\mathbf{x}) = -4\pi(Ze\delta(\mathbf{x}) - en(\mathbf{x})) = 4\pi en(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \neq \mathbf{0}. \quad (2.66)$$

Setzen wir diese Gleichung in (2.65) ein, dann finden wir

$$\Delta\phi = 4\pi e \left(\frac{e}{\gamma}\right)^{3/2} (\phi - \phi_0)^{3/2}. \quad (2.67)$$

Wegen (2.65) verschwindet die Elektronendichte n für $\phi(\mathbf{x}) = \phi_0$ und deshalb bestimmt diese Gleichung den Rand des Atoms. An Orten mit $\phi(\mathbf{x}) < \phi_0$ wird $n(\mathbf{x})$ 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

$$\phi(r) = \frac{Ze}{r} \chi(r), \quad (2.68)$$

wobei χ die *Abschirmung* des Kernpotentials durch das Elektronengas beschreibt. Einsetzen in (2.67) mit $\phi_0 = 0$ führt unmittelbar auf die Radialgleichung

$$\frac{Ze}{r} \chi'' = 4\pi e \left(\frac{Ze^2}{\gamma r} \chi\right)^{3/2}. \quad (2.69)$$

Nun reskalieren wir noch den Abstand zum Kern gemäß

$$r = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3} Z^{-1/3} \cdot a_0 \cdot s, \quad \text{wobei} \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad (2.70)$$

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

$$\frac{d^2}{ds^2}\chi = s^{-1/2}\chi^{3/2} \quad \text{mit} \quad \chi(\infty) = 0 \quad \text{und} \quad \chi(0) = 1. \quad (2.71)$$

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 $\phi \rightarrow Ze/r$ bzw. $\chi \rightarrow 1$ gelten muss für $r \rightarrow 0$. Diese nichtlineare Gleichung muss numerisch gelöst werden und die Lösung hat die asymptotische Form

$$\begin{aligned} \chi(s) &\sim \frac{144}{s^3} && \text{für } s \rightarrow \infty \\ \chi(s) &\sim 1 - 1.59 \cdot s + \frac{4}{3} \cdot s^{3/2} && \text{für } s \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (2.72)$$

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

$$\begin{aligned} n(s) &\sim s^{-6} && \text{für } s \rightarrow \infty \\ n(s) &\sim s^{-3/2} && \text{für } s \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (2.73)$$

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

Das 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 $s \sim Z^{1/3}r$ 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

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

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

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

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 [1].

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:

$$H_0 = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V_{\text{TF}}(r_i) \right) \quad \text{mit} \quad V_{\text{TF}}(r) = \frac{Ze^2}{r} \chi(s). \quad (2.74)$$

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

$$\psi_{n\ell m_\ell}(\mathbf{x}, m_s) = \frac{u_{n\ell}(r)}{r} Y_{\ell m_\ell}(\theta, \varphi) \chi_{m_s}, \quad (2.75)$$

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,

$$\text{Energie} = \varepsilon_{n\ell} \quad , \quad \text{Entartung} = 2(2\ell + 1). \quad (2.76)$$

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

$$\varepsilon_{1s} < \varepsilon_{2s} < \varepsilon_{2p} < \dots \quad (2.77)$$

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

$$(1s)^2(2s)^2(2p)^3.$$

Der Exponent soll andeuten, wieviele Elektronen im Stickstoffatom die entsprechende Hauptquantenzahl und den entsprechenden Bahndrehimpuls besitzen. Also sind 2 Elektro-

nen im $1s$ -Zustand und damit ist die entsprechende Schale, die K -Schale, gefüllt. Genauso ist die Teilschale der $2s$ -Elektronen, die L -Schale, gefüllt. Dagegen ist die M -Teilschale der $2p$ -Zustände nur halb gefüllt, denn diese Schale kann $2 \cdot 3 = 6$ Elektronen aufnehmen. Der Entartungsgrad und die Parität des Grundzustandes sind

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

Offensichtlich sind die Konfigurationen mit lauter vollbesetzten Teilschalen nicht entartet. Daraus folgt aber auch, dass der Gesamtdrehimpuls und Gesamtspin der vollen Teilschalen verschwinden muss (andernfalls gäbe es eine Entartung). Man braucht also die vollen Schalen bei der Bestimmung von Drehimpuls, 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 [2]. 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	$\varepsilon_{4s} \sim \varepsilon_{3d}$	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	$\varepsilon_{4f} \sim \varepsilon_{5d}$	$Z > 57$: $4f$ -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 Rayleigh-Ritzschen Variationsverfahrens wollen wir die Hartree-Fock-Näherung besprechen. Hier sucht man die beste Approximation des

Grundzustandes durch Wellenfunktionen vom Typ

$$\psi^{\text{SD}}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \psi_1(\xi_1) & \psi_1(\xi_2) & \dots & \psi_1(\xi_N) \\ \psi_2(\xi_1) & \psi_2(\xi_2) & \dots & \psi_2(\xi_N) \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \psi_N(\xi_1) & \psi_N(\xi_2) & \dots & \psi_N(\xi_N) \end{pmatrix}, \quad (2.78)$$

wobei die ψ_i orthonormierte Einteilchenwellenfunktionen sind. Strenggenommen darf man die Wellenfunktion des Atoms natürlich nicht als Produkt darstellen. Die Hartree-Fock-Methode des selbstkonsistenten Feldes berücksichtigt nur den Hauptanteil der Wechselwirkung zwischen Elektronen, und hier insbesondere die Austauschterme, aber nicht die gesamte Wechselwirkung.

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*

$$A^{(1)} = \sum_i A(i), \quad (2.79)$$

in diesen antisymmetrischen Produktzuständen ist. Die kinetische Energie der Elektronen ist ein derartiger Operator. Für 2 Fermionen ist

$$A^{(1)} = A(1) + A(2), \quad \psi^{\text{SD}}(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2) - \psi_1(\xi_2)\psi_2(\xi_1)) \quad (2.80)$$

und entsprechend gilt

$$\begin{aligned} (A^{(1)}\psi^{\text{SD}})(\xi_1, \xi_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(A(1)\psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2) - A(1)\psi_2(\xi_1)\psi_1(\xi_2) \right. \\ &\quad \left. + A(2)\psi_2(\xi_2)\psi_1(\xi_1) - A(2)\psi_1(\xi_2)\psi_2(\xi_1) \right). \end{aligned}$$

Für orthonormierte Einteilchenzustände ergibt sich dann für den Erwartungswert

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

Für N identische Fermionen wirkt ein Einteilchenoperator auf die Slater-Determinante

$$\psi^{\text{SD}}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\pi} \text{sign}(\pi) \psi_{\pi(1)}(\xi_1) \cdots \psi_{\pi(N)}(\xi_N)$$

wie folgt

$$(A^{(1)}\psi^{\text{SD}})(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{i,\pi} \text{sign}(\pi) A(i) \psi_{\pi(i)}(\xi_i) \prod_{k \neq i} \psi_{\pi(k)}(\xi_k). \quad (2.81)$$

Für orthonormierte Einteilchenwellenfunktionen in (2.81) verschwinden die Erwartungswerte $\langle \psi^{\text{SD}} | A | \psi^{\text{SD}} \rangle$ falls die Permutationen in ψ^{SD} und $A\psi^{\text{SD}}$ verschieden sind. Für jedes $A(i)$ in $A^{(1)}$ erhalten wir $N!$ identische Terme. Deshalb finden wir für den Erwartungswert von A

$$\langle \psi^{\text{SD}} | A^{(1)} | \psi^{\text{SD}} \rangle = \sum_{i=1}^N \sum_{m_s} \int d^3x \psi_i^\dagger(\xi) A(\xi) \psi_i(\xi), \quad (2.82)$$

wobei wir (\mathbf{x}, m_s) durch ξ abgekürzt haben. Der Erwartungswert eines Einteilchenoperators in einem Produktzustand ist die Summe der Erwartungswerte in den beteiligten Einteilchenzuständen.

Damit wird der Erwartungswert der kinetischen Energie, $T = \sum \mathbf{p}_i^2 / 2m$ zu

$$\langle \psi^{\text{SD}} | T | \psi^{\text{SD}} \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i, m_s} \int d^3x |\nabla \psi_i(\mathbf{x}, m_s)|^2, \quad (2.83)$$

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

$$\langle \psi^{\text{SD}} | V_c | \psi^{\text{SD}} \rangle = -Ze^2 \sum_{i, m_s} \int d^3x \frac{|\psi_i(\mathbf{x}, m_s)|^2}{r}. \quad (2.84)$$

Als nächstes wenden wir uns der Elektron-Elektron-Wechselwirkung

$$V_{ee} = \frac{e^2}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{r_{ij}} \quad (2.85)$$

zu. r_{ij} ist ein Zweiteilchenoperator, da er von den Koordinaten zweier Teilchen abhängt. Ein allgemeiner *Zweiteilchenoperator* hat die Form

$$A^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} A(i, j). \quad (2.86)$$

Wir berechnen die Erwartungswerte derartiger Operatoren in antisymmetrisierten Produktzuständen. Wegen

$$A^{(2)} \psi^{\text{SD}} = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{i \neq j} \sum_{\pi} \text{sign}(\pi) A(i, j) \psi_{\pi(i)}(\xi_i) \psi_{\pi(j)}(\xi_j) \prod_{k \neq \{i, j\}} \psi_{\pi(k)}(\xi_k) \quad (2.87)$$

tragen im Skalarprodukt $\langle \psi^{\text{SD}} | A^{(2)} | \psi^{\text{SD}} \rangle$ nur gleiche Permutationen der beiden Zustände bei, bis auf eine mögliche Transposition von i und j im Term mit $A(i, j)$. Bezeichnen wir

$\pi(i) = p$ und $\pi(j) = q$, dann ist

$$\langle \psi^{\text{SD}} | A(i, j) | \psi^{\text{SD}} \rangle = \frac{(N-2)!}{2N!} \sum_{p \neq q} \left[(\psi_p(\xi_i) \psi_q(\xi_j), A(i, j) \psi_p(\xi_i) \psi_q(\xi_j)) - (\psi_q(\xi_i) \psi_p(\xi_j), A(i, j) \psi_p(\xi_i) \psi_q(\xi_j)) \right].$$

Hier haben wir berücksichtigt, dass es $(N-2)!$ Permutationen gibt, die zwei Elemente festlassen. Damit finden wir für den Erwartungswert eines beliebigen 2-Teilchenoperators

$$\langle \psi^{\text{SD}} | A^{(2)} | \psi^{\text{SD}} \rangle = \frac{1}{2} \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i \neq j, p \neq q} \left[(\psi_p(\xi_i) \psi_q(\xi_j), A(i, j) \psi_p(\xi_i) \psi_q(\xi_j)) - (\psi_q(\xi_i) \psi_p(\xi_j), A(i, j) \psi_p(\xi_i) \psi_q(\xi_j)) \right].$$

Jedes $A(i, j)$ führt zum selben Beitrag, so dass schlussendlich gilt

$$\langle \psi^{\text{SD}} | A^{(2)} | \psi^{\text{SD}} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{p \neq q} \sum_{m_s, m'_s} \int d^3x d^3x' \left[\psi_p^\dagger(\xi) \psi_q^\dagger(\xi') A(\xi, \xi') \psi_p(\xi) \psi_q(\xi') - \psi_q^\dagger(\xi) \psi_p^\dagger(\xi') A(\xi, \xi') \psi_p(\xi) \psi_q(\xi') \right]. \quad (2.88)$$

Dieses allgemeine Resultat können wir nun auf die Elektron-Elektron-Wechselwirkung anwenden. Dazu führen wir die mittlere „kinetische Energie“ und Dichte des i 'ten Einteilchenzustands ein

$$t_i(\mathbf{x}) = \sum_{m_s} |\nabla \psi_i(\mathbf{x}, m_s)|^2 \quad \text{und} \quad n_i(\mathbf{x}) = \sum_{m_s} |\psi_i(\mathbf{x}, m_s)|^2. \quad (2.89)$$

Der Erwartungswert des Hamilton-Operators lautet dann

$$\langle \psi^{\text{SD}} | H | \psi^{\text{SD}} \rangle = \sum_i \int \left(\frac{\hbar^2}{2m} t_i(\mathbf{x}) - Z e^2 \frac{n_i(\mathbf{x})}{r} \right) + \frac{e^2}{2} \sum_{i \neq j} \int \frac{n_i(\mathbf{x}) n_j(\mathbf{y})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} - A, \quad (2.90)$$

wobei A die so-genannte *Austauschenergie* ist,

$$A = \frac{e^2}{2} \sum_{i \neq j, m_s, m'_s} \int d^3x d^3y \frac{\psi_j^\dagger(\mathbf{x}, m_s) \psi_j(\mathbf{y}, m'_s) \psi_i^\dagger(\mathbf{y}, m'_s) \psi_i(\mathbf{x}, m_s)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}. \quad (2.91)$$

Die „richtigen“ Einteilchenfunktionen minimieren nun $\langle \psi^{\text{SD}} | H | \psi^{\text{SD}} \rangle$ unter der Nebenbedingung $\langle \psi^{\text{SD}} | \psi^{\text{SD}} \rangle = 1$.

Bevor wir die entsprechenden Gleichungen für die Wellenfunktionen herleiten, 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 (2.90) 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 Austauschterm, dann vereinfacht sich der Erwartungswert (2.90) zum Thomas-Fermi-Funktional, dessen Variation auf die Thomas-Fermi-Gleichung führt.

Wir kommen nun zur Herleitung der Hartree-Fock-Gleichungen. Die Variation des Erwartungswertes (2.90) ist

$$\begin{aligned} \delta \langle \psi^{\text{SD}} | H | \psi^{\text{SD}} \rangle = & \sum_{i, m_s} \int d^3x \delta \psi_i^\dagger(\xi) \left\{ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{Ze^2}{r} + e^2 \sum_{j \neq i} \int d^3y \frac{n_j(\mathbf{y})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \right) \psi_i(\xi) \right. \\ & \left. - e^2 \sum_{j \neq i, m'_s} \int d^3y \frac{\psi_i(\mathbf{y}, m'_s) \psi_j^\dagger(\mathbf{y}, m'_s)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \cdot \psi_j(\xi) \right\}. \quad (2.92) \end{aligned}$$

Die Nebenbedingungen $\int |\psi_i|^2 = 1$ berücksichtigen wir durch Einführung von N Lagrange-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:

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{Ze^2}{r} + e^2 \sum_{j \neq i} \int d^3y \frac{n_j(\mathbf{y})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} - \varepsilon_i \right) \psi_i(\mathbf{x}, m_s) \\ = & e^2 \sum_{j \neq i, m'_s} \int d^3y \frac{\psi_i(\mathbf{y}, m'_s) \psi_j^\dagger(\mathbf{y}, m'_s)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \psi_j(\mathbf{x}, m_s), \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.93) \end{aligned}$$

Zur Lösung dieser nichtlinearen Integro-Differentialgleichungen verwendet man die Methode der sukzessiven Approximation. Als nullte Näherung wählt man die Eigenfunktionen ψ_i^0 wasserstoffähnlicher Atome mit Kernladungszahl Z und berechnet damit die Integrale in (2.93). Diese Werte für die Integrale setzt man nun in (2.93) 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 [3]. Die Ergebnisse dieser Rechnungen stimmen mit dem Experiment gut überein. Seither ist das Verfahren vielfach zur Berechnung von Eigenfunktionen und Energien von komplizierteren Atomen verwen-

det worden. Die praktische Auswertung dieser Methode stößt aber auf große numerische Schwierigkeiten bei der Lösung des Integrodifferentialgleichungssystems (2.93).

2.3 Aufgaben zu Kapitel 2

Aufgabe 1: Mehrkörpersysteme: Gegeben sei ein 2-Teilchen-Operator

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

und eine Produktwellenfunktion

$$\psi = \psi_1(1)\psi_2(2)\psi_3(3)$$

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

Aufgabe 2: Dreikörperproblem: Wir betrachten ein System von drei Teilchen mit gleichen Massen m und Paarwechselwirkungen

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

Zeige, dass der Hamilton-Operator

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

folgende Form hat

$$H^{(3)} = H_{\text{cm}} + H_{\text{rel}}^{(3)} \quad \text{mit} \quad H_{\text{cm}} = \frac{\mathbf{P}^2}{2M},$$

Gesamtimpuls $\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3$ und dem Operator für die Relativbewegung, der die Summe von Zweiteilchen-Operatoren ist,

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

Bestimme diese Operatoren inklusive reduzierter Masse.

Kommutiert H_{cm} mit den H_{ij} ? Kommutieren die H_{ij} im Allgemeinen? Was schliessen Sie, wenn sie kommutieren würden?

Aufgabe 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?

Kapitel 3

Addition von Drehimpulsen mit Anwendungen

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

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

Bei der Diskussion des Drehimpulses haben wir gezeigt, dass \mathbf{J}^2 und J_z gleichzeitig diagonalisiert werden können¹

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

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)

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y, \quad \text{mit} \quad J_{-}^{\dagger} = J_{+}, \quad (3.3)$$

wirken auf diese Drehimpuls-Eigenzustände gemäß

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

¹In diesem Abschnitt bezeichnet V_z die Projektion von \mathbf{V} auf die z-Achse.

Für jedes halbganze j gibt es eine $2j + 1$ -dimensionale irreduzible Darstellung der Drehimpulsalgebra. Der Darstellungsraum wird mit \mathfrak{h}_j bezeichnet.

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 für die Berechnung der Energie-Eigenwerte von Bedeutung.

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

$$|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \quad (3.5)$$

und hat die Dimension

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

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

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

Der Gesamtdrehimpuls

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 \quad (3.8)$$

erfüllt ebenfalls die Drehimpulsalgebra, und wir können die gemeinsamen Eigenzustände von \mathbf{J}^2 und J_z suchen. Da weiterhin \mathbf{J}_1^2 und \mathbf{J}_2^2 mit \mathbf{J} vertauschen, sind $\mathbf{J}^2, J_z, \mathbf{J}_1^2$ und \mathbf{J}_2^2 verträgliche Observablen und können gleichzeitig diagonalisiert werden. Wir bezeichnen die entsprechenden orthonormierten Zustände mit $|j_1 j_2 j m\rangle$:

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

Die Zustände $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$ bzw. $|j_1 j_2 j m\rangle$ bilden zwei orthonormierte Basissysteme von

$\mathfrak{h}_{j_1 j_2}$. Wir wollen herausfinden, wie man die Vektoren $|j_1 j_2 j m\rangle$ als Linearkombination der Vektoren $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$ ausdrücken kann,

$$|j_1 j_2 j m\rangle = \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m\rangle |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle. \quad (3.10)$$

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

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m\rangle \quad (3.11)$$

sind die bekannten *Clebsch-Gordan-Koeffizienten* (CG-Koeffizienten). Die wichtigsten Koeffizienten findet man im Buch von E. CONDON und G. SHORTLEY tabelliert [7]. Dabei muss man beachten, dass die Bezeichnungen für die Koeffizienten nicht einheitlich sind. Häufig verwendete Symbole sind

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m\rangle = \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m\rangle = C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m}. \quad (3.12)$$

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 die wichtigsten Eigenschaften dieser Koeffizienten ableiten. Da J_z ein hermitescher Operator ist, gilt

$$m \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m\rangle = \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | J_z | j_1 j_2 j m\rangle = (m_1 + m_2) \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m\rangle$$

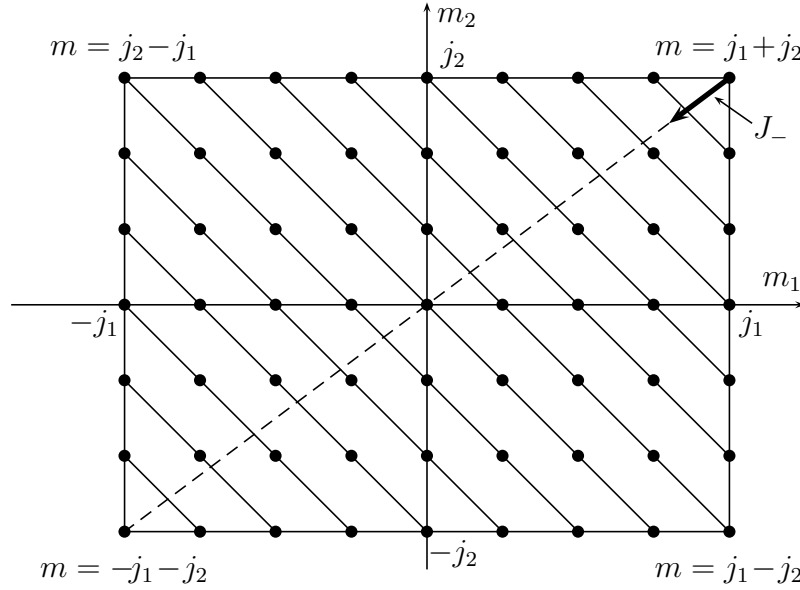
und die Clebsch-Gordan Koeffizienten sind nur ungleich Null, wenn die Auswahlregel

$$m = m_1 + m_2 \quad (3.13)$$

erfüllt ist. Damit gilt

$$|j_1 j_2 j m\rangle = \sum_{m_1 + m_2 = m} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m\rangle |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle. \quad (3.14)$$

Wir wollen nun die Entartung der Eigenwerte m von J_z bestimmen. Wegen der Bedingung (3.13) 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 den Produktzustand $|j_1 j_1\rangle \otimes |j_2 j_2\rangle$ mit maximalen J_{iz} -Eigenwerten. Dieser wird von den

Abbildung 3.1: Mögliche Werte von m_1, m_2 und Wirkung von J_-

beiden Aufsteigeoperatoren J_{i+} vernichtet. Wegen

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 &= (\mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2)^2 = \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + 2\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2 \\ &= \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + 2J_{1z}J_{2z} + J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+} \end{aligned} \quad (3.15)$$

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

$$j_1(j_1 + 1) + j_2(j_2 + 1) + 2j_1j_2 = (j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1).$$

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

$$|j_1j_2jm\rangle \quad \text{mit} \quad j = j_1 + j_2, \quad -j \leq m \leq j.$$

Das Gesamtsystem enthält 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 :

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \quad (\text{Dreiecksregel}). \quad (3.16)$$

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

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

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:

$$\mathfrak{h}_{j_1} \otimes \mathfrak{h}_{j_2} = \mathfrak{h}_{j_1+j_2} \oplus \mathfrak{h}_{j_1+j_2-1} \oplus \dots \oplus \mathfrak{h}_{|j_1-j_2|}. \quad (3.17)$$

In der Gruppentheorie bezeichnet man die Multipletts oft mit ihrer Dimension, zum Beispiel $\mathbf{3}$ für die von den drei Zuständen in \mathfrak{h}_1 aufgespannten Unterraum. 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, Triplet und Quintett,

$$\mathbf{3} \otimes \mathbf{3} = \mathbf{1} \oplus \mathbf{3} \oplus \mathbf{5}, \quad (3.18)$$

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

$$\mathbf{2} \otimes \mathbf{2} = \mathbf{1} \oplus \mathbf{3}. \quad (3.19)$$

3.2 Clebsch-Gordan Koeffizienten

Wir wenden uns den Eigenschaften der Entwicklungskoeffizienten (3.12) und ihrer Berechnung zu. Statt die $|j_1 j_2 j m\rangle$ 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 $|j_1 j_2 j m\rangle$ entwickeln,

$$|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = \sum_{j,m} \langle j_1 j_2 j m | j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle |j_1 j_2 j m\rangle. \quad (3.20)$$

Die Matrixelemente

$$\langle j_1 j_2 j m | j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle \quad (3.21)$$

sind die *inversen Clebsch-Gordan-Koeffizienten*. Wie diese erfüllen sie Orthogonalitätsrelationen, da sie den Basiswechsel zwischen zwei orthonormierten Basen vermitteln,

$$\sum_{j,m} \langle j_1 m'_1 j_2 m'_2 | j_1 j_2 j m \rangle \langle j_1 j_2 j m | j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}. \quad (3.22)$$

Dabei wird über alle der Dreiecksungleichung (3.16) genügenden j und entsprechenden m summiert. Die CG-Koeffizienten erfüllen

$$\sum_{m_1+m_2=m} \langle j_1 j_2 j m | j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j' m' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'}. \quad (3.23)$$

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

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

und (3.23) wird für $j = j'$ und $m = m'$ zu

$$\sum_{m_1+m_2=m} \langle j_1 j_2 j m | j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle^2 = 1. \quad (3.24)$$

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

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | J_{\pm} | j_1 j_2 j m \rangle$$

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

$$c_{jm}^{\pm} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j, m \pm 1 \rangle$$

und die Wirkung auf den Bra-Vektor

$$c_{j_1 m_1}^{\mp} \langle j_1, m_1 \mp 1, j_2 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle + c_{j_2 m_2}^{\mp} \langle j_1 m_1 j_2, m_2 \mp 1 | j_1 j_2 j m \rangle.$$

Dies ergibt die beiden Rekursionsformeln

$$\begin{aligned} & c_{jm}^{\pm} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j, m \pm 1 \rangle \\ &= c_{j_1 m_1}^{\mp} \langle j_1, m_1 \mp 1, j_2 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle + c_{j_2 m_2}^{\mp} \langle j_1 m_1 j_2, m_2 \mp 1 | j_1 j_2 j m \rangle \end{aligned} \quad (3.25)$$

für die Clebsch-Gordan Koeffizienten oder die Rekursionsrelationen

$$\begin{aligned} & c_{jm}^{\pm} \langle j_1 j_2 j, m \pm 1 | j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle \\ &= c_{j_1 m_1}^{\mp} \langle j_1 j_2 j m | j_1, m_1 \mp 1, j_2 m_2 \rangle + c_{j_2 m_2}^{\mp} \langle j_1 j_2 j m | j_1 m_1 j_2, m_2 \mp 1 \rangle \end{aligned} \quad (3.26)$$

für die inversen Koeffizienten. Zusammen mit (3.24) 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 $|j_1 j_2 j m\rangle$, 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

$$\mathfrak{h}_0 \otimes \mathfrak{h}_{\frac{1}{2}} = \mathfrak{h}_{\frac{1}{2}} \quad \text{und} \quad \mathfrak{h}_\ell \otimes \mathfrak{h}_{\frac{1}{2}} = \mathfrak{h}_{\ell-\frac{1}{2}} \oplus \mathfrak{h}_{\ell+\frac{1}{2}} \quad (3.27)$$

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

$$\langle 00 \frac{1}{2} m_s | \frac{1}{2} m \rangle = \delta_{m, m_s}. \quad (3.28)$$

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

$$\langle \ell \ell \frac{1}{2} \frac{1}{2} | \ell + \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2} \rangle = 1. \quad (3.29)$$

Hier benutzen wir (3.25) mit dem unteren Vorzeichen und mit $j_2 = m_2 = \frac{1}{2}$,

$$c_{jm}^- \langle \ell m_\ell \frac{1}{2} \frac{1}{2} | j, m-1 \rangle = c_{\ell m_\ell}^+ \langle \ell, m_\ell + 1, \frac{1}{2} \frac{1}{2} | jm \rangle \quad (3.30)$$

wobei die Auswahlregeln (3.13) und (3.16) für die Drehimpulsquantenzahlen zu beachten sind. Wir schließen mit $m \rightarrow m+1$

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

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

$$\langle \ell, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \frac{1}{2} | \ell + \frac{1}{2}, m \rangle = \sqrt{\frac{\ell + m + \frac{1}{2}}{\ell + m + \frac{3}{2}}} \langle \ell, m + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \frac{1}{2} | \ell + \frac{1}{2}, m + 1 \rangle.$$

Vermittels Iteration dieser Relation und unter Benutzung von (3.29) findet man dann

$$\langle \ell, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \frac{1}{2} | \ell + \frac{1}{2}, m \rangle = \sqrt{\frac{\ell + m + \frac{1}{2}}{2\ell + 1}}. \quad (3.31)$$

Die verbleibenden Clebsch-Gordan Koeffizienten für die Spin-Bahn Kopplung werden analog berechnet. Das Resultat ist in der folgenden Tabelle für die Koeffizienten $\langle \ell m_\ell \frac{1}{2} m_s | jm \rangle$

mit $m_\ell = m - m_s$, zusammengestellt.

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

Die Clebsch-Gordan Koeffizienten $\langle \ell m_\ell 1 m_2 | j m \rangle$ für die Kopplung zweier Systeme mit Drehimpulsen ℓ und 1 lauten

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

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 sogenannten *3j-Symbole* von WIGNER zu benutzen, bei denen die drei Drehimpulse \mathbf{J} , \mathbf{J}_1 und \mathbf{J}_2 symmetrisch behandelt werden. Diese sind folgendermaßen mit den Clebsch-Gordan Koeffizienten verbunden,

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1-j_2-m_3}}{\sqrt{2j_3+1}} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_3, -m_3 \rangle. \quad (3.32)$$

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

$$\begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (3.33)$$

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 $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$. Es sei also S ein Skalar,

$$\Gamma(U)S\Gamma(U^{-1}) = S \quad \text{oder} \quad [\mathbf{J}, S] = 0, \quad (3.34)$$

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

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

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

$$\langle jm | S | j'm' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \langle jm | S | jm \rangle. \quad (3.35)$$

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 $J_+ S J_-$ auf zwei Arten. Zuerst wirken wir mit J_- auf den Ket und mit J_+ auf das Bra,

$$\langle jm | J_+ S J_- | jm \rangle \stackrel{(3.4)}{=} (c_{jm}^-)^2 \langle j, m-1 | S | j, m-1 \rangle.$$

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

$$\langle jm | S J_+ J_- | jm \rangle \stackrel{(3.4)}{=} c_{j,m-1}^+ c_{jm}^- \langle jm | S | jm \rangle = (c_{jm}^-)^2 \langle jm | S | jm \rangle.$$

Die rechten Seiten der beiden letzten Gleichungen müssen übereinstimmen und deshalb sind die Matrixelemente $\langle jm | S | jm \rangle$ unabhängig von m ,

$$\langle jm|S|j'm'\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'}\langle j||S||j\rangle. \quad (3.36)$$

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,

$$\Gamma(U)|jm\rangle = \sum_{m'} D_{m'm}^j |jm'\rangle, \quad D_{m'm}^j(U) = \langle jm'|\Gamma(U)|jm\rangle. \quad (3.37)$$

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

$$\Gamma(U)|j_1m_1j_2m_2\rangle = \sum_{m'_1, m'_2} D_{m'_1m_1}^{j_1} D_{m'_2m_2}^{j_2} |j_1m'_1j_2m'_2\rangle. \quad (3.38)$$

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

$$\Gamma(U)T_m^j\Gamma^{-1}(U) = \sum_{m'} D_{m'm}^j(U)T_{m'}^j, \quad U \in SU(2). \quad (3.39)$$

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

$$\Gamma(U)T_M^J|jm\rangle = \Gamma(U)T_M^J \underbrace{\Gamma(U)^{-1}\Gamma(U)}_{\mathbb{1}} |jm\rangle = \sum_{M', m'} D_{M'M}^J D_{m'm}^j T_{M'}^J |jm'\rangle. \quad (3.40)$$

Sie sollten sich also in Multipletts mit Drehimpulsen zwischen $J+j$ und $|J-j|$ gruppieren. Um die infinitesimale Version von (3.39) zu erhalten, setzen wir auf der linken Seite dieser

Gleichung $\Gamma(U) = \exp(-i\boldsymbol{\alpha}\mathbf{J})$ und bemerken, dass die Normalkomponenten T_m^j genauso transformieren wie die Eigenzustände $|jm\rangle$. Damit ergeben sich folgende Kommutatoren für die Drehimpulse und Normalkomponenten eines Tensoroperators,

$$[J_{\pm}, T_m^j] = c_{jm}^{\pm} T_{m\pm 1}^j \quad \text{und} \quad [J_3, T_m^j] = mT_m^j. \quad (3.41)$$

Mit Hilfe des letzten Kommutators finden wir

$$J_3 T_M^J |jm\rangle = (T_M^J J_3 + M T_M^J) |jm\rangle = (m + M) T_M^J |jm\rangle. \quad (3.42)$$

Die Normalkomponente T_M^J eines Tensoroperators erhöht den J_z -Eigenwert um M und es folgt eine *erste Auswahlregel*

$$m \neq M + m' \implies \langle jm | T_M^J | j' m' \rangle = 0. \quad (3.43)$$

Die Zustände $T_M^J |jm\rangle$ sind im Allgemeinen nicht Eigenvektoren von \mathbf{J}^2 .

Nun betrachten wir Matrixelemente der ersten Vertauschungsrelation in (3.41)

$$\langle jm | J_{\mp} T_M^J - T_M^J J_{\mp} - c_{jM}^{\mp} T_{M\mp 1}^J | j' m' \rangle = 0$$

und finden die Rekursionsrelationen

$$\begin{aligned} & c_{jm}^{\pm} \langle j, m \pm 1 | T_M^J | j' m' \rangle \\ &= c_{jM}^{\mp} \langle jm | T_{M\mp 1}^J | j' m' \rangle + c_{j'm'}^{\mp} \langle jm | T_M^J | j', m' \mp 1 \rangle \end{aligned} \quad (3.44)$$

Diese Gleichungen sind identisch zu den Rekursionrelationen (3.26) für die inversen Clebsch-Gordan Koeffizienten, und dies beweist das

Wigner-Eckart Theorem: Sind $\langle jm | T_M^J | j' m' \rangle$ die Matrixelemente der Normalkomponenten eines Tensoroperators der Ordnung J und $|jm\rangle$ und $|j'm'\rangle$ die Eigenvektoren des Drehimpuls-Operators, dann gilt

$$\langle jm | T_M^J | j' m' \rangle = \langle jm | JM j' m' \rangle \langle j || T^J || j' \rangle \quad (3.45)$$

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

Das Theorem impliziert die *zweite Auswahlregel*

$$\langle jm | T_M^J | j' m' \rangle = 0 \quad \text{für} \quad j \notin \{j' + J, j' + J - 1, \dots, |j' - J|\}. \quad (3.46)$$

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

$T_{i_1 \dots i_j}^j$ von T^j einführen. Diese transformieren unter Drehungen gemäß

$$\Gamma(R)T_{i_1 \dots i_j}^j\Gamma(R^{-1}) = R_{i'_1 i_1} \dots R_{i'_j i_j} T_{i'_1 \dots i'_j}^j, \quad R \in SO(3). \quad (3.47)$$

Aber von den 3^j kartesischen Komponenten eines irreduziblen Tensors T^j können nur $2j + 1$ linear unabhängig sein. Mit Ausnahme der skalaren und vektoriellen Operatoren gibt es algebraische Beziehungen zwischen den kartesischen Komponenten.

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

$$Y_{11} = -\frac{c}{\sqrt{2}}(x + iy), \quad Y_{10} = c \cdot z, \quad Y_{1-1} = \frac{c}{\sqrt{2}}(x - iy), \quad (3.48)$$

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

$$V_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(V_x + iV_y), \quad V_0 = V_z, \quad V_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(V_x - iV_y). \quad (3.49)$$

Die Vertauschungsrelationen $[J_i, V_j] = i\epsilon_{ijk}V_k$ für die kartesischen Komponenten sind äquivalent zu den Vertauschungsrelationen (3.41) mit $j = 1$ für die Normalkomponenten V_m . Für einen Vektoroperator lautet das Wigner-Eckart-Theorem

$$\langle jm|V_M|j'm'\rangle = \langle jm|1Mj'm'\rangle \langle j||V||j'\rangle. \quad (3.50)$$

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

$$J_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}J_+, \quad J_0 = J_z, \quad J_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}J_-. \quad (3.51)$$

Die linke Seite von

$$\langle jm|J_M|j'm'\rangle = \langle jm|1Mj'm'\rangle \langle j||J||j'\rangle \quad (3.52)$$

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

$$\langle j||J||j'\rangle = 0 \quad \text{für } j \neq j'. \quad (3.53)$$

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

$$\langle jj|J_0|jj\rangle = \langle jj|10jj\rangle \langle j||J||j\rangle.$$

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 auf Seite 36. Es ergibt

sich das reduzierte Matrixelement

$$\langle j||\mathbf{J}||j\rangle = \sqrt{j(j+1)},$$

und (3.52) nimmt folgende Form an

$$\langle jm|1Mjm'\rangle = \frac{\langle jm|J_M|jm'\rangle}{\sqrt{j(j+1)}}. \quad (3.54)$$

Wir können dieses Resultat in (3.50) mit $j = j'$ verwenden,

$$\langle jm|V_M|jm'\rangle = \langle jm|J_M|jm'\rangle \frac{\langle j||V||j\rangle}{\sqrt{j(j+1)}}. \quad (3.55)$$

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

$$\langle jm|\mathbf{V}|jm'\rangle = \langle jm|\mathbf{J}|jm'\rangle \frac{\langle j||V||j\rangle}{\sqrt{j(j+1)}}. \quad (3.56)$$

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

$$\begin{aligned} \langle jm|\mathbf{V} \cdot \mathbf{J}|jm''\rangle &= \langle jm|\mathbf{J}^2|jm''\rangle \frac{\langle j||V||j\rangle}{\sqrt{j(j+1)}} \\ &= \delta_{mm''} \sqrt{j(j+1)} \langle j||V||j\rangle \end{aligned} \quad (3.57)$$

und eingesetzt in (3.56) die Formel

$$\begin{aligned} \langle jm|\mathbf{V}|jm'\rangle &= \langle jm|\mathbf{J}|jm'\rangle \frac{\langle jm|\mathbf{V} \cdot \mathbf{J}|jm\rangle}{j(j+1)} \\ &= \langle jm|\mathbf{J}|jm'\rangle \frac{\langle j||\mathbf{V} \cdot \mathbf{J}||j\rangle}{j(j+1)}. \end{aligned} \quad (3.58)$$

Da $\mathbf{V} \cdot \mathbf{J}$ ein skalarer Operator ist, konnten wir im letzten Schritt die Formel (3.36) anwenden. Bis auf eine j -abhängige Konstante sind die Matrixelemente von \mathbf{V} und \mathbf{J} auf dem Unterraum \mathfrak{h}_j gleich. Dies bedeutet nicht, dass die Operatoren proportional sind. Im Gegensatz zu \mathbf{J} wird ein allgemeiner Vektoroperator nicht-verschwindende Matrixelemente $\langle jm|\mathbf{V}|j \pm 1, m'\rangle$ haben. Man kann die Formel (3.57) allerdings benutzen, um das reduzierte Matrixelement von \mathbf{V} in einem Unterraum mit festem Drehimpuls zu berechnen. Der Matrixelemente des skalaren Operators $\mathbf{V} \cdot \mathbf{J}$ sind nur ungleich Null für $m = m'$.

3.3.3 Berechnung von Landé-Faktoren

Wir werden mit Hilfe des Wigner-Eckart-Theorems den Einfluss eines magnetischen Feldes \mathbf{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 $\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \dots + \mathbf{L}_N$ der Gesamtbahndrehimpuls der N Atomelektronen und $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \dots + \mathbf{S}_N$ ihr Gesamtspin. Für einen verschwindenden Kernspin ist der gesamte Drehimpuls des Atoms

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}. \quad (3.59)$$

Bei Abwesenheit des Magnetfeldes bezeichnen wir den Hamilton-Operator mit H_0 . Wegen der Invarianz des ungestörten Atoms gegenüber einer Drehung aller Elektronen um den Kern vertauscht H_0 mit dem gesamten Drehimpuls. Wir nehmen an, dass $H_0, \mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2, \mathbf{J}^2$ und J_z einen *vollständigen* Satz von verträglichen Observablen bilden und bezeichnen die gemeinsamen Eigenfunktionen mit $|E_0 LSJM\rangle$,

$$H_0 \rightarrow E_0, \quad \mathbf{L}^2 \rightarrow L(L+1), \quad \mathbf{S}^2 \rightarrow S(S+1), \quad \mathbf{J}^2 \rightarrow J(J+1), \quad J_z \rightarrow M. \quad (3.60)$$

Diese Annahme ist nur für gewisse leichte Atome erfüllt, für welche die Drehimpulskopplung von der Form $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ ist. Für schwere Edelgase ist dies aber nicht wahr. Wir werden später darauf zurückkommen.

Wegen $[H_0, \mathbf{J}] = 0$ haben alle $2J+1$ Zustände

$$|E_0 LSJM\rangle \quad \text{mit} \quad M = -J, \dots, J-1, J \quad (3.61)$$

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

In Gegenwart eines Magnetfeldes $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ wird der Hamilton-Operator des Atoms

$$H = H_0 + H_1, \quad \text{mit} \quad H_1 = \omega_L(L_z + 2S_z), \quad (3.62)$$

wobei der Faktor 2 vor S_z vom gyromagnetischen Verhältnis des Elektronenspins herrührt. Wir haben die *Larmor-Frequenz* ω_L des Elektrons eingeführt,

$$\omega_L = -\frac{qB}{2m} = -\frac{\mu_B}{\hbar}B, \quad (3.63)$$

worin μ_B das Bohr-Magneton bezeichnet.

Wir berechnen den Einfluss des Magnetfeldes in erster Ordnung Störungstheorie. Dazu müssen wir die Matrixelemente von H_1 auf dem Unterraum $\mathcal{H}(E_0, L, S, J)$ untersuchen. Auf diesem Unterraum gilt nach dem Projektionssatz (3.58)

$$\mathbf{L} = \frac{\langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{J} \rangle_{E_0 L S J}}{J(J+1)} \mathbf{J} \quad \text{und} \quad \mathbf{S} = \frac{\langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{J} \rangle_{E_0 L S J}}{J(J+1)} \mathbf{J} \quad (3.64)$$

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

$$\begin{aligned} \mathbf{L} \cdot \mathbf{J} &= \mathbf{L} \cdot (\mathbf{L} + \mathbf{S}) = \mathbf{L}^2 + \frac{1}{2} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) \\ \mathbf{S} \cdot \mathbf{J} &= \mathbf{S} \cdot (\mathbf{L} + \mathbf{S}) = \mathbf{S}^2 + \frac{1}{2} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) \end{aligned} \quad (3.65)$$

ergeben sich folgende reduzierten Matrixelemente,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{J} \rangle_{E_0 L S J} &= L(L+1) + \frac{1}{2} (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)) \\ \langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{J} \rangle_{E_0 L S J} &= S(S+1) + \frac{1}{2} (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)). \end{aligned} \quad (3.66)$$

Setzt man dies in (3.64) und dann in (3.62) ein, so wird der Störoperator H_1 im Unterraum $\mathcal{H}(E_0, L, S, J)$ durch

$$H_1 = g_J \omega_L J_z \quad (3.67)$$

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

$$g_J = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (3.68)$$

Aus Gleichung (3.67) folgt, dass im betrachteten Unterraum die Eigenzustände von H_1 die Basisvektoren $|E_0 L S J M\rangle$ mit den Eigenwerten

$$\Delta E_1 = \hbar \omega_L g_J M \quad (3.69)$$

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

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r} \quad \text{mit Energien} \quad E_n = -\frac{1}{2}\mu c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \quad (3.70)$$

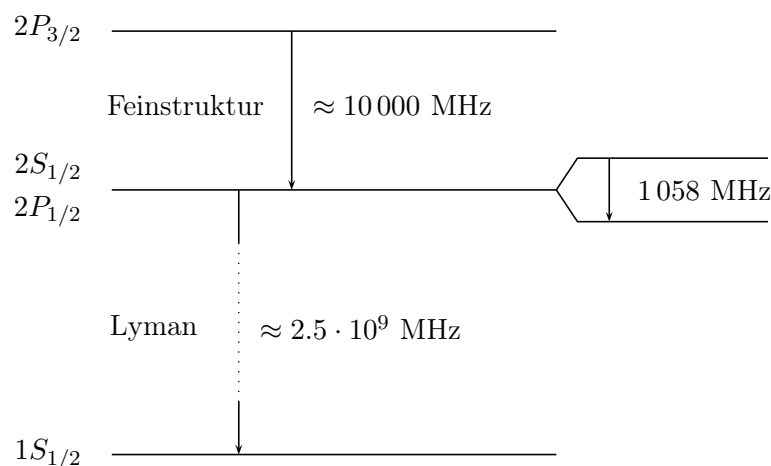
zugrunde. Nach Abspaltung der Schwerpunktsbewegung wurde im Ausdruck für die Relativbewegung die Elektronenmasse m_e durch die reduzierte Masse μ ersetzt. Diese unterscheidet sich kaum von der Elektronenmasse,

$$\frac{\mu}{m_e} \approx 1 - \frac{m_e}{\mu} \approx 1 - 5.4 \cdot 10^{-4}. \quad (3.71)$$

Schon 1887 hat MICHELSON mit Hilfe der Interferometer-Methode gesehen, dass die Balmer-Linien in Dubletts von konstanter Wellenzahldifferenz aufspalten [17]. Eine relativ genaue Bestimmung der Dublett-Abstände gelang G. HANSEN, der mit Mitteln der Zeiss-Werke 1925 folgende Werte für die Linien der Balmer-Serie fand [18]

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

Bereits 1916 gelang ARNOLD SOMMERFELD eine Deutung dieser Aufspaltung auf Grund des Bohrschen Atommodells. Die Aufspaltung der Linien der Balmer-Serie kommt 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. Ihre Berechnung verlangt Grundkenntnisse über quantisierte Felder.

3.4.1 Feinstruktur

In einer realistischen Behandlung von Atomen müssen wir mehrere, teilweise spinabhängige, Korrekturen berücksichtigen. Dies sind die relativistische Korrektur der nichtrelativistischen kinetischen Energie in (3.70), 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

$$T = \sqrt{(\mathbf{p}c)^2 + (m_e c^2)^2} - m_e c^2 \approx \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} - \frac{1}{8} \frac{(\mathbf{p}^2)^2}{m_e^3 c^2} + \dots = T_0 + T_1 + \dots \quad (3.72)$$

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

$$T_1 = -\frac{1}{2m_e c^2} \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} \right)^2 = -\frac{1}{2m_e c^2} \left(H_0 + \frac{Ze^2}{r} \right) \left(H_0 + \frac{Ze^2}{r} \right),$$

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

$$\begin{aligned} \langle nlm|T_1|nlm\rangle &= -\frac{1}{2m_e c^2} \left(E_n^2 + 2E_n Z e^2 \langle nlm|\frac{1}{r}|nlm\rangle + Z^2 e^4 \langle nlm|\frac{1}{r^2}|nlm\rangle \right) \\ &= E_n (Z\alpha)^2 \left(\frac{1}{n(\ell + \frac{1}{2})} - \frac{3}{4n^2} \right), \quad E_n = -\frac{m_e c^2 (Z\alpha)^2}{2}. \end{aligned} \quad (3.73)$$

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

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{eg}{2m_e c} \mathbf{S} \quad (3.74)$$

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 $\mathbf{E} = -\nabla\phi(r)$. Nach der speziellen Relativitätstheorie sieht ein mit der Geschwindigkeit $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m_e$ relativ zum Kern bewegtes Elektron neben dem Coulombfeld ein Magnetfeld, das zur ersten Ordnung in v/c gegeben wird durch $\mathbf{B} = -\mathbf{v} \wedge \mathbf{E}/c$. Die Energie des magnetischen Moments in diesem Magnetfeld ist

$$\begin{aligned} -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} &= \frac{eg}{2m_e c} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \stackrel{g \approx 2}{\approx} \frac{e}{m_e c^2} \mathbf{S} \cdot (\mathbf{v} \wedge \mathbf{E}) = \frac{e}{m_e^2 c^2} \mathbf{S} \cdot (\mathbf{p} \wedge \nabla\phi(r)) \\ &= \frac{e}{m_e^2 c^2} \mathbf{S} \cdot (\mathbf{p} \wedge \mathbf{r}) \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} = -\frac{e}{m_e^2 c^2} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \end{aligned} \quad (3.75)$$

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

$$H_{\text{SB}} = -\frac{e}{2m_e^2 c^2} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \frac{1}{r} \frac{d\phi(r)}{dr}. \quad (3.76)$$

Er beschreibt die Wechselwirkung des magnetischen Moments des Elektronenspin mit dem durch die Elektronenbewegung im elektrostatischen Feld des Atomkerns „gesehen“ magnetischen Felds. 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

$$H = H_0 + H_{\text{SB}} = H_0 + \frac{Ze^2}{2m_e^2 c^2} \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}}{r^3} \quad (3.77)$$

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

$$\langle H_{\text{SB}} \rangle \approx \frac{Ze^2}{2m_e^2 c^2} \frac{\hbar^2}{a_0^3} = Z\alpha^4 m_e c^2 = 13.6 \text{ eV } Z\alpha^2. \quad (3.78)$$

Die Korrekturen aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung sind also vergleichbar mit denjenigen

von T_1 . Zur Berechnung der Aufspaltung in erster Ordnung Störungstheorie berechnen wir die Erwartungswerte von H_{SB} mit Hilfe von

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} = \frac{1}{2} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) \quad (3.79)$$

in den normierten Eigenzuständen von H_0 , \mathbf{J}^2 und J_z . Die Kopplung des Elektronenspin mit dem Bahndrehimpuls ℓ ergibt wegen

$$\mathfrak{h}_\ell \otimes \mathfrak{h}_{\frac{1}{2}} = \mathfrak{h}_{\ell+\frac{1}{2}} \oplus \mathfrak{h}_{\ell-\frac{1}{2}}$$

für $\ell > 0$ die beiden Gesamtdrehimpulse $\ell \pm \frac{1}{2}$ mit den entsprechenden Eigenzuständen

$$|n\ell\frac{1}{2}jm\rangle \quad \text{mit} \quad j = \ell \pm \frac{1}{2}. \quad (3.80)$$

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

$$\langle n\ell\frac{1}{2}jm | H_{\text{SB}} | n\ell\frac{1}{2}jm \rangle = \frac{Ze^2}{2m_e^2 c^2} \langle \ell\frac{1}{2}jm | \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} | \ell\frac{1}{2}jm \rangle \int dr r^2 f_{n\ell}^2(r) \frac{1}{r^3}. \quad (3.81)$$

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

$$\int dr r^2 f_{n\ell}^2(r) \frac{1}{r^3} = \frac{Z^3}{a_0^3} \frac{1}{n^3 \ell (\ell + \frac{1}{2}) (\ell + 1)}, \quad (3.82)$$

und führt auf folgenden Ausdruck für das gesuchte Matrixelement

$$\langle n\ell\frac{1}{2}jm | H_{\text{SB}} | n\ell\frac{1}{2}jm \rangle = -E_n \left(\frac{Z\alpha}{\hbar} \right)^2 \frac{\langle \ell\frac{1}{2}jm | \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} | \ell\frac{1}{2}jm \rangle}{n\ell(\ell + \frac{1}{2})(\ell + 1)} \quad (3.83)$$

für positive ℓ . Je nachdem ob $j = \ell + \frac{1}{2}$ oder $j = \ell - \frac{1}{2}$ ist findet man mit Hilfe von (3.79)

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{SB}} &= -E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{2n} \frac{1}{(\ell + \frac{1}{2})(\ell + 1)} \quad \text{für} \quad j = \ell + \frac{1}{2} \\ \Delta E_{\text{SB}} &= E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{2n} \frac{1}{\ell(\ell + \frac{1}{2})} \quad \text{für} \quad j = \ell - \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (3.84)$$

Feinstruktur des Wasserstoffatoms

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

$$\Delta E_{\text{FS}} = E_n (Z\alpha)^2 \frac{1}{n} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right). \quad (3.85)$$

für beide Werte von $\ell = j \pm \frac{1}{2}$. In unserer Herleitung haben wir $\ell > 0$ angenommen, da für $\ell = 0$ das Integral (3.82) 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

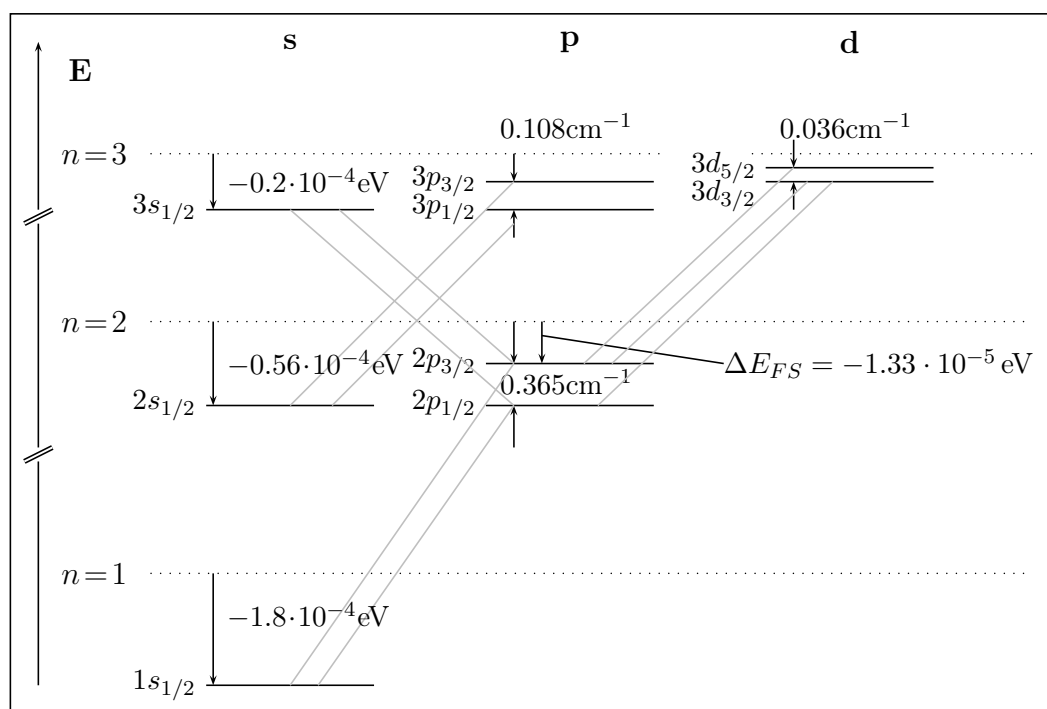


Abbildung 3.2: Termschema des Wasserstoffatoms bei Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung und der relativistischen Massenzunahme. Die gestrichelte Linien geben die Lage der Energieniveaus E_n ohne die Korrekturterme an.

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 $Z^2 E_n$. 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.

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 \mathbf{I} und magnetischen Dipolmoment

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{2m_p c} g_p \mathbf{I}, \quad \text{mit } g_p \approx 5.585. \quad (3.86)$$

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 ,

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{Zq}{2m_N c} g_N \mathbf{I}, \quad (3.87)$$

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

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}) = -\frac{1}{4\pi} (\boldsymbol{\mu} \wedge \nabla) \frac{1}{r} = \frac{1}{4\pi} \frac{\boldsymbol{\mu} \wedge \mathbf{x}}{r^3} \quad (3.88)$$

und berechnen daraus das Magnetfeld,

$$\mathbf{B} = \nabla \wedge \mathbf{A} = -\frac{1}{4\pi} \boldsymbol{\mu} \Delta \frac{1}{r} + \frac{1}{4\pi} \nabla (\boldsymbol{\mu} \cdot \nabla) \frac{1}{r} \quad (3.89)$$

oder in Komponenten

$$B_i = \mu_i \delta(r) + \frac{1}{4\pi} \mu_j \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{r}. \quad (3.90)$$

Der Beitrag zur Energie ist

$$H_{\text{HF}} = -\boldsymbol{\mu}_e \cdot \mathbf{B} \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{\mu}_e = \frac{e}{2m_e c} g_e \mathbf{S} \approx \frac{e}{m_e c} \mathbf{S}, \quad (3.91)$$

und nach Einsetzen des vom Kernspin erzeugten Magnetfeldes (3.90) führt dies auf

$$H_{\text{HF}} = -\boldsymbol{\mu}_e \cdot \boldsymbol{\mu} \delta(r) - \frac{1}{4\pi} \mu_{ei} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{r} \right) \mu_j \quad (3.92)$$

Wir berechnen die Aufspaltung der s -Zustände des Wasserstoffatoms. Für kugelsymmetrische Wellenfunktionen ist

$$\begin{aligned} \int d^3x f_{n0}^2(r) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{r} &= \frac{1}{3} \delta_{ij} \int d^3x f_{n0}^2(r) \Delta \left(\frac{1}{r} \right) \\ &= -\frac{4\pi}{3} \delta_{ij} \int d^3x f_{n0}^2(r) \delta^3(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (3.93)$$

Das letzte Integral ist gleich der Wellenfunktion am Ort des Kerns,

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

und wir erhalten schlussendlich

$$\langle n00 | H_{\text{HF}} | n00 \rangle = -\frac{2}{3} \cdot \frac{4}{n^3} \frac{Z^3}{a_0^3} \boldsymbol{\mu}_e \cdot \boldsymbol{\mu} = \frac{4}{3} \left(\frac{e^2}{a_0} \right) g_N \left(\frac{m_e}{m_N} \right) \left(\frac{\alpha^2}{n^3} \right) Z^4 \left(\frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{I}}{\hbar^2} \right), \quad (3.94)$$

wobei E_n die Energien (3.70) der wasserstoffähnlichen Atome bezeichnet. Es sei nun

$$\mathbf{F} = \mathbf{S} + \mathbf{I} \quad (3.95)$$

der gesamte Spin des Kern-Elektron-Systems. Mit der schon öfter benutzten Identität

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

ergibt sich folgende *Aufspaltung* der Niveaus mit *verschwindendem Bahndrehimpuls*

$$\Delta E = \frac{4}{3} \left(\frac{e^2}{a_0} \right) g_N \left(\frac{m_e}{m_N} \right) \left(\frac{\alpha^2}{n^3} \right) Z^4 \left(I + \frac{1}{2} \right). \quad (3.96)$$

Für das *Wasserstoffatom* mit $g_N = g_p$, $I = 1/2$ finden wir folgende Hyperfein-Aufspaltung des Grundzustandes

$$\Delta E = \frac{4}{3} \left(\frac{e^2}{a_0} \right) g_p \left(\frac{m_e}{m_N} \right) \alpha^2. \quad (3.97)$$

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 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 2: Kopplung von drei Drehimpulsen: Wir betrachten Eigenzustände des gesamten Drehimpulses

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 + \mathbf{J}_3,$$

wobei die einzelnen Drehimpulse den Wert 1 haben. Es sei $j(j+1)$ der Eigenwert von \mathbf{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 \mathbf{a}, \mathbf{b} und \mathbf{c} gewöhnliche 3-er Vektoren, dann gibt es genau einen multilinearen Skalar, nämlich $\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})$. Finde einen Zusammenhang zwischen dieser Tatsache und Ihrem Resultat für den Zustand mit $j = 0$.

Aufgabe 3: Vektoroperator: Die kartesischen Komponenten eines Vektoroperators \mathbf{V} erfüllen die Kommutationsregeln

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

Zeigen Sie, dass dann die Normalkomponenten

$$T_0^{(1)} := V_3 \quad \text{und} \quad T_{\pm 1}^{(1)} := \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (V_1 \pm iV_2)$$

folgende Kommutatorrelationen erfüllen

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

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 das elektromagnetische Strahlen 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,

$$H(t) = H_0 + V(t). \quad (4.1)$$

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

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

haben eine Entwicklung in Potenzen des Störpotentials V . Da der Großteil der Zeitentwicklung von H_0 herrührt (V wird als Störung angesehen) ist es ratsam, das *Wechselwirkungs-* oder *Dirac-Bild* wählen. Wir erinnern daran, dass (4.2) in diesem Bild folgendermaßen aussieht:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_W(t)\rangle = V_W(t) |\psi_W(t)\rangle, \quad (4.3)$$

wobei die Zustandsvektoren und die Störung im Wechselwirkungsbild wie folgt aus den entsprechenden Größen im Schrödinger-Bild hervorgehen,

$$|\psi_W\rangle = e^{i(t-t_0)H_0/\hbar}|\psi\rangle \quad \text{und} \quad V_W = e^{i(t-t_0)H_0/\hbar}V e^{-i(t-t_0)H_0/\hbar}. \quad (4.4)$$

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

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

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,

$$|\psi_W(t)\rangle = S(t, t_0)|\psi_W(t_0)\rangle. \quad (4.6)$$

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

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

Damit $|\psi_W\rangle$ die Schrödingergleichung im Wechselwirkungsbild (4.3) erfüllt, muss S dieselbe Gleichung erfüllen,

$$i\hbar \frac{\partial S}{\partial t}(t, t_0) = V_W(t)S(t, t_0),$$

oder die zur Schrödingergleichung plus Anfangsbedingung $S(t_0, t_0) = \mathbb{1}$ äquivalente Integralgleichung

$$S(t, t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t V_W(t_1)S(t_1, t_0)dt_1. \quad (4.7)$$

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 die Gleichung (4.7) mit $S = \mathbb{1}_{\mathcal{H}}$ als Startwert. In erster Ordnung finden wir

$$S(t, t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t V_W(t_1)dt_1, \quad (4.8)$$

und in zweiter Ordnung

$$S(t, t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t V_W(t_1) + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V_W(t_1)V_W(t_2) \quad (4.9)$$

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

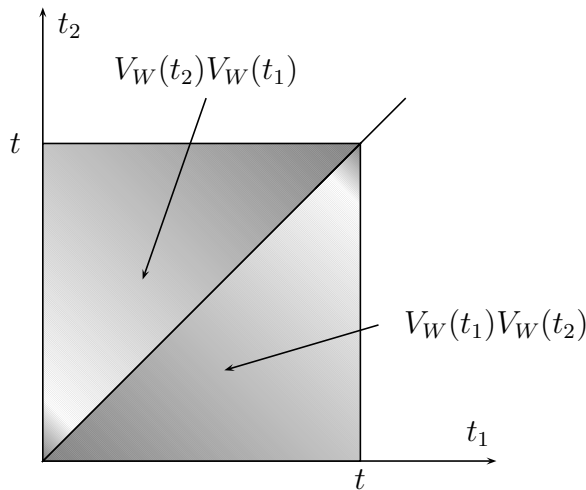
$$T(A_1(t_1) \cdots A_n(t_n)) = A_{\pi(1)}(t_{\pi(1)}) \cdots A_{\pi(n)}(t_{\pi(n)}), \quad (4.10)$$

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

$$T(A_1(t_1)A_2(t_2)) = \theta(t_1 - t_2)A_1(t_1)A_2(t_2) + \theta(t_2 - t_1)A_2(t_2)A_1(t_1).$$

Mit der Umformung (vgl. die folgende Abbildung)

$$\begin{aligned} T\left(\int_{t_0}^t V_W(t_1)\right)^2 &= T\left(\int_{t_0}^t dt_1 V_W(t_1) \int_{t_0}^t dt_2 V_W(t_2)\right) = \int_{t_0}^t dt_1 dt_2 T(V_W(t_1)V_W(t_2)) \\ &= \int_{t_0}^t dt_1 V_W(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 V_W(t_2) + (t_1 \leftrightarrow t_2) = 2 \int_{t_0}^t V_W(t_1) \int_{t_0}^{t_1} V_W(t_2) \end{aligned}$$



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

$$S(t, t_0) = T\left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \left(\int_{t_0}^t V_W(t_1)\right)^n\right) = T \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_W(t_1) dt_1\right) \quad (4.11)$$

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

$$S = \lim_{\substack{t_0 \rightarrow -\infty \\ t_1 \rightarrow \infty}} S(t_1, t_0) \quad (4.12)$$

existiert und $S^\dagger S = S S^\dagger = \mathbb{1}_{\mathcal{H}}$ 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,

$$|\psi_{\text{aus}}\rangle = S|\psi_{\text{ein}}\rangle, \quad \text{wobei} \quad |\psi_{\text{ein}}\rangle = |\psi_W(-\infty)\rangle, \quad |\psi_{\text{aus}}\rangle = |\psi_W(\infty)\rangle. \quad (4.13)$$

Wir werden im nächsten Kapitel, in dem wir die Streutheorie behandeln, 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 $|n\rangle \rightarrow |m\rangle$ mit $n \neq m$ bestimmen. In erster Ordnung Störungstheorie ist $|\psi_{W,n}(t)\rangle$ in (4.6,4.8) gegeben und die Amplitude für den Übergang ist

$$\begin{aligned} A_{n \rightarrow m}(t) &= \langle m_W(t) | \psi_{W,n}(t) \rangle \approx \langle m | n \rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \langle m | V_W(t_1) | n \rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int dt_1 \langle m | e^{i(t_1-t_0)H_0/\hbar} V(t_1) e^{-i(t_1-t_0)H_0/\hbar} | n \rangle. \end{aligned}$$

Benutzen wir hier, dass $|n\rangle$ und $|m\rangle$ Eigenzustände des ungestörten Systems sind, so ergibt sich die *Übergangsamplitude*

$$A_{n \rightarrow m}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 e^{iE_{mn}(t_1-t_0)/\hbar} V_{mn}(t_1) = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 e^{i\omega_{mn}(t_1-t_0)} V_{mn}(t_1), \quad (4.14)$$

wobei wir $|m_W(t)\rangle = |m\rangle$ und $\langle m | n \rangle = \delta_{mn}$ benutzten und die Abkürzungen

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

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

$$P_{n \rightarrow m}(t) = |\langle m_W(t) | \psi_{W,n}(t) \rangle|^2 = \left| \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 e^{i\omega_{mn}t_1} V_{mn}(t_1) \right|^2. \quad (4.15)$$

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 Übergangsrates geführt, auf die sogenannte *goldene Regel Fermi*.

4.2.1 Plötzliches Einschalten

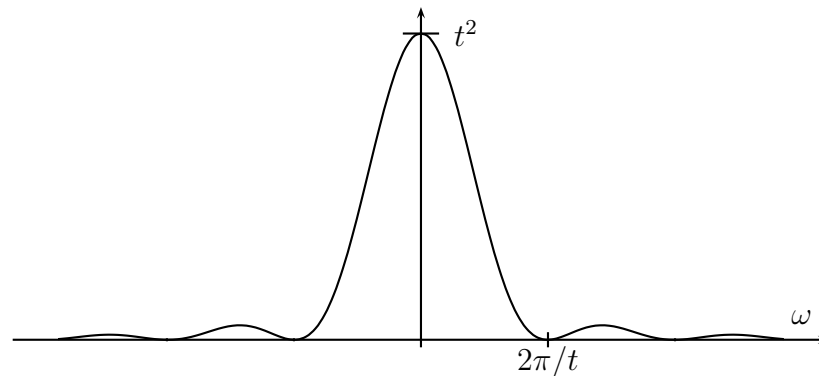
Die Störung $V(t) = \theta(t)V$ werde zum Zeitpunkt $t = 0$ plötzlich eingeschaltet. Dann ist die Übergangswahrscheinlichkeit in erster Ordnung Störungstheorie

$$P_{n \rightarrow m}(t) = \left| \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{mn}t_1} V_{mn} dt_1 \right|^2 = \frac{4}{\hbar^2} \frac{\sin^2(\frac{1}{2}\omega_{mn}t)}{\omega_{mn}^2} |V_{mn}|^2. \quad (4.16)$$

Das qualitative Verhalten des zeitabhängigen Faktors

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

ist in der folgenden Abbildung gezeigt. Für kleine Zeiten, $\omega t \ll 1$ strebt er gegen t^2 und die Übergangswahrscheinlichkeit ist (über das Matrixelement V_{mn}) nur schwach vom Zielzustand abhängig und proportional zu t^2 . Der Faktor hat für große Zeiten als Funktion von $\omega = \omega_{mn}$ ein ausgeprägtes Maximum bei 0, wie folgende Abbildung zeigt.



- Für große Zeiten sind nur Übergänge in Zustände erlaubt, deren Energien sehr nahe

bei $E_n^{(0)}$ liegen, d.h. für welche

$$t|E_{mn}| \ll 2\pi\hbar$$

gilt. Also sind für schnell eingeschaltete Störungen Übergänge am wahrscheinlichsten, für welche die Energie bis auf $2\pi\hbar/t$ erhalten ist.

- Ist das Spektrum diskret, dann oszilliert $P_{n \rightarrow m}$ mit einer Wiederkehrzeit

$$t \sim \frac{2\pi}{\Delta\omega}.$$

- Haben Anfangs- und Endzustand dieselbe Energie, dann ist die Übergangswahrscheinlichkeit proportional zu t^2 . Natürlich verliert die Störungstheorie erster Ordnung ihre Gültigkeit wenn die Übergangswahrscheinlichkeit $P_{n \rightarrow m}$ größer als 1 wird.

In einem System, das sehr lange einer konstanten Störung ausgesetzt ist, werden wegen

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{4 \sin^2(\frac{\omega}{2}t)}{\omega^2 t} \longrightarrow 2\pi\delta(\omega) \quad (4.17)$$

höchstens Übergänge zwischen entarteten Niveaus induziert,

$$P_{n \rightarrow m} = \frac{2\pi t}{\hbar^2} |V_{mn}|^2 \delta(\omega_{mn}) = \frac{2\pi t}{\hbar} |V_{mn}|^2 \delta(E_{mn}). \quad (4.18)$$

Die δ -Distribution drückt die Energieerhaltung aus. Die *Übergangsrate*, d.h. die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit, ist dann

$$\Gamma_{n \rightarrow m}(t) = \frac{d}{dt} P_{n \rightarrow m} \sim \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_{mn}) |V_{mn}|^2. \quad (4.19)$$

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 (4.18) 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 (4.19) $E_m^{(0)} \approx E_n^{(0)}$ gelten, damit die Rate nicht verschwindet.

Offensichtlich können wir (4.19) 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 (4.16) als Funktion der Energie des Endzustandes um die Energie $E_n^{(0)}$

des Anfangszustandes konzentriert ist und die Formel (4.17) anwendbar ist. Gleichzeitig muss ein typischer Niveauabstand δE bei $E_n^{(0)}$ genügend klein sein,

$$\delta E \cdot t \ll 2\pi\hbar, \quad (4.20)$$

damit viele Zustände im Energiebereich um $E_n^{(0)}$ liegen für welche (4.16) 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

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

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 $V_{kn} \sim V_{mn}$ 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 Übergangsrates von $|n\rangle$ in eine Gruppe von Zuständen um $|m\rangle$ die Formel

$$\Gamma_{n \rightarrow m} = \dot{P}_{t \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle m|V|n\rangle|^2 \rho(E_n^{(0)}). \quad (4.21)$$

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

$$\sum_n f(E_n) \sim \int dE \rho(E) f(E).$$

Die Formel (4.21) wird ebenfalls *Fermis goldene Regel* genannt. Sie stammt aber 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

$$V(t, x) = e^{\eta t} V(x) \quad , \quad \eta > 0 \quad (4.22)$$

und lassen am Ende der Rechnung $\eta \rightarrow 0$ gehen. Setzen wir dies in die erste Ordnungs-Formel (4.14) für die Amplitude ein, dann erhalten wir

$$A_{n \rightarrow m}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 e^{\eta t_1} e^{i\omega_{mn}(t_1 - t_0)} V_{mn}.$$

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

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

Deshalb ist die Übergangswahrscheinlichkeit gleich

$$P_{n \rightarrow m} = \frac{e^{2\eta t} |V_{mn}|^2}{\omega_{mn}^2 + \eta^2 \hbar^2}. \quad (4.23)$$

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

$$\Gamma_{n \rightarrow m} = \dot{P}_{n \rightarrow m} \sim \frac{2\eta}{\omega_{mn}^2 + \eta^2} \frac{|V_{mn}|^2}{\hbar^2}.$$

Wegen der als bekannt vorausgesetzten Formel

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

finden wir im adiabatischen Limes dieselbe Formel für die Übergangsrate wie beim plötzlichen Einschalten, also die goldene Regel (4.19). Diese Formel für die Übergangsrate ist ziemlich robust gegenüber den Details des Einschaltvorgangs.

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

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 e^{-t^2/\tau^2} \quad (4.24)$$

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

$$V = eE_0 z e^{-t^2/\tau^2}. \quad (4.25)$$

Da $t \gg \tau$ sein soll, können wir die obere und untere Grenze bei der Zeitintegration in (4.14) gleich ∞ beziehungsweise $-\infty$ setzen. Dann erhalten wir für die Übergangsamplitude

$$\begin{aligned} A_{|100\rangle \rightarrow |210\rangle} &= \frac{eE_0}{i\hbar} \langle 210|z|100\rangle \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega_{210} - \omega_{100})t_1} e^{-t_1^2/\tau^2} dt_1 \\ &= \frac{eE_0}{i\hbar} \langle 210|z|100\rangle \tau \sqrt{\pi} e^{-\omega^2 \tau^2/4}, \end{aligned}$$

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

$$P_{|100\rangle \rightarrow |210\rangle} = \pi \left(\frac{eE_0\tau}{\hbar} \right)^2 |\langle 210|z|100\rangle|^2 e^{-\omega^2\tau^2/2}. \quad (4.26)$$

Man beachte, dass für $\tau \rightarrow \infty$ 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,

$$V(\omega, t) = e^{\eta t} (e^{-i\omega t} V(\mathbf{x}) + e^{i\omega t} V^\dagger(\mathbf{x})), \quad (4.27)$$

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

$$A_{n \rightarrow m}(\omega, t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 e^{\eta t_1} e^{i\omega_{mn} t_1} (e^{-i\omega t_1} V_{mn} + e^{i\omega t_1} \bar{V}_{nm}).$$

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

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

Nach quadrieren und ableiten bezüglich der Zeit findet man die Übergangsrate

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

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

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

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

$$\bar{\Gamma}_{n \rightarrow m}(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar^2} \left(\delta(\omega_{mn} - \omega) |V_{nm}|^2 + \delta(\omega_{mn} + \omega) |V_{mn}|^2 \right) \quad (4.28)$$

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

$$\sum_m \bar{\Gamma}_{n \rightarrow m}(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{mn}|^2 \left(\rho(E_n^{(0)} + \hbar\omega) + \rho(E_n^{(0)} - \hbar\omega) \right). \quad (4.29)$$

Dies sind die goldenen Regeln für den Fall einer periodischen Störung. 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 (4.28). 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 $t \rightarrow \infty$ 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 (4.28) bei. Die Störung veranlasst das System einen Energiequant $\hbar\omega$ zu emittieren.

Also beschreibt die Rate (4.29) 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

$$\langle m_W(t) | \psi_{W,n}(t) \rangle = \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \langle m | V_W(t_1) V_W(t_2) | n \rangle.$$

Hier schieben wir die Identität $|k\rangle\langle k|$ zwischen die beiden Potentiale und ersetzen $V_W(t)$ durch $e^{iH_0t/\hbar} V(t) e^{iH_0t/\hbar}$ mit dem Resultat

$$\langle m_W(t) | \psi_{W,n}(t) \rangle = \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \sum_k e^{i\omega_{mk}t_1} \langle m | V(t_1) | k \rangle e^{i\omega_{kn}t_2} \langle k | V(t_2) | n \rangle.$$

Wir schalten das Potential sehr langsam ein und parametrisieren den Einschaltvorgang wie in (4.22). Wenn wir wiederum t_0 durch $-\infty$ ersetzen, führen die beiden Zeitintegrationen auf die Amplitude

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

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

$$\Gamma_{n \rightarrow m}(t) = \frac{2\pi}{\hbar^4} \left| \sum_k \frac{V_{mk} V_{kn}}{\omega_{nk} + i\eta} \right|_{\eta \rightarrow 0}^2 \delta(\omega_{mn}). \quad (4.30)$$

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 $\mathbf{A}(t, \mathbf{x})$,

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(t, \mathbf{x}) \right)^2 + V, \quad V = e\varphi. \quad (4.31)$$

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

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r) \quad (4.32)$$

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

$$H = H_0 + V \quad \text{mit} \quad V = -\frac{e}{mc} \mathbf{A}(t, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{p}. \quad (4.33)$$

Wir betrachten die elektrische Ladung e (beziehungsweise die dimensionslose Feinstrukturkonstante $\alpha = e^2/\hbar c$) als kleinen Parameter. Dann ist der hier vernachlässigte Term $(e\mathbf{A})^2$ von zweiter Ordnung. Dieser Term trägt nur zu Prozessen bei, an denen zwei Photonen beteiligt sind, 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 Übergangswahrscheinlichkeiten in erster Ordnung Störungstheorie sind proportional zum Quadrat des Störoperators, also zu $e^2 \sim \alpha$. Die Prozesse zweiter Ordnung sind gemäß (4.30) 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 $\mathbf{A}(t, \mathbf{x})$ 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

$$\Gamma_{n \rightarrow m} = \int d\omega \rho_s(\omega) \Gamma_{n \rightarrow m}(\omega).$$

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

$$\Gamma_{n \rightarrow m}^{\text{Abs.}} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \rho_s(\omega_{mn}) |V_{mn}|^2, \quad \Gamma_{n \rightarrow m}^{\text{Em.}} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \rho_s(\omega_{nm}) |V_{mn}|^2. \quad (4.34)$$

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 (4.33), worin wir für \mathbf{A} eine ebene Welle ansetzen

$$\mathbf{A}(t, \mathbf{x}) = (a e^{-i\omega t + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + a^\dagger e^{i\omega t - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}) \mathbf{e} \quad \text{mit} \quad |\mathbf{k}|c = \omega, \quad |\mathbf{e}| = 1. \quad (4.35)$$

Die Coulomb-Eichbedingung übersetzt sich in die Bedingung $\mathbf{k} \cdot \mathbf{e} = 0$. Wir wählen den Zeitnullpunkt so, daß die Konstante a rein imaginär wird und setzen

$$i \frac{\omega a}{c} = ika = \mathcal{E}/2. \quad (4.36)$$

Das elektrische und magnetische Feld der polarisierten Welle lauten

$$\mathbf{E} = \mathcal{E} \cos(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \mathbf{e} \quad \text{und} \quad \mathbf{B} = \mathcal{E} \cos(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \hat{\mathbf{k}} \wedge \mathbf{e} \quad (4.37)$$

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

$$u(\omega) = \frac{1}{8\pi} (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2)$$

und hat im zeitlichen Mittel den Wert

$$\bar{u}(\omega) = \frac{\mathcal{E}^2}{8\pi} \quad (4.38)$$

Ein Vergleich der Störung

$$V(\omega, t) = -\frac{e}{mc} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = \frac{e\mathcal{E}}{m\omega} \sin(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \mathbf{e} \cdot \mathbf{p} \quad (4.39)$$

mit (4.27) zeigt, dass der Operator $V(\mathbf{x})$ in dieser Formel mit

$$V = \frac{ie\mathcal{E}}{2m\omega} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \mathbf{e} \cdot \mathbf{p}$$

zu identifizieren ist und damit finden wir folgende Absorptionsrate

$$\Gamma_{n \rightarrow m}^{\text{Abs.}} = \frac{e^2 \pi}{m^2 \omega^2 \hbar^2} u(\omega_{mn}) |\langle m | e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \mathbf{e} \cdot \mathbf{p} | n \rangle|^2 \quad (4.40)$$

ist. Jetzt müssen wir noch das Matrixelement berechnen. Für Wellenlängen, die groß

verglichen mit dem Atoms sind,

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

dürfen wir im Matrixelement die Dipol-Näherung

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \approx 1 \quad (4.41)$$

machen. Benutzen wir zusätzlich

$$\mathbf{p} = \frac{im}{\hbar}[H_0, \mathbf{x}], \quad (4.42)$$

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

$$\Gamma_{n \rightarrow m}^{\text{Abs.}} = \frac{\pi}{\hbar^2} u(\omega_{mn}) |\langle m | \mathbf{e} \cdot \mathbf{d} | n \rangle|^2, \quad \text{wobei } \mathbf{d} = e\mathbf{x} \quad (4.43)$$

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

$$\Gamma_{n \rightarrow m}^{\text{Abs.}} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2(4\pi\epsilon_0)} u(\omega_{mn}) |\langle m | \mathbf{e} \cdot \mathbf{d} | n \rangle|^2 \quad (4.44)$$

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

$$\Delta\ell = \pm 1 \quad \text{und} \quad \Delta m = 0, \pm 1 \quad (\text{elektrische Dipolstrahlung}). \quad (4.45)$$

Abschliessend betrachten wir den Fall einer inkohärenten Überlagerung von Wellenvektoren \mathbf{k} und Polarisationen $\mathbf{e} \perp \mathbf{k}$. Das Quadrat des Dipol-Matrixelements $\langle m | \mathbf{e} \cdot \mathbf{d} | n \rangle$ ist dann zu ersetzen durch

$$\frac{1}{4\pi} \int d\Omega_{\mathbf{e}} \langle n | \mathbf{d} \cdot \mathbf{e} | m \rangle \langle m | \mathbf{e} \cdot \mathbf{d} | n \rangle = \frac{1}{3} \langle n | \mathbf{d} | m \rangle \langle m | \mathbf{d} | n \rangle, \quad (4.46)$$

wobei wir die Identität

$$\frac{1}{4\pi} \int d\Omega_{\mathbf{e}} e_i e_j = \frac{1}{3} \delta_{ij}$$

benutzen. Die führt auf die Übergangsrates ($\omega_m > \omega_n$)

$$\Gamma_{n \rightarrow m}^{\text{Abs.}} = \Gamma_{m \rightarrow n}^{\text{Em.}} = \frac{4\pi^2}{3\hbar^2(4\pi\epsilon_0)} |\langle m | \mathbf{d} | n \rangle|^2 u(\omega_{mn}) \equiv B_{nm} u(\omega_{mn}), \quad (4.47)$$

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 benutzen¹.

¹Siehe den Abschnitt *Emission, Absorption und Strahlungsgesetz* in der Vorlesung QM I

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 klassisches Beispiel ist die Elektronenstreuung an Atomkernen. Da in diesem Fall die elektromagnetische Wechselwirkung zwischen Elektronen und Ladungs- sowie Magnetisierungsverteilung 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 [11]. 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 $d\Omega$ in die Richtung $\Omega = (\theta, \varphi)$ gestreuten Teilchen. Diese ist proportional zu j :

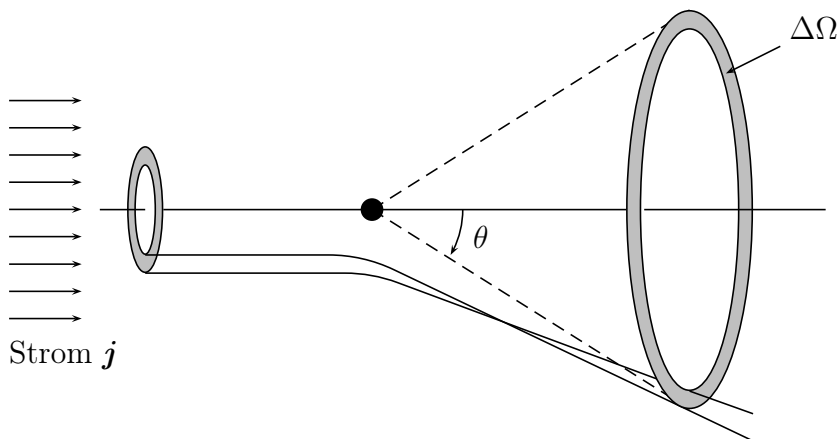
$$N_S = j\Sigma(\Omega)d\Omega.$$

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

$$N_S = jN \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega. \quad (5.1)$$

$d\sigma/d\Omega$ hat die Dimension einer Fläche und ist der *differentielle Wirkungsquerschnitt* des Streuprozesses. Der *totale Wirkungsquerschnitt* ist

$$\sigma = \int_{S^2} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega. \quad (5.2)$$



5.2 Potentialstreuung

Wir betrachten die Streuung eines Teilchens an einem kurzreichweitigen Potential¹. Wir wollen annehmen, dass die streuenden Teilchen zu früher Zeit weit weg vom streuenden Objekt waren. Die freien Teilchen werden dann durch ein Wellenpaket

$$\psi(t_0, \mathbf{x}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} a(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (5.3)$$

beschrieben. Das Wellenpaket sei um \mathbf{k}_0 konzentriert, d.h. $a(\mathbf{k})$ sei nur für Wellenzahlvektoren nahe bei \mathbf{k}_0 oder Impulse nahe $\mathbf{p}_0 = \hbar\mathbf{k}_0$ ungleich Null. Wir müssen herausfinden, wie die Wellenfunktion $\psi(t, \mathbf{x})$ 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 $\psi_k(\mathbf{x})$ der zeitunabhängigen Schrödingergleichung

$$(\Delta + k^2)\psi_k(\mathbf{x}) = U(\mathbf{x})\psi_k(\mathbf{x}), \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E_k, \quad U(\mathbf{x}) = \frac{2m}{\hbar^2}V(\mathbf{x}). \quad (5.4)$$

Wir entwickeln den Anfangszustand $\psi(t_0)$ nach diesen Eigenzuständen

$$\psi(t_0, \mathbf{x}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} b(\mathbf{k}) \psi_k(\mathbf{x}), \quad (5.5)$$

wobei gebundene Zustände mit $E_k < 0$ nicht beitragen, da sie weit weg vom Streuzentrum verschwinden. Die Wellenfunktion zu späteren Zeiten ist dann

$$\psi(t, \mathbf{x}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} b(\mathbf{k}) \psi_k(\mathbf{x}) e^{-iE_k(t-t_0)/\hbar}. \quad (5.6)$$

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,

$$(\Delta + k^2)G_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad G_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \quad (5.7)$$

ist die Schrödingergleichung äquivalent zur *Lippmann-Schwinger-Integralgleichung*

¹Das Coulomb-Potential ist langreichweitig und muss separat behandelt werden.

$$\psi_k(\mathbf{x}) = \psi_0(\mathbf{x}) + \int G_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}') U(\mathbf{x}') \psi_k(\mathbf{x}') d^3 x', \quad (5.8)$$

wobei ψ_0 eine Lösung der kräftefreien Schrödingergleichung ist. Wegen (5.7) ist ein ψ , welches diese Integralgleichung erfüllt, offensichtlich eine Lösung der Schrödingergleichung. Wir untersuchen jetzt noch das asymptotische Verhalten von ψ weit weg vom Streuzentrum. Wir nehmen an, das Potential $V(\mathbf{x})$ sei bei $\mathbf{x} = 0$ genügend lokalisiert, so dass nur \mathbf{x}' in der Nähe des Streuzentrums zum Integral beitragen. Wir dürfen also $r' = |\mathbf{x}'| \ll r$ annehmen. Wegen

$$|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \sim r - \frac{1}{r} \mathbf{x} \cdot \mathbf{x}' \quad , \quad \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \sim \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}'} \quad \text{und} \quad \mathbf{k}' = k \frac{\mathbf{x}}{r},$$

ist

$$\psi_k(\mathbf{x}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \psi_0(\mathbf{x}) - \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}'} U(\mathbf{x}') \psi_k(\mathbf{x}') d^3 x'.$$

Wählen wir für die kräftefreie Lösung ψ_0 ein einlaufende ebene Welle, dann hat die entsprechende Lösung der Lippmann-Schwinger-Gleichung (5.8) die asymptotische Form

$$\psi_k(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} + \psi_s \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} + f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (5.9)$$

wobei wir die wichtige *Streuamplitude*

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}'} V(\mathbf{x}') \psi_k(\mathbf{x}') d^3 x' \quad (5.10)$$

eingeführt haben. Nach einer Multiplikation der Lösung (5.9) mit $e^{-iE_k t/\hbar}$ wird klar, dass der zweite Term eine auslaufende Welle 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 $a(\mathbf{k})$ in (5.3) und $b(\mathbf{k})$ in (5.5) übereinstimmen. Dazu ersetzen wir in der Entwicklung (5.3) für $\psi(t_0, \mathbf{x})$ die freien Lösungen $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) = \psi_0(\mathbf{x})$ mit Hilfe der Lippmann-Schwinger-Gleichung (5.8) durch die exakten Eigenzustände $\psi_k(\mathbf{x})$,

$$\begin{aligned} \psi(t_0, \mathbf{x}) &= \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} a(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \\ &= \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} a(\mathbf{k}) \left(\psi_k(\mathbf{x}) + \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} U(\mathbf{x}') \psi_k(\mathbf{x}') d^3 x' \right). \end{aligned} \quad (5.11)$$

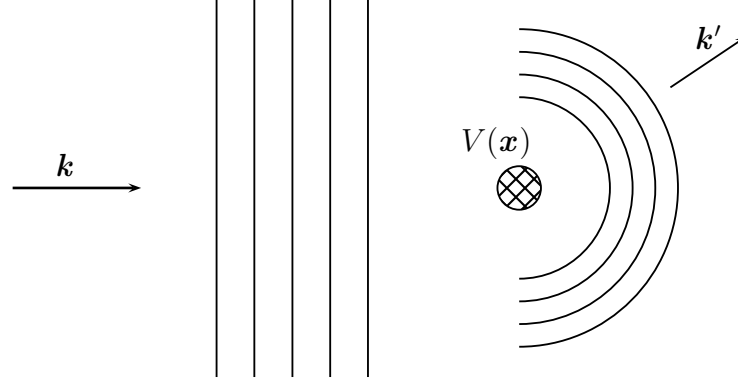


Abbildung 5.1: Einlaufende ebene Wellen werden am Potential gestreut.

Da $a(\mathbf{k})$ bei \mathbf{k}_0 konzentriert ist, können wir

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \sim \psi_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{x}) \quad \text{und} \quad k \sim \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{k}}_0$$

setzen. Dann wird das k -Integral im letzten Term in (5.11) proportional zu

$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} a(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{k}}_0 |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \psi_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{x}') = \psi(t_0, \hat{\mathbf{k}}_0 |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \cdot \psi_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{x}').$$

Da aber $\hat{\mathbf{k}}_0 |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$ und der Träger des Wellenpakets $\psi(t_0, \mathbf{x})$ auf gegenüberliegenden Seiten des Streuzentrums liegen, verschwindet die erste Funktion auf der rechten Seite und

$$\psi(t_0, \mathbf{x}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} a(\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}). \quad (5.12)$$

Die Entwicklungskoeffizienten für das anfängliche Wellenpaket sind also unabhängig davon ob wir das Paket nach ebenen Wellen oder exakten Eigenzuständen entwickeln, $a(\mathbf{k}) = b(\mathbf{k})$.

Weit weg vom Streuer hat die zeitabhängige Lösung (5.6) wegen (5.9) die Form

$$\begin{aligned} \psi(t, \mathbf{x}) &\sim \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} a(\mathbf{k}) \left(e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - E_{\mathbf{k}}(t-t_0)/\hbar)} + \frac{f(\mathbf{k}', \mathbf{k})}{r} e^{i(kr - E_{\mathbf{k}}(t-t_0)/\hbar)} \right) \\ &= \psi_0(t, \mathbf{x}) + \frac{f(\mathbf{k}', \mathbf{k}_0)}{r} \psi_0(t, r\hat{\mathbf{k}}_0), \quad \mathbf{k}' = k\hat{\mathbf{x}}. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Diese Form der Lösung hat eine anschauliche Interpretation: $\psi_0(r\hat{\mathbf{k}}_0)$ ist der Wert den die Wellenfunktion am Punkte \mathbf{x} haben würde, wenn das Streuzentrum den Weg des Teilchens von der Vorwärtsrichtung in die Richtung \mathbf{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.

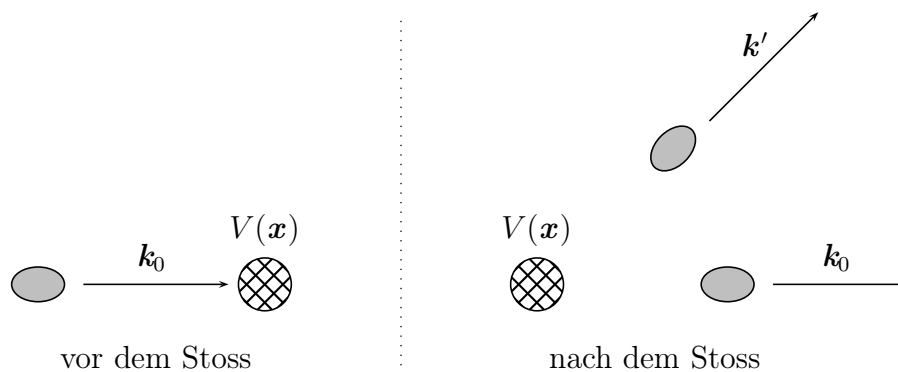


Abbildung 5.2: Das einlaufende Wellenpaket wird am Potential gestreut

Nun wollen wir noch die Streuamplitude mit dem Wirkungsquerschnitt in Verbindung bringen. Dazu bestimmen wir die Teilchenstromdichte

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\bar{\psi} \nabla \psi - \psi \nabla \bar{\psi}), \quad (5.14)$$

die für eine einlaufende ebene Welle gleich $\hbar \mathbf{k}/m$ ist, für die Streuwelle ψ_s

$$\mathbf{j}_s \sim \frac{\hbar}{2mi} \frac{\mathbf{x}}{r} (\bar{\psi}_s \partial_r \psi_s - \psi_s \partial_r \bar{\psi}_s) \sim \frac{\hbar}{m} \mathbf{k}' \frac{|f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2}{r^2}. \quad (5.15)$$

Wir benutzen $\mathbf{k}' = k\mathbf{x}/r$ 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 der differentielle Wirkungsquerschnitt ist

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{Strom der Streuwelle in } d\Omega_{r \rightarrow \infty}}{\text{einfallende Stromdichte}} = |f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2. \quad (5.16)$$

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

$$\psi_k = \psi_0 + (G_0 U)\psi_k. \quad (5.17)$$

Im Ortsraum ist $G_0 U$ der in (5.8) angegebene Fredholmsche Integrkern. Die Lippmann-Schwinger-Gleichung kann als Funktionalgleichung im Banachraum \mathcal{C} der stetigen und beschränkten Funktionen mit Supremum-Norm

$$\|\psi\|_\infty = \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3} |\psi(\mathbf{x})| \quad (5.18)$$

aufgefasst werden. Falls nun die Norm $\|G_0 U\|_\infty < 1$ ist, dann hat die Gleichung (5.8) eine eindeutige Lösung, nämlich

$$\psi_k = \psi_0 + (G_0 U)\psi_0 + (G_0 U)^2 \psi_0 + \dots = \frac{1}{1 - G_0 U} \psi_0. \quad (5.19)$$

Dass diese für $\|G_0 U\|_\infty < 1$ absolut konvergente *Neumannsche Reihe* eine Lösung liefert, sieht man durch gliedweise Anwendung von $G_0 U$ sofort. Die Eindeutigkeit folgt aus

$$\|\psi_1 - \psi_2\|_\infty = \|(G_0 U)(\psi_1 - \psi_2)\|_\infty \leq \|G_0 U\|_\infty \|\psi_1 - \psi_2\|_\infty < \|\psi_1 - \psi_2\|_\infty$$

für zwei Lösungen, woraus unmittelbar $\psi_1 = \psi_2$ folgt. Wir wollen jetzt noch untersuchen, für welche Potentiale die Operatornorm des Integraloperators $G_0 U$ kleiner 1 ist. Wegen

$$|(G_0 U\psi)(\mathbf{x})| \leq \frac{1}{4\pi} \int \frac{|U(\mathbf{x}')|}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3 x' \|\psi\|_\infty,$$

genügt es, eine obere Schranke für das Integral zu finden. Es gilt für jedes \mathbf{x} und ρ

$$\begin{aligned} \int \frac{|U(\mathbf{x}')|}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3 x' &= \int_{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \geq \rho} \frac{|U(\mathbf{x}')|}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3 x' + \int_{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| < \rho} \frac{|U(\mathbf{x}')|}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3 x' \\ &\leq \frac{1}{\rho} \|U\|_1 + \|U\|_2 \left(\int_{|z| < \rho} |z|^{-2} d^3 z \right)^{1/2} \\ &= \frac{1}{\rho} \|U\|_1 + \sqrt{4\pi\rho} \|U\|_2, \end{aligned} \quad (5.20)$$

wobei wir die *Schwartzsche Ungleichung*

$$(f, g) \leq \|f\|_2 \|g\|_2$$

benutzt. 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 (5.20) ist minimal für $\sqrt{\pi}\rho_{\min}^{3/2} = \|U\|_1/\|U\|_2$ und für ρ_{\min} ist sie

$$3\pi^{1/3}\|U\|_1^{1/3}\|U\|_2^{2/3}.$$

Also ergibt unsere grobe Abschätzung der Norm des Integrationsoperators in der Schwinger-Lippmann-Gleichung die Abschätzung

$$\|G_0U\|_\infty \leq \frac{3}{4}\pi^{-2/3}\|U\|_1^{1/3}\|U\|_2^{2/3}. \quad (5.21)$$

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

$$\psi_k \sim \psi_0 + (G_0U)\psi_0$$

und wir erhalten für die Streuamplitude in dieser Näherung die einfache Formel

$$f_{\text{Born}}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} V(\mathbf{x}) d^3x, \quad \text{wobei } \mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}' \quad (5.22)$$

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 $\mathbf{q} \cdot \mathbf{x} = qr \cos \alpha$ finden wir

$$f_{\text{Born}} = -\frac{m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr r^2 \int_0^\pi d\alpha \sin \alpha e^{iqr \cos \alpha} V(r).$$

Setzen wir $\cos \alpha = z$, dann lässt sich das Winkelintegral leicht berechnen,

$$f_{\text{Born}}(k, \theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{q} \int_0^\infty r V(r) \sin(qr) dr. \quad (5.23)$$

Der *Streuwinkel* θ ist der Winkel zwischen ein- und auslaufenden Wellenvektoren:

$$q^2 = k^2 + k^2 - 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' \implies q = k\sqrt{2 - 2\cos\theta} = 2k \sin \frac{\theta}{2}. \quad (5.24)$$

Ein in der Kernphysik relevantes Beispiel ist das *Yukawa-Potential*

$$V = g \frac{e^{-\mu r}}{r}, \quad \mu = 1/r_0. \quad (5.25)$$

Es beschreibt näherungsweise die starke Wechselwirkung zwischen Nukleonen und kommt durch den Austausch von Pionen der Masse $\hbar/r_0c \approx 140 \text{ MeV}$ zustande. Die Länge r_0 wird als Reichweite des Potentials interpretiert und entspricht der Compton-Wellenlänge der ausgetauschten Teilchen.

Das Integral in (5.23) lautet

$$-\frac{2m}{\hbar^2} \frac{g}{q} \int_0^\infty e^{-\mu r} \sin(qr) dr = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{g}{\mu^2 + q^2} \quad (5.26)$$

und führt auf folgende Streuamplitude in der 1. Bornschen Näherung,

$$f_{\text{Born}}(k, \theta) = -\frac{2mg}{\hbar^2} \frac{1}{4k^2 \sin^2(\theta/2) + \mu^2} \quad (5.27)$$

und den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma_{\text{Born}}}{d\Omega} = \left(\frac{mg}{2\hbar^2 k^2} \right)^2 \left(\frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2} + (\mu/2k)^2} \right)^2. \quad (5.28)$$

Führt man den (singulären) Grenzübergang $\mu \rightarrow 0$ durch und setzt $g = e^2$ sowie $\hbar^2 k^2 = 2mE$ ein, so erhält man die aus der klassischen Mechanik 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

$$\Delta\varphi = 4\pi e (Z\delta(\mathbf{x}) - \rho(\mathbf{x})). \quad (5.29)$$

Die Fourier-Transformierte von V , multipliziert mit q^2 , ist

$$\begin{aligned} q^2 \tilde{V}(q) &= -e \int d^3x q^2 e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \varphi(\mathbf{x}) = e \int d^3x \Delta (e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}) \varphi(\mathbf{x}) \\ &= 4\pi e^2 \int d^3x e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} (Z\delta(\mathbf{x}) - \rho(\mathbf{x})) = 4\pi e^2 (Z - F(\mathbf{q})), \end{aligned} \quad (5.30)$$

wobei F der *Formfaktor* der elektronischen Ladungsverteilung ist,

$$F(\mathbf{q}) = \int d^3x e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \rho(\mathbf{x}) \quad \text{mit} \quad F(0) = Z. \quad (5.31)$$

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

$$F(q) = \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty \sin(qr) \rho(r) r dr. \quad (5.32)$$

Für die Streuamplitude in erster Bornscher Näherung (5.22) ergibt sich

$$f_{\text{Born}}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -2m \left(\frac{e}{\hbar q} \right)^2 (Z - F(q)), \quad (5.33)$$

und wir finden mit (5.16) den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 4m^2 \left(\frac{e}{\hbar q} \right)^4 (Z - F(q))^2, \quad \mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}. \quad (5.34)$$

Diskussion: Ist zum Beispiel wie im Wasserstoffatom

$$\rho(r) = \frac{Ze^{-r/a}}{8\pi a^3}, \quad \text{so ist} \quad F(q) = \frac{Z}{(1 + a^2q^2)^2}. \quad (5.35)$$

Für einen großen Impulsübertrag $q \gg 1/a$ ist $F(q) \ll Z$. Dies gilt auch für allgemeinere Ladungsdichten und folgt nach Anwendung des Riemann-Lebeque Lemmas auf (5.31). Ein großer Impulsübertrag bedeutet wegen

$$\sin \frac{\theta}{2} = \frac{q}{2k} \gg \frac{1}{2ka} \quad (5.36)$$

auch Streuung mit großem Streuwinkel. Für eine Weitwinkelstreuung reduziert sich der Querschnitt also im Wesentlichen auf die *Rutherford-Formel* für die Streuung am Atomkern

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Rutherford}} = \frac{4m^2 e^4 Z^2}{\hbar^4 q^4} \quad (5.37)$$

oder mit $q = 2k \sin(\theta/2)$

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Rutherford}} = \left(\frac{Ze^2}{2mv^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (5.38)$$

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 $\psi_k(\mathbf{x})$ modifiziert. Dies kann man wegen des asymptotischen Verhaltens der gebundenen Zustände

$$f_{nl} \sim r^{n-1} e^{-\kappa r}, \quad \kappa = \frac{1}{na_0}$$

schon vermuten. Da $n = me^2/\hbar^2\kappa$ ist, haben diese für große Radien die Form

$$f_{nl} \sim \frac{1}{r} e^{-\kappa r + (me^2/\hbar^2\kappa) \log r}. \quad (5.39)$$

Für die asymptotische Form der Streuzustände mit $E > 0$ erwarten wir diesselbe Form, nur mit κ durch $\pm ik$ ersetzt,

$$R \sim \frac{1}{r} e^{\pm i(kr - \gamma \log r)}, \quad \gamma = -\frac{me^2}{\hbar^2 k} = -\frac{1}{a_0 k}.$$

Diese Vermutung wird sich als richtig erweisen.

Wir betrachten die Streuung eines geladenen Teilchens mit Ladung $Z_1 e$ an einem Coulombfeld $V = -Z_2 e/r$. Die zeitunabhängige Schrödingergleichung lautet

$$\left(-\Delta + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} - \frac{2mE}{\hbar^2} \right) \psi = 0. \quad (5.40)$$

Wir setzen

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{1}{2} m v^2 \quad \text{und} \quad \gamma = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v} \quad (5.41)$$

und mit diesen Abkürzungen vereinfacht sich die Schrödingergleichung zu

$$\left(\Delta + k^2 - \frac{2\gamma k}{r} \right) \psi = 0. \quad (5.42)$$

Für eine längs der z -Achse einlaufende ebene Welle setzen wir die Lösung in der Form

$$\psi(\mathbf{x}) = e^{ikz}\phi(r-z), \quad r = |\mathbf{x}| \quad (5.43)$$

an. Benutzen wir in (5.42) die Identitäten

$$\Delta\psi = (\Delta e^{ikz})\phi + 2(\nabla e^{ikz})(\nabla\phi) + e^{ikz}\Delta\phi = (-k^2\phi + 2ik\partial_z\phi + \Delta\phi)e^{ikz}$$

und

$$\partial_z\phi = \left(\frac{z}{r} - 1\right)\phi' \quad \text{sowie} \quad \Delta\phi = \phi'' + \frac{2}{r}\phi' + \left(1 - \frac{2z}{r}\right)\phi'',$$

dann finden wir für ϕ die einfache Differentialgleichung

$$\left(u\frac{d^2}{du^2} + (1 - iku)\frac{d}{du} - \gamma k\right)\phi(u) = 0, \quad u = r - z,$$

oder mit $\xi = iku = ik(r - z)$

$$\left(\xi\frac{d^2}{d\xi^2} + (1 - \xi)\frac{d}{d\xi} + i\gamma\right)\phi(\xi) = 0. \quad (5.44)$$

Dies ist die *konfluente hypergeometrische Differentialgleichung* [13]

$$z\frac{d^2\phi}{dz^2} + (b - z)\frac{d\phi}{dz} - a\phi = 0, \quad (5.45)$$

mit $a = -i\gamma$, $b = 1$ und $z = \xi$. Die reguläre Lösung dieser Differentialgleichung ist die konfluente hypergeometrische Reihe (Kummersche Funktion) $F(a, b, z)$ mit dem asymptotischen Verhalten für $-\pi/2 < \arg(z) < \pi/2$

$$\begin{aligned} F(a, b, z) &\sim \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)}(-z)^{-a} \left(1 - \frac{a(1+a-b)}{z} + O(1/z^2)\right) \\ &+ \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)}e^z z^{a-b} (1 + O(1/z)). \end{aligned}$$

Die Lösung von (5.44) ist also

$$\phi(u) = CF(-i\gamma, 1, \xi = iku), \quad (5.46)$$

wobei C ein Normierungsfaktor ist. Sie hat die asymptotische Form

$$\phi(u) = CF(-i\gamma, 1, iku) \sim C \frac{(-iku)^{i\gamma}}{\Gamma(1+i\gamma)} \left(1 + \frac{\gamma^2}{iku}\right) + C \frac{(iku)^{-i\gamma} e^{iku}}{iku\Gamma(-i\gamma)}.$$

Nun ist

$$(-iku)^{i\gamma} = (e^{\log(ku) - i\pi/2})^{i\gamma} = e^{\pi\gamma/2 + i\gamma \log(ku)}, \quad \Gamma(1 - i\gamma) = -i\gamma\Gamma(-i\gamma)$$

und es folgt

$$\phi(u) \sim C e^{\pi\gamma/2} \left(\frac{e^{i\gamma \log(ku)}}{\Gamma(1 + i\gamma)} \left(1 + \frac{\gamma^2}{iku} \right) - \frac{i\gamma e^{(iku - i\gamma \log(ku))}}{iku\Gamma(1 - i\gamma)} \right).$$

Setzen wir dies in (5.43) ein und benutzen

$$ku = k(r - z) = kr(1 - \cos\theta) = 2kr \sin^2 \frac{\theta}{2},$$

dann ergibt sich

$$\psi(r, \theta) \sim \frac{C e^{\pi\gamma/2}}{\Gamma(1 + i\gamma)} \left(\left(1 + \frac{\gamma^2}{2ikr \sin^2 \frac{\theta}{2}} \right) e^{ikz + i\gamma \log k(r-z)} + f(\theta) \frac{e^{ikr - i\gamma \log(2kr)}}{r} \right) \quad (5.47)$$

mit Streuamplitude

$$f(\theta) = \frac{\gamma\Gamma(1 + i\gamma)}{2k\Gamma(1 - i\gamma)} \left(\sin^2 \frac{\theta}{2} \right)^{-1 - i\gamma}. \quad (5.48)$$

Der erste Term in (5.47) entspricht einer einlaufenden Welle e^{ikz} , die durch die langreichweitige Coulombwechselwirkung mit dem Faktor

$$\left(1 + \frac{\gamma^2}{2ikr \sin^2 \frac{\theta}{2}} \right) e^{i\gamma \log k(r-z)}$$

gestört wird. Die Wahrscheinlichkeitsstromdichte dieser Welle weit weg vom Streuer lautet

$$j = C^2 \frac{\hbar k}{m} \left| \frac{e^{\pi\gamma/2}}{\Gamma(1 + i\gamma)} \right|^2.$$

Der zweite Term in (5.47) entspricht einer auslaufenden Kugelwelle, welche noch eine zusätzliche logarithmische Phase enthält. Der zugehörige Fluss in den Raumwinkel $d\Omega$ ist asymptotisch

$$j_r r^2 d\Omega = C^2 \frac{\hbar k}{m} \left| \frac{e^{\pi\gamma/2}}{\Gamma(1 + i\gamma)} \right|^2 |f(\theta)|^2 d\Omega. \quad (5.49)$$

Deshalb ist der Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{j_r r^2}{j} = |f(\theta)|^2 = \frac{\gamma^2}{4k^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2mv^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (5.50)$$

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 (5.50) 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 (5.48) als Funktion der Energie. Die meromorphe Gammafunktion hat wegen

$$\Gamma(z) = \frac{\Gamma(z+n)}{z(z+1)\cdots(z+n-1)} \quad \text{und} \quad \Gamma(1) = 1,$$

woraus unmittelbar

$$c\Gamma(z-n) \longrightarrow \frac{1}{z}(-1)^n \frac{1}{n!} \quad \text{für} \quad z \rightarrow 0$$

folgt, einfache Pole bei $z = -n \in \{0, -1, -2, \dots\}$ mit Residuen $(-1)^n/n!$. Die Γ -Funktion besitzt keine Nullstellen in der ganzen komplexen z -Ebene. Deshalb hat die Streuamplitude (5.50) einfache Pole für

$$1 + i\gamma = -n \quad \text{oder für} \quad k \in \frac{iZ_1Z_2}{a_0n}, \quad n \in \mathbb{N}.$$

In der komplexen Energieebene sind die Pole an den Stellen

$$\begin{aligned} E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{Z_1 Z_2}{a_0} \right)^2 \frac{1}{n^2} \\ &= -\frac{(Z_1 Z_2)^2}{2} mc^2 \left(\frac{\alpha}{n} \right)^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (5.51)$$

Dies sind genau die Energien der gebundenen Zustände in einem Coulombfeld $-Z_2 e/r$. 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 entlang \mathbf{k} , dann ist

$$\begin{aligned} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} &= \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell}(2\ell+1)P_{\ell}(\cos\theta)j_{\ell}(kr) \\ &= \frac{1}{2}\sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell}(2\ell+1)P_{\ell}(\cos\theta)\left(h_{\ell}(kr)+h_{\ell}^{\dagger}(kr)\right), \end{aligned} \quad (5.52)$$

wobei

$$P_{\ell}(\cos\theta) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}}Y_{\ell 0}(\theta, \varphi)$$

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 H von φ abhängen, $[H, L_3] = 0$, ist auch die Lösung $\psi(t, \mathbf{x})$ unabhängig von φ . Offensichtlich ist dann die Streuamplitude ebenfalls φ -unabhängig, $f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = f(\theta, k)$,

Wir entwickeln die Eigenzustände $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ in Drehimpuls-Eigenzustände

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \sum_0^{\infty} i^{\ell}(2\ell+1)P_{\ell}(\cos\theta)f_{\ell}(r). \quad (5.53)$$

Die Funktionen f_{ℓ} erfüllen die radiale Schrödingergleichung

$$H_{\ell}f_{\ell} \equiv \left(-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + U\right)f_{\ell} \equiv (H_{\ell}^0 + U)f_{\ell} = k^2f_{\ell}, \quad (5.54)$$

wobei wir

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{und} \quad U = \frac{2m}{\hbar^2}V \quad (5.55)$$

gesetzt haben. Fällt das Potential im Unendlichen schneller als r^{-2} ab, dann können wir weit weg vom Target das Potential U in (5.54) vernachlässigen und die Gleichung wird zur Bessel-Gleichung. Damit hat f_{ℓ} die asymptotische Form

$$f_{\ell}(r) \sim a_{\ell}\left(h_{\ell}^{\dagger}(kr) + S_{\ell}(E)h_{\ell}(kr)\right). \quad (5.56)$$

Ohne Streuung ist offensichtlich

$$f_\ell^0 = j_\ell(kr) = \frac{1}{2} \left(h_\ell(kr) + h_\ell^\dagger(kr) \right).$$

Es geht nun im Folgenden darum, die Funktion $S_\ell(E)$ zu bestimmen. Da die h_ℓ auslaufende und die h_ℓ^\dagger einlaufende Kugelwellen beschreiben,

$$h_\ell(x) \sim \frac{1}{x} e^{i(x-(\ell+1)\pi/2)}, \quad (5.57)$$

kann ein Potential nur die Koeffizienten von h_ℓ beeinflussen. Deshalb sind auch bei Anwesenheit eines Streuers die $a_\ell = \frac{1}{2}$. Bei der elastischen Potentialstreuung gehen keine Teilchen verloren und der Wahrscheinlichkeitsstrom,

$$4\pi r^2 j_r(r) = \frac{2\pi\hbar r^2}{im} \left(f_\ell^\dagger \frac{df_\ell}{dr} - f_\ell \frac{df_\ell^\dagger}{dr} \right) = \frac{2\pi\hbar}{mk} (1 - S_\ell^\dagger S_\ell), \quad (5.58)$$

muss verschwinden. Hier haben wir benutzt, dass $r^2 j_r$ nicht vom Radius abhängt und die asymptotische Form der f_ℓ eingesetzt. Damit sind die S_ℓ Phasen und wir können

$$S_\ell(E) = e^{2i\delta_\ell(E)} \quad \text{mit reellem } \delta_\ell \quad (5.59)$$

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

$$\begin{aligned} \psi_k(\mathbf{x}) &\sim \frac{1}{2} \sum_\ell i^\ell (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta) \left(h_\ell^\dagger(kr) + e^{2i\delta_\ell} h_\ell(kr) \right) \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \frac{1}{2} \sum_\ell i^\ell (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta) (e^{2i\delta_\ell} - 1) h_\ell(kr) \end{aligned}$$

gilt. Setzen wir hier die asymptotische Entwicklung der h_ℓ nach der Formel (5.57) ein, dann finden wir

$$\begin{aligned} \psi_k(\mathbf{x}) &\sim e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \frac{1}{2kr} \sum_\ell i^\ell (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta) (e^{2i\delta_\ell} - 1) e^{i(kr-(\ell+1)\pi/2)} \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \frac{1}{2ikr} \sum_\ell (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta) (e^{2i\delta_\ell} - 1) e^{ikr}. \end{aligned} \quad (5.60)$$

Der Vergleich mit (5.9) führt auf die Streuamplitude

$$\begin{aligned} f(\theta, k) &= \frac{1}{2ik} \sum_{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) (e^{2i\delta_{\ell}} - 1) \\ &= \frac{1}{k} \sum_{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) e^{i\delta_{\ell}} \sin \delta_{\ell}. \end{aligned} \quad (5.61)$$

Der totale Wirkungsquerschnitt ist das Integral von $|f(\theta, k)|^2$ über S^2 . Wegen der Orthogonalitätsrelationen

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^1 P_{\ell}(x) P_{\ell'}(x) dx = \frac{\delta_{\ell\ell'}}{2\ell + 1} \quad (5.62)$$

erhalten wir wir den totalen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma = \sum \sigma_{\ell}, \quad \text{wobei} \quad \sigma_{\ell} = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_{\ell} \quad (5.63)$$

die partiellen Wirkungsquerschnitte für die Streuung von Teilchen mit Drehimpuls ℓ sind. Im totalen Wirkungsquerschnitt gibt es keine Interferenz zwischen den Beiträgen von verschiedenen Drehimpulsen oder den Partialwellen. Allerdings interferieren die Partialwellen im Ausdruck für den differentiellen Wirkungsquerschnitt $|f(\theta, k)|^2$. Wegen

$$h_{\ell}^{\dagger} + e^{2i\delta_{\ell}} h_{\ell} \sim e^{i\delta_{\ell}} j_{\ell}(kr + \delta_{\ell})$$

zieht das Potential für $\delta_{\ell} > 0$ die Welle näher ans Streuzentrum und drückt sie für $\delta_{\ell} < 0$ vom Streuzentrum weg. Ist das Potential attraktiv, 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 dem totalen Wirkungsquerschnitt und dem Imaginärteil der Streuamplitude in die Vorwärtsrichtung gibt es eine einfache Beziehung. Wegen (5.61) ist

$$\Im f(\theta, k) = \frac{1}{k} \sum_{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) \sin^2 \delta_{\ell}, \quad (5.64)$$

und da $P_{\ell}(1) = 1$ ist, finden wir

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \Im f(0, k). \quad (5.65)$$

Diese wichtige Beziehung ist das *optische Theorem*. Es besagt, dass der totale gestreute Strom $\hbar k \sigma / m$ gleich der Abnahme des einfallenden Teilchenstroms ist. Um dies einzusehen, berechnen wir den radialen Strom

$$j_r(t, \mathbf{x}) = \frac{\hbar}{m} \Im \left(\psi^\dagger(t, \mathbf{x}) \frac{\partial \psi(t, \mathbf{x})}{\partial r} \right)$$

für die Wellenfunktion (5.13). Um j_r weit weg vom Streuer zu bestimmen, nähern wir

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi_0(t, \mathbf{x})}{\partial r} &= \frac{\partial}{\partial r} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} a(\mathbf{k}) e^{i(r\mathbf{k}\hat{\mathbf{x}} - iE_k(t-t_0)/\hbar)} \sim i\mathbf{k}_0 \cdot \hat{\mathbf{x}} \psi_0(t, \mathbf{x}) \\ \frac{\partial \psi_0(t, \hat{\mathbf{k}}_0 r)}{\partial r} &= \frac{\partial}{\partial r} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} a(\mathbf{k}) e^{i(r\mathbf{k}\hat{\mathbf{k}}_0 - iE_k(t-t_0)/\hbar)} \sim ik_0 \psi(t, \hat{\mathbf{k}}_0 r) \end{aligned} \quad (5.66)$$

und vernachlässigen Terme der Ordnung r^{-3} . Dann wird

$$j_r = j_{r,0} + j_{r,\text{streu}} + j_{r,\text{int}},$$

wobei $j_{r,0}$ die radial einlaufende Stromdichte zum Wellenpaket $\psi_0(t, \mathbf{x})$ ist, $j_{r,\text{streu}}$ die früher berechnete gestreute Stromdichte und

$$j_{r,\text{int}} = \frac{\hbar k_0}{mr} \Im \left(i f(\mathbf{k}', \mathbf{k}_0) \psi_0^\dagger(t, \mathbf{x}) \psi_0(t, \hat{\mathbf{k}}_0 r) (1 + \hat{\mathbf{k}}_0 \cdot \hat{\mathbf{x}}) \right)$$

der von der Interferenz zwischen einlaufender und gestreuter Welle herrührende Anteil zur Stromdichte ist. Beachte, dass $\psi_0(t, \hat{\mathbf{k}}_0 r)$ nur ungleich Null ist nachdem das Teilchen das Streuzentrum erreicht hat und dass $\psi_0(t, \mathbf{x})$ 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 [12].

5.4.2 Analytische Eigenschaften der Streuamplitude

Wie besprochen, können wir für ein radialsymmetrisches Potential die Lösungen der stationären Schrödingergleichung separieren,

$$\psi_{k\ell m} = f_\ell(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \quad (5.67)$$

und die f_ℓ erfüllen die radiale Schrödingergleichung $H_\ell f_\ell = k^2 f_\ell$ in (5.54). 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,

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{d}{dx} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} + 1 \right) f_\ell^0 = 0$$

wählen wir die sphärischen Bessel- und Neumannfunktionen mit folgendem Verhalten für kleine Argumente $x = kr$

$$j_\ell(x) \sim \frac{x^\ell}{1 \cdot 3 \cdots (2\ell+1)} \quad \text{und} \quad \eta_\ell(x) \sim -\frac{1 \cdot 3 \cdots (2\ell-1)}{x^{\ell+1}}, \quad (5.68)$$

beziehungsweise die sphärischen Hankelfunktionen mit folgendem Verhalten für große x

$$h_\ell(x) \sim \frac{1}{x} \epsilon^{i(x-(\ell+1)\pi/2)} \quad \text{und} \quad h_\ell^\dagger(x) \sim \frac{1}{x} \epsilon^{-i(x-(\ell+1)\pi/2)}. \quad (5.69)$$

Die *Wronski-Determinante*

$$W(f, g) = r^2 \left(f \frac{dg}{dr} - \frac{df}{dr} g \right), \quad (5.70)$$

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

$$W(j_\ell, \eta_\ell) = \frac{1}{k} \quad \text{und} \quad W(h_\ell, h_\ell^\dagger) = -\frac{i}{k}. \quad (5.71)$$

Im Folgenden benötigen wir die Greensche Funktion

$$G_\ell(k, r, r') = k (j_\ell(kr)\eta_\ell(kr') - \eta_\ell(kr)j_\ell(kr')), \quad (r' < r) \quad (5.72)$$

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 (5.71), so dass

$$G_\ell(k, r, r) = 0 \quad \text{und} \quad \frac{d}{dr} G_\ell(k, r, r')|_{r'=r} = -\frac{1}{r^2}. \quad (5.73)$$

Wir wollen uns nun davon überzeugen, dass die Lösungen der radialen Lippmann-Schwinger-artigen Integralgleichungen

$$\begin{aligned} \phi_\ell(k, r) &= j_\ell(kr) + \int_0^r G_\ell(k, r, r') U(r') \phi_\ell(k, r') r'^2 dr' \\ f_\ell(k, r) &= h_\ell^\dagger(kr) - \int_r^\infty G_\ell(k, r, r') U(r') f_\ell(k, r') r'^2 dr' \end{aligned} \quad (5.74)$$

auch Lösungen der radialen Schrödingergleichung sind. Wir werden zeigen, dass die ϕ_ℓ am Ursprung regulär sind und die f_ℓ für grosse r einlaufende Kugelwellen beschreiben.

Beweis: Es sei

$$p(r) = \int_0^r G_\ell(k, r, r') q(r') r'^2 dr' .$$

Wegen (5.73) sind die erste und zweite Ableitung dieser Funktion gleich

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} p(r) &= \int_0^r \frac{d}{dr} G_\ell(k, r, r') q(r') r'^2 dr' \\ \frac{d^2}{dr^2} p(r) &= -q(r) + \int_0^r \frac{d^2}{dr^2} G_\ell(k, r, r') q(r') r'^2 dr' . \end{aligned}$$

Wir wirken mit dem in (5.54) definierten radialen Schrödinger-Operator $H_\ell = H_\ell^0 + U$ auf (5.74) und berücksichtigen, dass j_ℓ und G_ℓ die freie radiale Schrödingergleichung erfüllen:

$$\begin{aligned} H_\ell \phi_\ell(k, r) &= (k^2 + U) j_\ell - U \phi_\ell + (k^2 + U) \int_0^r G_\ell(k, r, r') U(r') \phi_\ell(r') r'^2 dr' \\ &= (k^2 + U) j_\ell - U \phi_\ell + (k^2 + U) (\phi_\ell - j_\ell) = k^2 \phi_\ell(k, r) . \end{aligned}$$

Genauso beweist man, dass die zweite Lösung f_ℓ die radiale Schrödingergleichung löst. Diese Integralgleichungen werden nun durch sukzessive Approximation gelöst:

$$\begin{aligned} \phi_\ell &= \sum_{n=0}^{\infty} \phi_\ell^{(n)} , \quad \phi_\ell^{(0)} = j_\ell , \quad \phi_\ell^{(n)} = \int_0^r G_\ell(k, r, r') U(r') \phi_\ell^{(n-1)}(r') r'^2 dr' \\ f_\ell &= \sum_{n=0}^{\infty} f_\ell^{(n)} , \quad f_\ell^{(0)} = h_\ell^\dagger , \quad f_\ell^{(n)} = - \int_r^\infty G_\ell(k, r, r') U(r') f_\ell^{(n-1)}(r') r'^2 dr' . \end{aligned}$$

Speziell im s-Kanal ist

$$G_{\ell=0}(k, r, r') = \frac{1}{k r r'} \sin k(r' - r) \quad (5.75)$$

und es folgen die Rekursionsrelationen

$$\begin{aligned} \phi_0^{(n)}(r) &= \frac{1}{kr} \int_0^r \sin k(r' - r) U(r') \phi_0^{(n-1)}(r') r' dr' \\ f_0^{(n)}(r) &= -\frac{1}{kr} \int_r^\infty \sin k(r - r') U(r') f_0^{(n-1)}(r') r' dr' . \end{aligned} \quad (5.76)$$

Wir müssen also verlangen, dass

$$\int_0^c r V(r) dr = N(c) < \infty \quad (5.77)$$

gilt damit ϕ am Ursprung regulär ist.

• Um das Verhalten der Lösungen bei $r = 0$ für beliebige Drehimpulse zu untersuchen, setzen wir die Entwicklung (5.68) für die sphärischen Besselfunktionen in G_ℓ ein und erhalten

$$G_\ell(k, r, r') \sim \frac{k}{2\ell + 1} \left(\frac{r'^\ell}{r^{\ell+1}} - \frac{r^\ell}{r'^{\ell+1}} \right), \quad r, r' \rightarrow 0,$$

so dass zum Beispiel

$$\phi_\ell^{(1)} \sim \alpha r^{-\ell-1} \int_0^r r'^{2\ell+2} U(r') dr' + \beta r^\ell \int_0^r r' U(r') dr'$$

gilt. Wiederum muss man (5.77) 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

$$\phi_\ell(k, r) \sim j_\ell(kr)(1 + o(r)) \quad (5.78)$$

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 singular das Potential bei $r = 0$ ist, desto größer ist der Analyzitätsbereich in der komplexen Drehimpuls-Ebene. Gilt zum Beispiel

$$|V(r)| < Cr^{-2+\epsilon}, \quad \epsilon > 0, \quad (5.79)$$

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

$$j_\ell(x) \sim \frac{1}{x} \sin(x - \ell\pi/2) \quad \text{und} \quad \eta_\ell(x) \sim -\frac{1}{x} \cos(x - \ell\pi/2)$$

einsetzen, mit dem Resultat

$$G_\ell(k, r, r') \sim \frac{1}{krr'} \sin k(r' - r), \quad r, r' \rightarrow \infty,$$

und damit gilt zum Beispiel

$$f_\ell^{(1)}(k, r) = \frac{\alpha}{r} \int_r^\infty \sin k(r - r') U(r') e^{-ikr'} dr'.$$

Das Potential muss also im Unendlichen schnell genug abfallen, damit die sukzessive

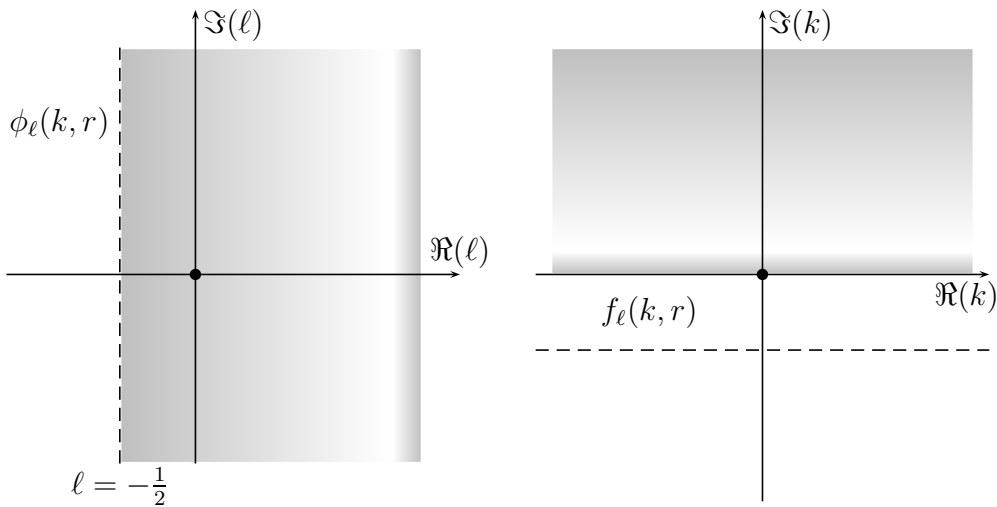


Abbildung 5.3: Die Analytizitätsgebiete der Lösungen $\phi_\ell(k, r)$ und $f_\ell(k, r)$

Approximation Sinn macht. Unter Annahme von

$$\int_b^\infty r^2 |V(r)| dr = M(b) < \infty$$

kann man Folgendes beweisen:

1. Für große r verhält sich die Lösung f_ℓ wie

$$f_\ell(k, r) \sim h_\ell^\dagger(kr).$$

$e^{-i\pi\ell} f_\ell$ 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 Analytizitätsgebiet in der komplexen k -Ebene. Ist zum Beispiel

$$|V(r)| < c^{-mr}, \quad (5.80)$$

dann ist f analytisch für $\Im(k) > -m/2$.

Die Lösungen

$$f_\ell(k, x) \quad \text{und} \quad f_\ell(-k, x)$$

sind linear unabhängig. Diese Unabhängigkeit folgt auch aus den nichtverschwindenden

Wronski-Determinanten. Um die Determinanten zu berechnen, dürfen wir das asymptotische Verhalten $f_\ell(k, r \rightarrow \infty) \sim h_\ell^\dagger(kr)$ benutzen. Man findet

$$W(f_\ell(k, r), f_\ell(-k, r)) = \frac{i}{k}.$$

Wir können die am Ursprung regulären Lösungen auch als Linearkombination dieser unabhängigen Lösungen schreiben:

$$\phi_\ell(k, r) = \frac{1}{2}(J_\ell(-k)f_\ell(k, r) + J_\ell(k)f_\ell(-k, r)). \quad (5.81)$$

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 (5.80). Da $f_\ell(k, r)$ eine einlaufende und $f_\ell(-k, r)$ eine auslaufende Kugelwelle beschreiben, hängt die Streuamplitude folgendermaßen mit der Jostfunktion zusammen

$$S_\ell(k) = e^{2i\delta_\ell(k)} = \frac{J_\ell(k)}{J_\ell(-k)}. \quad (5.82)$$

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 positivem 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

$$2i\delta_\ell(k) = \log J_\ell(k) - \log J_\ell(-k)$$

ergibt sich für die Differenz der Streuphasen für $k \rightarrow \infty$ und $k = 0$ der einfache Ausdruck

$$2i(\delta_\ell(\infty) - \delta_\ell(0)) = 2i \int_0^\infty dk \frac{d\delta_\ell(k)}{dk} = \int_{-\infty}^\infty dk \frac{J'_\ell(k)}{J_\ell(k)} = -2\pi i N(J), \quad (5.83)$$

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

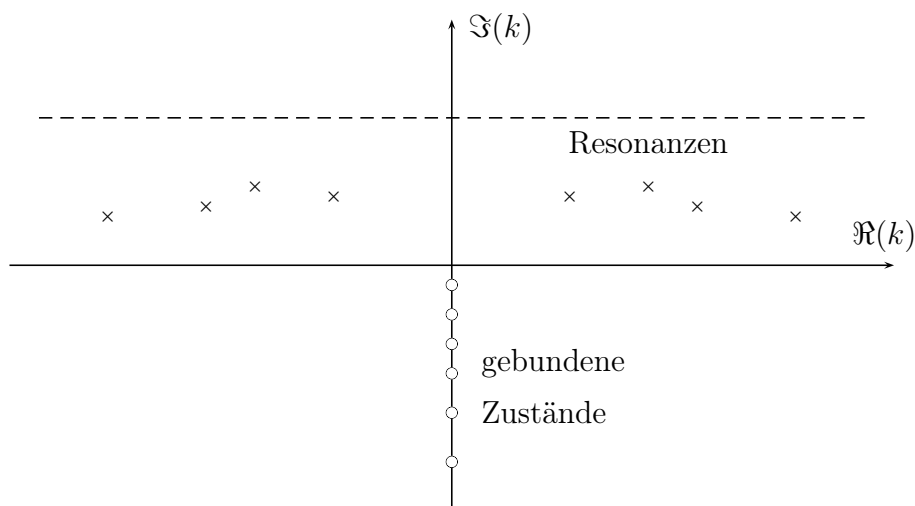


Abbildung 5.4: Die Nullstellen der Jost-Funktion

$$\delta_\ell(0) - \delta_\ell(\infty) = \pi N(J) \equiv \pi m_\ell \quad (5.84)$$

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:

$$\delta_0(0) - \delta_0(\infty) = \pi \left(m_0 + \frac{1}{2} \right). \quad (5.85)$$

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 (5.54) gewonnen werden. Für spezielle Potentiale ist eine Integration durch bekannte Funktionen allerdings möglich. Ein Beispiel ist das kurzreichweitige und

anziehende Exponentialpotential

$$V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{b}{a}\right)^2 e^{-2r/a} \quad \text{bzw.} \quad U(r) = -\left(\frac{b}{a}\right)^2 e^{-2r/a} \quad (5.86)$$

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 (5.86) analytisch lösbar. Zu diesem Zweck schreiben wir die Radialgleichung (5.54) in der Form

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + U(r)\right) u_0(r) = k^2 u_0(r), \quad u_0(r) = r\phi_0(r) \quad (5.87)$$

mit komplexem k . Lösungen zu reellen Energien ergeben sich durch die Wahl

$$k = \begin{cases} (2mE/\hbar^2)^{1/2} & \text{falls } E > 0 \\ i(-2mE/\hbar^2)^{1/2} \equiv -i\kappa & \text{falls } E < 0. \end{cases} \quad (5.88)$$

Gesucht sind also die Lösungen von

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{b^2}{a^2} e^{-2r/a} + k^2\right) u_0(r) = 0 \quad (5.89)$$

die gemäß (5.78) linear mit r verschwinden. Nach der Variablenänderung

$$u_0(r) = f(z) \quad \text{mit} \quad z = be^{-r/a}$$

wird die Gleichung (5.88) zur Besselgleichung

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} + 1 + \frac{a^2 k^2}{z^2}\right) f(z) = 0 \quad (5.90)$$

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

$$u_0(r) = c(J_{iak}(b)J_{-iak}(z) - J_{-iak}(b)J_{iak}(z)) \quad (5.91)$$

Das Verhalten dieser Lösungen für große r oder für $z \rightarrow 0$ entscheidet darüber, ob sie physikalisch erlaubt sind. Aus der Reihendarstellung der Besselfunktionen für $z \rightarrow 0$,

$$J_\nu(z) = \frac{(z/2)^\nu}{\Gamma(1+\nu)} (1 + O(z^2))$$

folgt sofort das asymptotische Verhalten der Lösungen

$$u_0(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} c \left(J_{iak}(b) \frac{\left(\frac{b}{2}\right)^{-iak} e^{ikr}}{\Gamma(1 - iak)} - J_{-iak}(b) \frac{\left(\frac{b}{2}\right)^{iak} e^{-ikr}}{\Gamma(1 + iak)} \right) \quad (5.92)$$

Gebundene Zustände: Wir betrachten dieses Verhalten zunächst für negative Energiewerte oder für $k = -i\kappa$:

$$u_0(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} -c \left(J_{a\kappa}(b) \frac{\left(\frac{b}{2}\right)^{-a\kappa} e^{\kappa r}}{\Gamma(1 - a\kappa)} - J_{-a\kappa}(b) \frac{\left(\frac{b}{2}\right)^{a\kappa} e^{-\kappa r}}{\Gamma(1 + a\kappa)} \right). \quad (5.93)$$

Diese Lösung ist genau dann quadratintegabel wenn

$$J_{a\kappa}(b) = 0 \quad (5.94)$$

ist. Bei unserer Analyse mussten wir $\nu \notin \mathbb{Z}$ annehmen. Für ganzzahlige $\nu = ika = n$ 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 (5.94).

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 (5.94). Nimmt die Stärke des anziehenden Potentials zu, so wächst die Anzahl gebundener Zustände im Drehimpulssektor $\ell = 0$.

Streuzustände: Wir können die Konstante c in (5.92) derart wählen, dass die Streulösung die kanonische Form (5.81) annimmt. Für große Radien dürfen wir darin f_0 durch h_0^\dagger ersetzen, so dass

$$\phi_0(k, r) \longrightarrow \frac{1}{r} u_0(k, r) = \frac{i}{2kr} (J_0(-k)e^{-ikr} - J_0(k)e^{ikr}) \quad (5.95)$$

gilt. Für die Streuphase im s -Kanal ergibt sich dann

$$e^{2i\delta_0(k)} = \frac{J_0(k)}{J_0(-k)} = \left(\frac{b}{2}\right)^{-2iak} \frac{\Gamma(1 + iak)}{\Gamma(1 - iak)} \frac{J_{iak}(b)}{J_{-iak}(b)}. \quad (5.96)$$

Wegen der bekannten Relationen

$$\Gamma(1 + iak) = \overline{\Gamma(1 - iak)} \quad \text{und} \quad J_{-iak}(b) = \overline{J_{iak}(b)}$$

ist die rechte Seite in der Formel (5.96) wie erwartet eine Phase. Offensichtlich ist $e^{2i\delta_0(0)} =$

1. Benutzt man die Entwicklung der Besselfunktion für hohe Ordnungen²

$$J_\nu(z) = \frac{(z/2)^\nu}{\Gamma(\nu+1)} (1 + O(\nu^{-1}))$$

dann folgt auch $e^{2i\delta(\infty)} = 1$, so dass

$$\delta_0(0) - \delta_0(\infty) = \pi n, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (5.97)$$

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

$$\phi_0(k, r) = \frac{1}{r} u_0(k, r) \xrightarrow{(5.91)} -\frac{bc}{a} W(J_{iak}(b), J_{-iak}(b)) = \frac{2ic}{a\pi} \sinh(ak\pi).$$

Die Forderung, dass $\phi_0(k, r)$ für kleine Radien gegen die freie Lösung $j_0(kr)$ strebt, fixiert die Konstante c zu

$$c = \frac{a\pi}{2i} \frac{1}{\sinh(ak\pi)}. \quad (5.98)$$

Dies führt auf folgenden Ausdruck für die Jostfunktion

$$J_0(k) = \frac{a\pi k}{\sinh(a\pi k)} \frac{J_{iak}(b)}{\Gamma(1 - iak)} \left(\frac{b}{2}\right)^{-iak} \quad (5.99)$$

Sie hat Nullstellen für Werte $k_n = -i\kappa_n$ 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

$$k = \frac{i}{a} n, \quad n = 1, 2, 3$$

und ist analytisch in der Halbebene $\Im(k) < 1/a$, in Einklang mit den allgemeinen Resultaten unterhalb (5.81).

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

²Abramowitz und Stegun, Formel 9.1.10

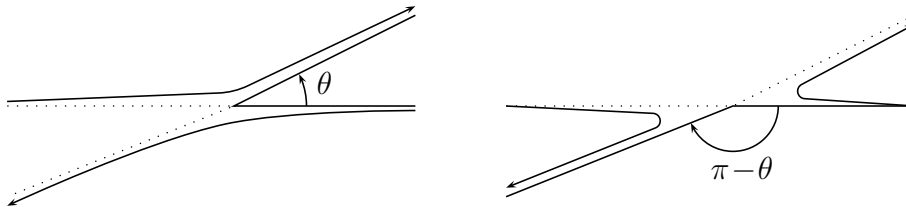
Teilchen berücksichtigt werden und gibt Anlass zu Austauscheffekten. Im Schwerpunktsystem zweier Teilchen wird die Relativbewegung durch den Ortsvektor $\mathbf{x} = \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1$ beschrieben, wenn \mathbf{x}_1 und \mathbf{x}_2 die Ortsvektoren der individuellen Teilchen sind. Für *verschiedene Teilchen* ist dann die Wellenfunktion des Systems für große r

$$\psi(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} + \frac{f(\mathbf{k}', \mathbf{k})}{r} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{x}}. \quad (5.100)$$

Für *identische Bosonen* ist die Wellenfunktion zu symmetrisieren. Bei der Vertauschung der beiden Teilchen geht \mathbf{x} in $-\mathbf{x}$ oder (r, \mathbf{k}') in $(r, -\mathbf{k}')$ über. Die symmetrisierte Wellenfunktion ist also

$$\psi_s(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} + (f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})) \frac{e^{i\mathbf{k}'\mathbf{x}}}{r} \right). \quad (5.101)$$

Die ersten beiden Summanden beschreiben die anfängliche Bewegung der beiden Teilchen im Schwerpunktsystem: Eins bewegt sich in positive \mathbf{k} -Richtung, das andere in die entgegengesetzte Richtung.



Die Stromdichte für jedes stoßende Teilchen ist $\pm \hbar \mathbf{k} / \mu$, wobei μ die reduzierte Masse ist. Der zweite Summand entspricht der gestreuten Welle. Wir können nicht unterscheiden ob das erste Teilchen nach \mathbf{k}' und das zweite nach $-\mathbf{k}'$ gestreut wurde oder umgekehrt.

Offensichtlich ist der differentielle Wirkungsquerschnitt für elastische Streuung von identischen spinlosen Teilchen

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2. \quad (5.102)$$

Da wir zuerst die Amplituden addieren und danach das Quadrat bilden, entsteht ein Interferenzterm $\sim \Re(f(\mathbf{k}', \mathbf{k})f(-\mathbf{k}', \mathbf{k}))$. Dieser sogenannte *Austauschterm* rührt von der Korrelation zwischen den Teilchen infolge der Symmetrie des Zustandes her.

Als Anwendung betrachten wir die *Coulombstreuung* von α -Teilchen. Die Streuamplitude

$$f(\theta) = \frac{\gamma}{2k} \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)} \frac{\exp(-2i\gamma \log \sin \theta/2)}{\sin^2 \theta/2}, \quad \gamma = \frac{1}{ka_0}, \quad (5.103)$$

führt auf den Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + f(\theta)\bar{f}(\pi - \theta) + \bar{f}(\theta)f(\pi - \theta). \quad (5.104)$$

Setzen wir hier die Streuamplitude ein, dann zeigt eine kurze Rechnung, dass

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\gamma^2}{4k^2} \left(\frac{1}{\sin^4 \theta/2} + \frac{1}{\cos^4 \theta/2} + 2 \frac{\cos(\gamma \log \tan^2 \theta/2)}{\sin^2 \theta/2 \cos^2 \theta/2} \right). \quad (5.105)$$

Diese Formel wurde zuerst von MOTT angegeben [14]. 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 Austauschsterme 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 α -Teilchen an Helium-Gas nachgewiesen, und damit zugleich die Bose-Statistik der α -Teilchen und ihre Wellennatur vollständig bestätigt. Der Austauscheffekt ist rein quantenmechanischer Natur. Im klassischen Limes $\hbar \rightarrow 0$ geht

$$\gamma = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v}$$

gegen unendlich und der Austauschsterm oszilliert merklich. Über einen kleinen Raumwinkel gemittelt gibt er im klassischen Limes keinen Beitrag zur Streuung. Auch für kleine Relativgeschwindigkeiten ist γ groß und der Austauschsterm trägt nach Mittelung über einen gewissen Winkelbereich nicht mehr bei. Aus denselben Gründen braucht man den Austauschsterm bei kleinen Streuwinkeln nicht zu berücksichtigen.

5.6 Elastische Streuung gleichartiger Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen

Im allgemeinen Fall ist beim Stoß von Teilchen nur der Gesamtdrehimpuls \mathbf{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),

$$\psi = \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)\chi(m_1, m_2).$$

Für zwei Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen ist der Gesamtspin entweder 0 (Singulett) oder 1 (Triplet). Für den Singulettzustand ist die Ortswellenfunktion symmetrisch, d.h.

$$\frac{d\sigma_s}{d\Omega} = |f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2, \quad (\text{Singulett}). \quad (5.106)$$

Im Tripletzustand mit Gesamtspin $S = 1$ ist die Ortswellenfunktion antisymmetrisch und daher gilt

$$\frac{d\sigma_t}{d\Omega} = |f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) - f(-\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2, \quad (\text{Triplet}). \quad (5.107)$$

Bei der Streuung von Protonen (verursacht durch die Coulombkraft) stimmt dann $d\sigma_s/d\Omega$ mit dem Mottischen Wirkungsquerschnitt überein, und

$$\frac{d\sigma_t}{d\Omega} = \frac{\gamma^2}{4k^2} \left(\frac{1}{\sin^4 \theta/2} + \frac{1}{\cos^4 \theta/2} - 2 \frac{\cos(\gamma \log \tan^2 \theta/2)}{\sin^2 \theta/2 \cos^2 \theta/2} \right) \quad (5.108)$$

Der Wirkungsquerschnitt im Triplet-Kanal verschwindet für $\theta = \pi/2$.

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 Tripletzustand deren drei, daher ist der Mittelwert des Streuquerschnitts

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4} \frac{d\sigma_s}{d\Omega} + \frac{3}{4} \frac{d\sigma_t}{d\Omega} = \frac{\gamma^2}{4k^2} \left(\frac{1}{\sin^4 \theta/2} + \frac{1}{\cos^4 \theta/2} - \frac{\cos(\gamma \log \tan^2 \theta/2)}{\sin^2 \theta/2 \cos^2 \theta/2} \right). \quad (5.109)$$

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 herabgesetzt. Schon 1931 haben Versuche von GERTHSEN [15] (p Streuung an Wasserstoff) den Interferenzterm in (5.109) sehr genau bestätigt. Auch die Streuung von 20 eV Elektronen an Wasserstoff durch WILLIAMS [16] 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} ,

$$\begin{aligned}\phi(t) &= U_0(t)\phi(0) \quad , \quad U_0(t) = e^{-itH_0/\hbar} \\ \psi(t) &= U(t)\psi(0) \quad , \quad U(t) = e^{-itH/\hbar}.\end{aligned}\tag{5.110}$$

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 einparametrische Schar unitärer Transformationen

$$W(t) = e^{itH/\hbar}e^{-itH_0/\hbar} = U(-t)U_0(t)\tag{5.111}$$

und die dazu adjungierte Schar

$$W^\dagger(t) = e^{itH_0/\hbar}e^{-itH/\hbar} = U_0(-t)U(t).\tag{5.112}$$

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 $V(\mathbf{x})$ sei quadratintegrierbar. Dann existieren die Møller-Operatoren

$$\Omega_\pm = s - \lim_{t \rightarrow \mp\infty} W(t) = s - \lim_{t \rightarrow \mp\infty} e^{itH/\hbar}e^{-itH_0/\hbar}.\tag{5.113}$$

Diese existieren im Sinne der *starken Operatorkonvergenz*

$$\lim_{t \rightarrow \mp\infty} \|\Omega_\pm\psi - W(t)\psi\| = 0, \quad \forall \psi \in \mathcal{H}.\tag{5.114}$$

Die Forderung $V(\mathbf{x}) \in L_2(\mathbb{R}^3)$ 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

$$\|\Omega_{\pm}\psi\| = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} \|U(-t)U_0(t)\psi\| = \|\psi\|$$

oder

$$\Omega_+^\dagger\Omega_+ = \Omega_-^\dagger\Omega_- = \mathbb{1}. \quad (5.115)$$

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

$$P_{\pm} \equiv \Omega_{\pm}\Omega_{\pm}^\dagger \quad (5.116)$$

sind offensichtlich selbstadjungiert und idempotent,

$$P_{\pm}^\dagger = P_{\pm} \quad , \quad P_{\pm}P_{\pm} = \Omega_{\pm}\Omega_{\pm}^\dagger\Omega_{\pm}\Omega_{\pm}^\dagger \stackrel{(5.115)}{=} P_{\pm}. \quad (5.117)$$

Daher sind die Operatoren P_{\pm} orthogonale Projektoren. Gilt

$$P_{\pm} = \mathbb{1} - P_B, \quad (5.118)$$

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,

$$\Omega : (x_1, x_2, x_3, \dots) \longrightarrow (0, x_1, x_2, \dots)$$

und der dazu adjungierte *Links-Schiebe-Operator*

$$\Omega^\dagger : (x_1, x_2, x_3, \dots) \longrightarrow (x_2, x_3, x_4, \dots)$$

Der Operator Ω ist isometrisch und

$$\Omega^\dagger\Omega = \mathbb{1} \quad \text{und} \quad \Omega\Omega^\dagger = \mathbb{1} - P_1, \quad (5.119)$$

wobei P_1 orthogonal auf den Vektor $(1, 0, 0, \dots) \in \ell_2$ projiziert. Dieser Vektor wird von Ω^\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

$$\Omega_{\pm}\mathcal{H} = \mathcal{H}_B^{\perp} \quad (5.120)$$

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,

$$(\phi, \Omega_+\psi) = 0, \quad \forall \psi \in \mathcal{H}.$$

Somit ist $\Omega_+^{\dagger}\phi = 0$ und wir folgern

$$0 = \Omega_+\Omega_+^{\dagger}\phi = (\mathbb{1} - P_B)\phi = \phi - P_B\phi,$$

so dass $\phi \in \mathcal{H}_B$ gilt.

Die Møller-Operatoren genügen der *Verflechtungsrelation*

$$H\Omega_{\pm} = \Omega_{\pm}H_0. \quad (5.121)$$

Der Beweis ist nicht schwierig: Wir schreiben

$$U(-t)\Omega_{\pm} = \lim_{s \rightarrow \mp\infty} U(-t)U(-s)U_0(s)U_0(t)U_0(-t)$$

worin das Produkt der beiden letzten Faktoren die Identität ist. Die Substitution $t+s = \tau$ führt auf

$$U(-t)\Omega_{\pm} = \lim_{\tau \rightarrow \mp\infty} U(-\tau)U_0(\tau)U_0(-t) = \Omega_{\pm}U_0(-t)$$

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

$$\psi^{(\pm)} = \Omega_{\pm}\phi \quad (5.122)$$

die auf den gebundenen Zuständen senkrecht stehenden Bilder von ϕ . Dann ist

$$\phi(t) = U_0(t)\phi \quad (5.123)$$

eine normierte Lösung der freien Schrödingergleichung und

$$\psi^{(+)}(t) = U(t)\psi^{(+)} \quad , \quad \psi^{(-)}(t) = U(t)\psi^{(-)} \quad (5.124)$$

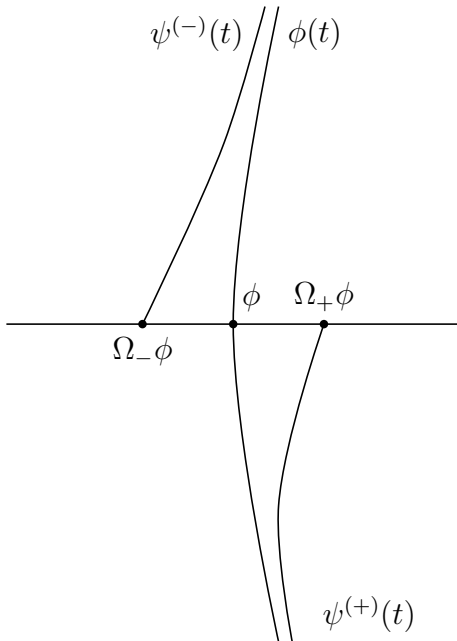
normierte Lösungen der vollen Schrödinger-Gleichung. Die physikalische Bedeutung dieser

Lösungen folgt aus ihrem zeitlichen Verhalten,

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \|\psi^{(+)}(t) - \phi(t)\| = 0 \quad , \quad \lim_{t \rightarrow +\infty} \|\psi^{(-)}(t) - \phi(t)\| = 0. \quad (5.125)$$

Beim Beweis benutzen wir die Unitarität der Evolutionsoperatoren

$$\begin{aligned} \|\psi^{(+)}(t) - \phi(t)\| &= \|U(t)\psi^{(+)} - U_0(t)\phi\| \\ &= \|\psi^{(+)} - U(-t)U_0(t)\phi\| \\ &= \|(\Omega_+ - W(t))\phi\| \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} 0. \end{aligned}$$



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

$$\psi_{\text{ein}} = \Omega_+ \phi_{\text{ein}} \quad \text{und} \quad \psi_{\text{aus}} = \Omega_- \phi_{\text{aus}}. \quad (5.126)$$

Definiert man hiermit die beiden Lösungen der freien Schrödingergleichung

$$\phi_{\text{ein}}(t) = U_0(t)\phi_{\text{ein}} \quad \text{und} \quad \phi_{\text{aus}}(t) = U_0(t)\phi_{\text{aus}} \quad (5.127)$$

und der beiden Lösungen der Schrödingergleichung

$$\psi^{(+)}(t) = U(t)\psi_{\text{ein}} \quad \text{und} \quad \psi^{(-)}(t) = U(t)\psi_{\text{aus}} \quad (5.128)$$

so gilt gemäß (5.125) für das asymptotische Verhalten

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \|\psi^{(+)}(t) - \phi_{\text{ein}}(t)\| = 0 \quad \text{und} \quad \lim_{t \rightarrow +\infty} \|\psi^{(-)}(t) - \phi_{\text{aus}}(t)\| = 0. \quad (5.129)$$

Bei einem Streuprozess modelliert $\psi^{(+)}$ den einfallenden Strahl und $\psi^{(-)}$ die gestreute Welle. Das Skalarprodukt zweier Lösungen ist zeitunabhängig und gleich seinem Wert bei $t = 0$,

$$(\psi^{(-)}(t), \psi^{(+)}(t)) = (\psi_{\text{aus}}, \psi_{\text{ein}}) = (\Omega_- \phi_{\text{aus}}, \Omega_+ \phi_{\text{ein}}) = (\phi_{\text{aus}}, \Omega_-^\dagger \Omega_+ \phi_{\text{ein}}). \quad (5.130)$$

Der auf dem ganzen Hilbert-Raum definierte Operator

$$S \equiv \Omega_-^\dagger \Omega_+ \quad (5.131)$$

wird als Streuoperator oder kürzer als S -Matrix bezeichnet. Es gilt der

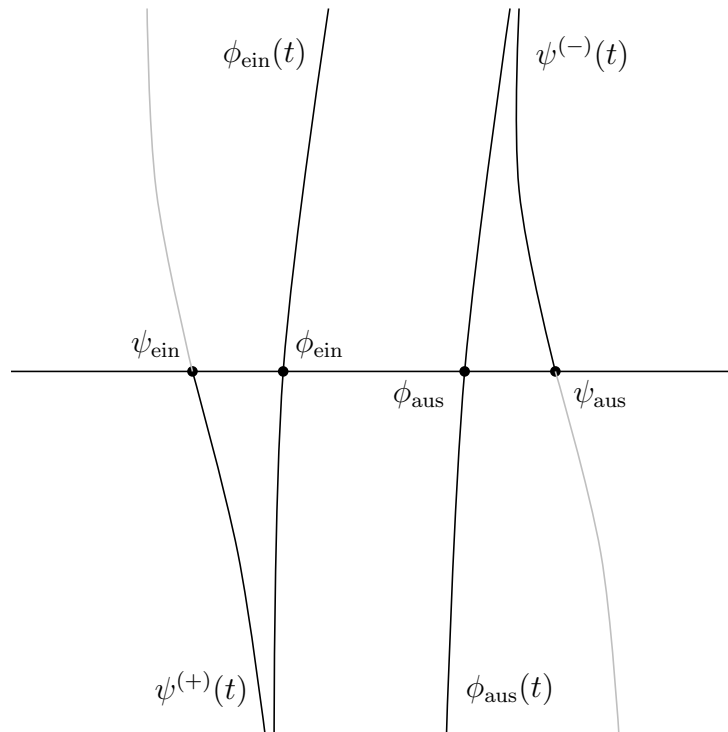
Satz: Der Streuoperator ist unitär und vertauscht mit H_0

$$S^\dagger S = S S^\dagger = \mathbb{1} \quad \text{und} \quad [S, H_0] = 0. \quad (5.132)$$

Im Beweis benutzt man die asymptotische Vollständigkeit und Isometrie der Møller-Operatoren sowie die Verflechtungsrelation:

$$\begin{aligned} S^\dagger S = \mathbb{1} & : S^\dagger S = \Omega_+^\dagger \Omega_- \Omega_-^\dagger \Omega_+ = \Omega_+^\dagger (\mathbb{1} - P_B) \Omega_+ = \Omega_+^\dagger \Omega_+ = \mathbb{1} \\ [S, H_0] = 0 & : S H_0 = \Omega_-^\dagger \Omega_+ H_0 = \Omega_-^\dagger H \Omega_+ = H_0 \Omega_-^\dagger \Omega_+ = H_0 S. \end{aligned}$$

Ähnlich beweist man die Identität $S S^\dagger = \mathbb{1}$. Die vorliegende Situation ist der folgenden Abbildung skizziert.



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 [19]. 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 in dieser Vorlesung 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 hat ungewöhnliche Konsequenzen. Zuerst erinnern wir an die Lorentztransformationen die den Übergang zwischen Inertialsystemen beschreiben. Die Elemente einer relativistischen Quantentheorie transformieren kovariant unter Lorentztransformationen und daher ist ein gutes Verständnis der Transformation von Koordinaten, Impulsen oder Feldern beim Wechsel des Inertialsystems sehr hilfreich. Nach diesen Vorbereitungen wird es uns leichter fallen, eine kovariante Wellengleichung für spinlose skalare Teilchen, wie zum Beispiel π - oder K -Mesonen, zu finden. Wir werden danach sehen, wie die Wellengleichung in Anwesenheit von elektromagnetischen Feldern modifiziert wird.

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

$$x = \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ct \\ \mathbf{x} \end{pmatrix} \quad (6.1)$$

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

$$\xi^T = (\xi^0, \xi^1, \xi^2, \xi^3) \quad \text{bzw.} \quad \xi = (\xi^\mu).$$

Auf dem Tangentialraum V führen wir eine Bilinearform ein,

$$(\xi, \eta) = \xi^0 \eta^0 - \xi^1 \eta^1 - \xi^2 \eta^2 - \xi^3 \eta^3, \quad (6.2)$$

welche mit Hilfe des *metrischen Tensors*

$$G = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = (g_{\mu\nu}) \quad \text{bzw.} \quad G^{-1} = (g^{\mu\nu})$$

folgendermaßen geschrieben werden kann

$$(\xi, \eta) = \sum_{\mu\nu} g_{\mu\nu} \xi^\mu \eta^\nu = \xi^T G \eta. \quad (6.3)$$

Dann ist der lorentzinvariante Abstand zweier Ereignisse mit Raumzeit-Koordinaten x und y gleich

$$d(x, y) = (\xi, \xi), \quad \text{wobei} \quad \xi = y - x \quad (6.4)$$

der Differenzvektor zwischen den Ereignissen ist. Indices werden mit $g_{\mu\nu}$ und $g^{\mu\nu}$ hinunter-

oder hinaufgezogen, zum Beispiel gelten

$$\xi_\mu = g_{\mu\nu}\xi^\nu \quad \text{bzw.} \quad \xi^\mu = g^{\mu\nu}\xi_\nu, \quad \text{so dass} \quad (\xi, \eta) = \xi^\mu\eta_\mu = \xi_\mu\eta^\mu.$$

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

$$x'^\mu = a^\mu + f^\mu(x), \quad \text{wobei} \quad f^\mu(0) = 0 \quad \text{und} \quad a^\mu = \text{konstant}$$

angenommen werden kann. Wegen der Homogenität des Raumes sind

$$x''^\mu = x'^\mu - a^\mu$$

ebenfalls Koordinaten in einem Inertialsystem I'' . Es gilt dann

$$x''^\mu = f^\mu(x) \quad \text{mit} \quad f^\mu(x=0) = 0.$$

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 in einem anderen Inertialsystem:

$$x''^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu,$$

beziehungsweise

$$x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu + a^\mu \iff x' = \Lambda x + a. \quad (6.5)$$

Seien nun x die Koordinaten einer zur Zeit y^0 am Orte \mathbf{y} ausgesandten Lichtwelle in I . Bezüglich I' wird dieselbe Lichtwelle zur Zeit y'^0 am Orte \mathbf{y}' ausgesandt und hat die

Koordinaten y . In beiden Inertialsystemen ist die Lichtgeschwindigkeit gleich, so dass gilt

$$0 = (x - y)^T G(x - y) = (x' - y')^T G(x' - y') = (x - y) \Lambda^T G \Lambda (x - y).$$

Eine hinreichende und notwendige Bedingung dafür ist

$$\Lambda^T G \Lambda = \kappa(\Lambda) G \quad \text{mit} \quad \kappa(\mathbb{1}) = 1 \quad \text{und} \quad \kappa(\Lambda) \geq 0.$$

Ist $\kappa \neq 1$, dann können wir durch eine Maßstabsänderung

$$x' \longrightarrow \sqrt{\kappa} x'$$

stets $\kappa = 1$ erreichen. Wir wollen also nur Matrizen Λ betrachten, welche die Bedingung

$$\Lambda^T G \Lambda = G \iff \Lambda^\alpha_\mu g_{\alpha\beta} \Lambda^\beta_\nu = g_{\mu\nu} \quad (6.6)$$

erfüllen. Für solche Transformationen ist das relativistische Abstandskadrat zweier Ereignisse x, y im Minkowski-Raum unabhängig vom Inertialsystem,

$$(x' - y')^2 = (x' - y')^T G(x' - y') = (x - y)^T G(x - y) = (x - y)^2. \quad (6.7)$$

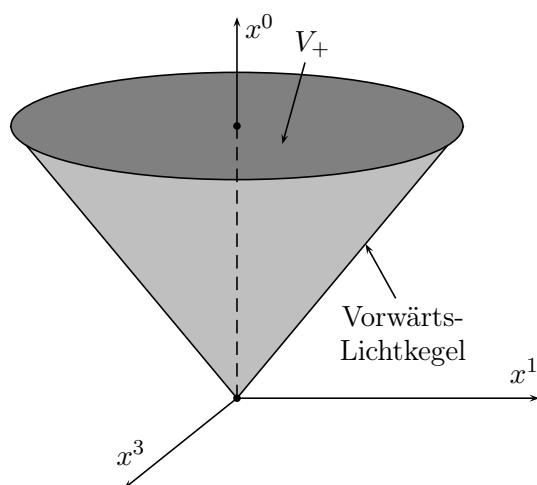
Die linearen Abbildungen (6.5) zwischen zwei Inertialsystemen bilden die sogenannte Poincare- oder inhomogene Lorentzgruppe, die mit iL bezeichnet wird,

$$iL = \{(\Lambda, a) \mid a \in V, \Lambda \in \mathcal{L}(V), \Lambda^T G \Lambda = G\}, \quad (6.8)$$

mit der Gruppenmultiplikation

$$(\Lambda_2, a_2)(\Lambda_1, a_1) = (\Lambda_2 \Lambda_1, \Lambda_2 a_1 + a_2). \quad (6.9)$$

Die Poincaregruppe ist das semidirekte Produkt von



- der normalen Untergruppe der Raumzeit-Translationen (inklusive den Zeitverschiebungen)

$$\begin{aligned} x^\mu &\longrightarrow x'^\mu = x^\mu + a^\mu \\ x' &= x + a \end{aligned} \quad (6.10)$$

- mit der Untergruppe der Lorentz-Transformationen (räumliche Drehungen und Lorentzboosts)

$$\begin{aligned} x^\mu &\longrightarrow x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu \\ x' &= \Lambda x. \end{aligned} \quad (6.11)$$

Wegen (6.6) gilt

$$\det \Lambda^T \det \Lambda = (\det \Lambda)^2 = 1 \quad \text{oder} \quad \det \Lambda = \pm 1.$$

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*

$$V_+ = \{\xi^0 > 0, (\xi, \xi) > 0\} \quad (6.12)$$

entweder in sich, oder in den *Rückwärtslichtkegel*

$$V_- = \{\xi^0 < 0, (\xi, \xi) > 0\} \quad (6.13)$$

ab. Im zweiten Fall wird die Zeitrichtung umgekehrt. In der Tat, das 00-Komponente der Matrixgleichung (6.6) lautet ausgeschrieben

$$\Lambda_0^\alpha g_{\alpha\beta} \Lambda_0^\beta = 1 = (\Lambda_0^0)^2 - \sum_i (\Lambda_0^i)^2,$$

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 Λ_0^0 können zur Klassifizierung der Elemente der Lorentzgruppe verwendet werden. Entsprechend zerfällt diese in 4 *Zusammenhangs-Komponenten*

$$L = L_+^\uparrow \cup L_-^\uparrow \cup L_+^\downarrow \cup L_-^\downarrow, \quad (6.14)$$

mit folgender Bedeutung für die Indizes:

$$\pm : \det \Lambda = \pm 1 \quad , \quad \uparrow : \text{keine Zeitumkehr } (\Lambda_0^0 \geq 1) \quad , \quad \downarrow : \text{Zeitumkehr } (\Lambda_0^0 \leq -1).$$

Unter Einführung der Raumspiegelung P , Zeitumkehr T und Raumzeit-Spiegelung PT

$$P = -T = G \quad \text{und} \quad PT = -\mathbb{1}_4$$

ist jede Lorentz-Transformation dann aus

$$L_+^\uparrow \cup PL_+^\uparrow \cup TL_+^\uparrow \cup PTL_+^\uparrow. \quad (6.15)$$

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

$$iL = iL_+^\uparrow \cup iL_-^\uparrow \cup iL_+^\downarrow \cup iL_-^\downarrow. \quad (6.16)$$

6.1.1 Die Lie-Algebra der Lorentzgruppe

Die Gruppe der Lorentz-Transformationen besteht aus den reellen 4×4 -Matrizen, welche

$$\Lambda^T G \Lambda = G \quad \text{oder} \quad \Lambda_\mu^\alpha g_{\alpha\beta} \Lambda_\nu^\beta = g_{\mu\nu} \quad (6.17)$$

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 den Drehungen im Raum betrachtet man eine einparametrische Familie $\Lambda(s)$ von Lorentz-Transformationen mit $\Lambda(0) = \mathbb{1}_4$ und definiert die *Erzeugenden* der $SO(1, 3)$ gemäß

$$\omega = \frac{d}{ds} \Lambda(s)|_{s=0} \quad \text{bzw.} \quad \omega_\beta^\alpha = \frac{d}{ds} \Lambda_\beta^\alpha|_{s=0}. \quad (6.18)$$

Leiten wir (6.17) an der Stelle $s=0$ ab, dann finden wir folgende lineare Bedingung für die infinitesimalen Erzeugenden

$$(G\omega)^T + G\omega = 0 \quad \text{bzw.} \quad \omega_\mu^\alpha g_{\alpha\nu} + g_{\mu\beta} \omega_\nu^\beta \equiv \omega_{\nu\mu} + \omega_{\mu\nu} = 0. \quad (6.19)$$

Jede Linearkombination von Erzeugenden ist wieder eine Erzeugende und deshalb bilden die Erzeugenden einen linearen Raum. Der Kommutator zweier Erzeugenden,

$$[\omega_1, \omega_2] = \omega_1 \omega_2 - \omega_2 \omega_1 = -[\omega_2, \omega_1] \quad (6.20)$$

ist ebenfalls ein erzeugendes Element. Es gilt die Jacobi-Identität

$$[\omega_1, [\omega_2, \omega_3]] + [\omega_3, [\omega_1, \omega_2]] + [\omega_2, [\omega_3, \omega_1]] = 0.$$

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 $so(1, 3)$. Nach (6.19) können die Elemente von $so(1, 3)$ (nach herunterziehen eines Index) mit den schiefsymmetrischen reellen 4×4 -Matrizen identifi-

ziert werden. Die Erzeugenden können wie folgt parametrisiert werden:

$$(\omega^\mu{}_\nu) = \omega(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\theta}) = \begin{pmatrix} 0 & -\alpha_1 & -\alpha_2 & -\alpha_3 \\ -\alpha_1 & 0 & -\theta_3 & \theta_2 \\ -\alpha_2 & \theta_3 & 0 & -\theta_1 \\ -\alpha_3 & -\theta_2 & \theta_1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.21)$$

Für $\boldsymbol{\alpha} = 0$ beschreibt die zugehörige 1-parametrische Untergruppe

$$\Lambda(0, \boldsymbol{\theta} \mathbf{e}) = e^{\omega(0, \mathbf{e})\boldsymbol{\theta}}, \quad \text{mit } \mathbf{e} \cdot \mathbf{e} = 1,$$

eine Drehung um die Achse \mathbf{e} mit dem Winkel $\boldsymbol{\theta}$, wie Sie bei der Diskussion von räumlichen Drehungen in der Quantenmechanik I oder der klassischen Mechanik gelernt haben. Die eigentlichen Drehungen bilden eine Untergruppe der Lorentzgruppe bestehend aus den Matrizen

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 1 & 0^T \\ 0 & R \end{pmatrix}, \quad R \in SO(3).$$

Für $\boldsymbol{\theta} = 0$ beschreibt die 1-parametrische Untergruppe

$$\Lambda(\alpha \mathbf{e}, 0) = e^{\omega(\mathbf{e}, 0)\alpha} = \begin{pmatrix} \cosh(\alpha) & -\sinh(\alpha) \cdot \mathbf{e}^T \\ -\sinh(\alpha) \mathbf{e} & \mathbb{1}_3 + (\cosh(\alpha) - 1) \mathbf{e} \mathbf{e}^T \end{pmatrix} \quad (6.22)$$

Boosts in Richtung des Einheitsvektors $\mathbf{e} = \hat{\boldsymbol{\alpha}}$. Wie man leicht sieht (man transformiere z.B. den Impulsvektor eines ruhenden Teilchens) hängen α und \mathbf{e} mit der Relativgeschwindigkeit \mathbf{v} der beiden Inertialsysteme wie folgt zusammen:

$$\cosh(\alpha) = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} \equiv \gamma \quad \text{und} \quad \sinh(\alpha) \cdot \mathbf{e} = -\gamma \cdot \boldsymbol{\beta}, \quad \boldsymbol{\beta} = \frac{\mathbf{v}}{c}. \quad (6.23)$$

Bewegt sich zum Beispiel das Inertialsystem I relativ zum Inertialsystem I' mit der Geschwindigkeit $\mathbf{v} = v \mathbf{e}_1$, so lautet die Lorentz-Transformation

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \gamma & \gamma\beta & 0 & 0 \\ \gamma\beta & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.24)$$

und entsprechend ist

$$\begin{aligned} x'^0 &= \gamma (x^0 + \beta x^1) & , & \quad x'^2 = x^2 \\ x'^1 &= \gamma (\beta x^0 + x^1) & , & \quad x'^3 = x^3. \end{aligned} \quad (6.25)$$

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

$$[\omega(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\theta}), \omega(\boldsymbol{\alpha}', \boldsymbol{\theta}')] = \omega(-\boldsymbol{\alpha} \wedge \boldsymbol{\theta}' + \boldsymbol{\alpha}' \wedge \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta} \wedge \boldsymbol{\theta}' - \boldsymbol{\alpha} \wedge \boldsymbol{\alpha}'). \quad (6.26)$$

Als Basis der Lorentz-Algebra wählen wir die Matrizen L_i und Ω_i in der Entwicklung

$$\omega(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^3 \alpha_i L_i + \sum_{i=1}^3 \theta_i \Omega_i. \quad (6.27)$$

Diese haben die explizite Form

$$L_1 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.28)$$

und

$$\Omega_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Omega_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Omega_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.29)$$

Wegen (6.26) lauten die Kommutatoren dieser Basiselemente

$$[L_i, L_j] = -\epsilon_{ijk} \Omega_k, \quad [\Omega_i, \Omega_j] = \epsilon_{ijk} \Omega_k, \quad [L_i, \Omega_j] = \epsilon_{ijk} L_k. \quad (6.30)$$

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 die Energie-Impuls Beziehung

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \quad (6.31)$$

welche bei einer Galilei-Transformation in ein neues Inertialsystem unverändert bleibt. In der Quantenmechanik sind die Energie und der Impuls eines Teilchens mit der Phasenänderung der Wellenfunktion in Zeit und Raum verknüpft. Damit ein freies Teilchen die Energie-Impuls-Relation (6.31) hat, muss seine Wellenfunktion

$$\psi(t, \mathbf{x}) = e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)/\hbar}$$

die Schrödingergleichung

$$i\hbar\partial_t\psi = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i}\nabla \right)^2 \psi$$

erfüllen. Also kann man die Schrödingergleichung aus der Energie-Impuls-Beziehung (6.31) gewinnen, wenn man die *Korrespondenzregel*

$$E \longrightarrow -\frac{\hbar}{i}\partial_t \quad \text{und} \quad \mathbf{p} \longrightarrow \frac{\hbar}{i}\nabla \quad (6.32)$$

in (6.31) einsetzt und das Resultat auf eine Wellenfunktion ψ wirken lässt. Diese Vorgehensweise werden wir nun auf relativistische Teilchen übertragen.

Mit Hilfe des 4-er Impulses

$$(p^\mu) = \begin{pmatrix} E/c \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad (p_\mu) = \begin{pmatrix} E/c \\ -\mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (6.33)$$

lautet die kovariant geschriebene Korrespondenzregel

$$p_\mu \longrightarrow i\hbar\partial_\mu. \quad (6.34)$$

Die relativistische Verallgemeinerung der Energie-Impuls Beziehung (6.31) ist

$$(p, p) \equiv g^{\mu\nu} p_\mu p_\nu = m^2 c^2 \quad (6.35)$$

und besagt, dass das lorentzinvariante Quadrat des Viererimpulses eines Punktteilchens proportional zum Quadrat seiner Ruhemasse m ist. Für ein ruhendes Teilchen mit $\mathbf{p} = 0$ ist (6.35) die berühmte Einsteinsche Formel $E = mc^2$. Vermittels der Korrespondenzregel (6.34) ergibt sich aus der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung dann der Klein-Gordon-Operator (besser wäre Schrödinger-Operator)

$$(p, p) = -\hbar^2 g^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu = -\hbar^2 \square = m^2 c^2 \quad (6.36)$$

und die entsprechende kovariante Wellengleichung

$$\left(\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \phi \equiv (\square + \mu^2) \phi = 0, \quad (6.37)$$

ist die freie *Klein-Gordon-Gleichung*. Hier ist $\square = \partial_0^2 - \Delta$ 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,

$$\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \sum_\alpha \frac{\partial x'^\alpha}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x'^\alpha} = \sum_\alpha \Lambda_\mu^\alpha \frac{\partial}{\partial x'^\alpha} \equiv \partial'_\alpha \Lambda_\mu^\alpha \quad (6.38)$$

und deshalb der Wellenoperator sich beim Übergang zwischen Inertialsystemen nicht ändert,

$$\square = \partial_\mu \partial_\nu g^{\mu\nu} = \partial'_\alpha \partial'_\beta \Lambda_\mu^\alpha \Lambda_\nu^\beta g^{\mu\nu} = \partial'_\alpha \partial'_\beta g^{\alpha\beta} = \square'. \quad (6.39)$$

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 Schrödingerschen Theorie erfüllen die positive Dichte $\rho = \psi^\dagger \psi$ und die Stromdichte $\mathbf{j} \sim \Im(\bar{\psi} \nabla \psi)$ eine Kontinuitätsgleichung. Es folgt die zeitliche Konstanz der integrierten Dichte 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 ϕ^\dagger die Klein-Gordon-Gleichung erfüllt, so dass

$$\phi^\dagger \square \phi - \phi \square \phi^\dagger \stackrel{(6.37)}{=} -\mu^2 (\phi^\dagger \phi - \phi \phi^\dagger) = 0$$

gilt, oder, da die linke Seite eine 4-er Divergenz ist,

$$\partial_\mu (\phi^\dagger \partial^\mu \phi - \phi \partial^\mu \phi^\dagger) = 0.$$

Deshalb gehört zu jeder Lösung der Klein-Gordon-Gleichung eine kovariant erhaltene 4-er *Stromdichte*

$$\partial_\mu j^\mu = 0, \quad j^\mu = \frac{i\hbar}{2m} (\phi^\dagger \partial^\mu \phi - \phi \partial^\mu \phi^\dagger). \quad (6.40)$$

Dieser ist der zur Invarianz der Klein-Gordon Gleichung unter Phasentransformationen der Wellenfunktion gehörende Noetherstrom. Wegen

$$\partial_0 \int j^0 d^3x = - \int \operatorname{div} \mathbf{j} = - \oint \mathbf{n} \cdot \mathbf{j},$$

wobei wir den Gaussischen Satz benutzten, verschwindet die linke Seite für einen im räumlich Unendlichen verschwindenden Strom \mathbf{j} . Deshalb ist

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d^3x \rho = 0, \quad \text{wobei} \quad \rho = \frac{1}{c} j^0 = \frac{i\hbar}{2mc^2} (\phi^\dagger \partial_t \phi - \phi \partial_t \phi^\dagger), \quad (6.41)$$

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 $\phi(t, \mathbf{x})$ 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 Lösungen mit positiver und negativer Energie

Für ein freies Teilchen in Ruhe ist $p^\mu = (mc, \mathbf{0}) = (\hbar\mu, \mathbf{0})$, und die Lösungen der Klein-Gordon-Gleichung

$$\partial_0^2 \phi = \frac{1}{c^2} \partial_t^2 \phi = -\mu^2 \phi \quad (6.42)$$

lauten $\exp(\pm i\mu ct)$. Wegen der Korrespondenzregel $E \rightarrow i\hbar\partial_t$ sind die Lösungen mit *positiver Energie*

$$\phi = e^{-i\mu ct}.$$

Nun transformieren wir auf ein Inertialsystem, welches sich relativ zum ruhenden Teilchen mit $-\mathbf{v}$ bewegt. In diesem System hat das Teilchen die Geschwindigkeit \mathbf{v} und den 4-er Impuls

$$(p'^\mu) = (E'/c, \mathbf{p}') = \gamma m (c, \mathbf{v}), \quad (6.43)$$

so dass im neuen System die Wellenfunktion folgendermaßen aussieht

$$\phi'(x') = \phi(x) = e^{-i\mu ct} = e^{-i(p,x)/\hbar} = e^{-i(p',x')/\hbar}.$$

Also hat die Wellenfunktion eines Teilchens mit Geschwindigkeit \mathbf{v} und positiver Energie E die Form

$$\phi = e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - Et)/\hbar}. \quad (6.44)$$

Der zu dieser Lösung gehörende erhaltene 4-er Strom lautet

$$\rho = \frac{E}{mc^2} \quad \text{und} \quad \mathbf{j} = \frac{\mathbf{p}}{m} = \rho\mathbf{v}.$$

Daher ist die (3-er)Stromdichte gleich der Dichte mal der Geschwindigkeit. Ein ruhendes Teilchen mit *negativer Energie* hat die Wellenfunktion

$$\phi = e^{i\mu ct}$$

mit zugehöriger Dichte $\rho = -1$. Nach einer Lorentz-Transformation führt dies zu der Wellenfunktion

$$\phi = e^{-i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - |E|t)/\hbar} \quad \text{mit} \quad |E| = +\sqrt{m^2c^4 + c^2\mathbf{p}^2}. \quad (6.45)$$

Wie man leicht nachrechnet ist der zu dieser Lösung gehörende erhaltene 4-er Strom

$$\rho = -\frac{|E|}{mc^2} \quad \text{und} \quad \mathbf{j} = -\frac{\mathbf{p}}{m} = \rho\mathbf{v}$$

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 $(e\rho, e\mathbf{j})$ 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

$$E \longrightarrow E - e\phi \quad \text{und} \quad \mathbf{p} \longrightarrow \boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \quad (6.46)$$

in der Hamiltonfunktion des freien Teilchens auf diejenige des geladenen Teilchens führt, deren kanonische Gleichungen gerade die Lorentzschen Bewegungsgleichungen sind. Die entsprechenden Korrespondenzregeln

$$E \longrightarrow i\hbar\partial_t - e\phi \quad \text{und} \quad \mathbf{p} \longrightarrow \frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \quad (6.47)$$

ergeben die Schrödingergleichung für geladene Teilchen in elektromagnetischen Feldern.

In der relativistischen Formulierung werden das skalare und vektorielle Potential zu einem 4-er *Eichpotential* zusammengefasst:

$$\begin{aligned} (A^\mu) &= (A^0, A^1, A^2, A^3) = (\phi, \mathbf{A}) \\ (A_\mu) &= (A_0, A_1, A_2, A_3) = (\phi, -\mathbf{A}). \end{aligned} \quad (6.48)$$

Mit diesem 4-er Vektorpotential lauten die kovariant geschriebenen Ersetzungs- und Korrespondenzregeln

$$p_\mu \longrightarrow p_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \longrightarrow i\hbar \left(\partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c} A_\mu \right). \quad (6.49)$$

Hier erscheinen auf der rechten Seite die *kovariante Ableitungen*

$$D_\mu = \partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c} A_\mu \quad (6.50)$$

die in relativistisch kovarianten *Eichtheorien* eine wichtige Rolle spielen. Diese sind in der Tat eichkovariant, da sie unter Eichtransformationen $A_\mu \rightarrow A'_\mu = A_\mu - \partial_\mu \lambda$ kovariant transformieren:

$$\begin{aligned} D_\mu(A') &= \partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c} A'_\mu = e^{ie\lambda/\hbar c} \left(\partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c} A_\mu \right) e^{-ie\lambda/\hbar c} \\ &= e^{ie\lambda/\hbar c} D_\mu(A) e^{-ie\lambda/\hbar c}. \end{aligned} \quad (6.51)$$

Der Kommutator zweier kovarianten Ableitungen lautet

$$[D_\mu, D_\nu] = \frac{ie}{\hbar c} (\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) \equiv \frac{ie}{\hbar c} F_{\mu\nu}, \quad (6.52)$$

und ist damit proportional zum eichinvarianten antisymmetrischen *Feldstärketensor*

$$F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & E_1 & E_2 & E_3 \\ -E_1 & 0 & -B_3 & B_2 \\ -E_2 & B_3 & 0 & -B_1 \\ -E_3 & -B_2 & B_1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.53)$$

Die Umkehrung von (6.53) lautet

$$\begin{aligned} E_i &= F_{0i} = \partial_0 A_i - \partial_i A_0 \iff \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \partial_t \mathbf{A} - \nabla \phi \\ B_i &= -\frac{1}{2} \epsilon_{ijk} F_{jk} = -\epsilon_{ijk} \partial_j A_k \iff \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \end{aligned} \quad (6.54)$$

Um die relativistische Wellengleichung für geladene spinlose Teilchen in einem elektromagnetischen Feld aufzustellen, müssen wir in der Gleichung oberhalb (6.37) nur die gewöhnlichen Ableitungen durch kovariante ersetzen. Dies führt dann auf die Klein-Gordon-Gleichung

$$(D_\mu D^\mu + \mu^2) \phi = \left(g^{\mu\nu} D_\mu D_\nu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \phi = 0. \quad (6.55)$$

Wegen der Kovarianzeigenschaft (6.51) von D_μ unter Eichtransformationen folgt sofort, dass, falls ϕ die Klein-Gordon-Gleichung im Potential A_μ löst, die eichtransformierte Wellenfunktion

$$\phi'(x) = e^{ie\lambda(x)/\hbar c} \phi(x) \quad (6.56)$$

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 $-e$:

$$(D^2(e) + \mu^2) \phi = 0 \implies (D^2(-e) + \mu^2) \phi^\dagger = 0 \quad (6.57)$$

da $D_\mu^*(e) = D_\mu(-e)$ ist.

Übungsaufgabe: Zeige, dass der 4-er Strom

$$j^\mu = \frac{i\hbar}{2m} (\phi^\dagger D^\mu \phi - \phi \bar{D}^\mu \phi^\dagger)$$

erhalten ist, $\partial_\mu j^\mu = 0$. Benutze beim Beweis die Klein-Gordon-Gleichungen (6.55) und (6.57).

Ausgeschrieben lauten die Ladungs- und Ladungsstromdichte

$$\begin{aligned}\rho &= \frac{i\hbar}{2mc^2} \left(\phi^\dagger \left(\partial_t + \frac{ie}{\hbar} A_0 \right) \phi - \phi \left(\partial_t - \frac{ie}{\hbar} A_0 \right) \phi^\dagger \right) \\ \mathbf{j} &= \frac{\hbar}{2im} \left(\phi^\dagger \left(\nabla - \frac{ie}{\hbar c} \mathbf{A} \right) \phi - \phi \left(\nabla + \frac{ie}{\hbar c} \mathbf{A} \right) \phi^\dagger \right).\end{aligned}\quad (6.58)$$

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 ϕ^\dagger die Klein-Gordon-Gleichung mit Ladung $-e$ und derselben Masse löst. Nun ist aber ein skalares 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 Skarteilchen 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

$$\phi(x) \longrightarrow \phi_c(x) = \phi^\dagger(x). \quad (6.59)$$

Speziell für eine ebene Welle

$$\phi = e^{i(\mathbf{p}\mathbf{x} - Et)/\hbar} \longrightarrow \phi_c = e^{-i(\mathbf{p}\mathbf{x} - Et)/\hbar}.$$

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 Ladungskonjugation das Vorzeichen um

$$j_c^\mu = -j^\mu. \quad (6.60)$$

Falls ρ nicht zu Null integriert, können wir die Lösungen so normieren, dass der Zustand die Ladung e oder $-e$ hat:

$$Q = e \int d^3x \rho(t, \mathbf{x}) = \pm e.$$

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 werden die gebundenen Energie-Eigenzustände bestimmen. In einem statischen Potential ist die Energie E erhalten und der entsprechende Zustand mit positiver Energie hat die Form

$$\phi(t, \mathbf{x}) = e^{-iEt/\hbar} \phi(\mathbf{x}). \quad (6.61)$$

Die Ladungsdichte

$$e\rho = \frac{e}{mc^2} (E - eA_0(\mathbf{x})) |\phi(\mathbf{x})|^2 \quad (6.62)$$

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

$$eA_0 = -\frac{Ze^2}{r} \quad \text{und} \quad A_i = 0 \quad (6.63)$$

mit $r = |\mathbf{x}|$ und die entsprechende Klein-Gordon-Gleichung lautet

$$(D_0^2 - \Delta + \mu^2) \phi(t, \mathbf{x}) = 0.$$

Sie kann relativ schnell gelöst werden. Setzen wir (6.61) ein, so finden wir

$$\left(E + \frac{Ze^2}{r} \right)^2 \phi(\mathbf{x}) + \hbar^2 c^2 \Delta \phi(\mathbf{x}) - m^2 c^4 \phi(\mathbf{x}) = 0. \quad (6.64)$$

Der Differentialoperator kommutiert mit \mathbf{L}^2 und mit L_3 und die Lösungen dürfen folgendermaßen angesetzt werden:

$$\phi(\mathbf{x}) = f_{nl}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi).$$

Wegen $r^2 \Delta = r \partial_r^2 r - \mathbf{L}^2$ lautet die radiale Klein-Gordon-Gleichung für die Funktion f_{nl}

$$\left(\frac{E^2}{c^2} - m^2 c^2 \right) f_{nl} + \hbar^2 \left(\frac{1}{r} \partial_r^2 r - \frac{\ell(\ell+1) - (Z\alpha)^2}{r^2} \right) f_{nl} + \frac{2Ze^2 E}{r} \frac{1}{c^2} f_{nl} = 0,$$

wobei wir die dimensionslose Sommerfeldsche *Feinstrukturkonstante* $\alpha = e^2/\hbar c$ benutzen.

Wir verschieben nun Drehimpuls, Masse und Energie gemäß

$$\ell'(\ell' + 1) = \ell(\ell + 1) - (Z\alpha)^2, \quad m' = E/c^2 \quad \text{und} \quad 2m'E' = \frac{E^2}{c^2} - m^2c^2.$$

Mit diesen neuen Parametern schreibt sich die radiale Gleichung folgendermaßen:

$$\left(2m'E' + \frac{\hbar^2}{r} \partial_r^2 r - \hbar^2 \frac{\ell'(\ell' + 1)}{r^2} + \frac{2m'Ze^2}{r} \right) f = 0.$$

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

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + (Z\alpha/n')^2}}, \quad (6.65)$$

mit

$$n' = \ell' + 1 + \nu, \quad \nu = 0, 1, 2, \dots \quad \text{und} \quad \ell' = -\frac{1}{2} + \sqrt{(\ell + \frac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2}.$$

Die ℓ' und die Energien sind nur reell für

$$(\ell + \frac{1}{2})^2 > (Z\alpha)^2 \iff Z < \frac{1}{2\alpha} \sim \frac{137}{2}. \quad (6.66)$$

Um die Verwandtschaft zum Wasserstoffspektrum zu illustrieren schreiben wir n' um

$$\begin{aligned} n' &= \underbrace{(\nu + \ell + 1)}_{\equiv n} - (\ell + \frac{1}{2}) + \sqrt{(\ell + \frac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2} \\ &= n - (\ell + \frac{1}{2}) + \sqrt{\dots}, \quad n = \ell + 1, \ell + 2, \dots \end{aligned}$$

Offensichtlich spielt n dieselbe Rolle wie die Hauptquantenzahl beim nicht-relativistischen Wasserstoffatom. Entwickeln wir in Potenzen der Feinstrukturkonstanten, so finden wir

$$E_{n\ell} \sim mc^2 - \frac{Z^2e^2}{2an^2} \left(1 + \frac{Z^2\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{\ell + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right). \quad (6.67)$$

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 elektro-

magnetischen Bindungsenergie des $1s$ -Zustandes im pionischen Wasserstoffatom [10]:

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

Kapitel 7

Das Diracsche Elektron

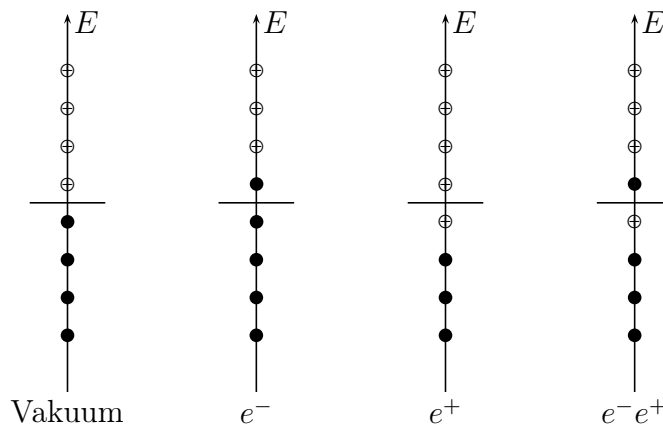
*If one is working from the point of view of getting beauty into one's equation,
... one is on a sure line of progress.*

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 DIRAC¹ mehr durch die Unverträglichkeit von Wellengleichungen mit zweiter Zeitableitung und seiner in diesen Jahren entwickelten Transformationstheorie irritiert [9]. 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 ist nicht mehr erhalten. Deshalb ist Diracs Elektronentheorie natürlicherweise eine *Mehrteilchentheorie* und keine Einteilchentheorie.

¹Siehe <http://www-groups.dcs.st-and.ac.uk/history/Mathematicians/Dirac.html> für den Lebenslauf von PAUL ADRIAN MAURICE DIRAC.



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

$$\psi : M \ni x \longrightarrow \psi(x) \in \mathbb{C}^n \quad (7.1)$$

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

$$((\gamma, p) - mc)\psi = 0 \quad \text{mit} \quad (\gamma, p) = \gamma^\mu p_\mu \equiv \not{p} \quad \text{und} \quad \gamma^\mu \in \mathcal{L}(\mathbb{C}^n). \quad (7.2)$$

Wir benutzen die Einsteinsche Summenkonvention und $p_\mu = i\hbar\partial_\mu$. Man schreibt für $\gamma^\mu a_\mu$ meistens \not{a} (a-slash). Die Wellengleichung soll kovariant sein und weiterhin die relativisti-

sche Energie-Impuls Relation

$$((p, p) - m^2 c^2) \psi = 0 \quad (7.3)$$

nach sich ziehen. Man rechnet

$$(\not{p} + mc)(\not{p} - mc) \psi = (\not{p}\not{p} - m^2 c^2) \psi = 0$$

und schließt, dass

$$\not{p}\not{p} = \gamma^\mu \gamma^\nu p_\mu p_\nu = \frac{1}{2}(\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu) p_\mu p_\nu \stackrel{!}{=} g^{\mu\nu} p_\mu p_\nu \mathbb{1}$$

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:

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} \mathbb{1}. \quad (7.4)$$

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 (7.4) 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 (7.4), 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

$$\tilde{\gamma}^\mu = U \gamma^\mu U^{-1} \quad (7.5)$$

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

$$\hat{\gamma}^\mu = \begin{pmatrix} \gamma^\mu & 0 \\ 0 & \gamma^\mu \end{pmatrix} \quad (7.6)$$

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 (7.6). 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

$$\pm \mathbb{1}, \pm \gamma^\mu, \pm \gamma^{\mu_1} \gamma^{\mu_2}, \pm \gamma^{\mu_1} \gamma^{\mu_2} \gamma^{\mu_3}, \pm \gamma^{\mu_1} \gamma^{\mu_2} \gamma^{\mu_3} \gamma^{\mu_4},$$

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

$$\frac{1}{\dim G} \sum_{a \in G} \text{tr } A(a) \text{tr } A^\dagger(a) = 1$$

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

$$\begin{aligned} \gamma^0 &= \sigma_1 \otimes \sigma_0 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_0 \\ \sigma_0 & 0 \end{pmatrix} \\ \gamma^k &= -i\sigma_2 \otimes \sigma_k = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (7.7)$$

Hier sind

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (7.8)$$

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

$$\sigma_\mu = \tilde{\sigma}^\mu = \{\sigma_0, \sigma_k\} \quad \text{bzw.} \quad \sigma^\mu = \tilde{\sigma}_\mu = \{\sigma_0, -\sigma_k\}$$

einzuführen. Offensichtlich ist γ^0 hermitesch und $\gamma^1, \gamma^2, \gamma^3$ antihermitesch. Weiterhin ist

$$\not{p} \equiv \gamma^\mu p_\mu = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^\mu p_\mu \\ \tilde{\sigma}^\mu p_\mu & 0 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 0 & (\sigma, p) \\ (\tilde{\sigma}, p) & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.9)$$

Benutzt man die bekannte Relation $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \sigma_0 + i \epsilon_{ijk} \sigma_k$, dann findet man leicht

$$(\sigma, a) \cdot (\sigma, b) = \sigma_0 (a^0 b^0 + \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) + \boldsymbol{\sigma} \cdot (a^0 \mathbf{b} + \mathbf{a} b^0 + i \mathbf{a} \wedge \mathbf{b}) \quad (7.10)$$

und insbesondere

$$(\sigma, a) \cdot (\tilde{\sigma}, a) = \sigma_0 (a^0 a^0 - \mathbf{a} \cdot \mathbf{a}) = \sigma_0 (a, a). \quad (7.11)$$

Ausgeschrieben hat (σ, a) die Form

$$(\sigma, a) = \begin{pmatrix} a^0 + a^3 & a^1 - i a^2 \\ a^1 + i a^2 & a^0 - a^3 \end{pmatrix}, \quad \text{so dass} \quad \det(\sigma, a) = \det(\tilde{\sigma}, a) = (a, a) \quad (7.12)$$

gilt. Falls also $\det(\sigma, a) = 1$ ist, gilt wegen (7.11)

$$(\tilde{\sigma}, a) = (\sigma, a)^{-1}. \quad (7.13)$$

Nach diesen Ausführungen kehren wir zur Dirac-Gleichung zurück und zerlegen den Dirac-Spinor in zwei 2-er Spinoren:

$$\psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (7.14)$$

Die Felder ϕ und χ heissen *2-Spinorfeld* und *2-Antispinorfeld*. Mit diesen 2-komponentigen Feldern schreibt sich die Dirac-Gleichung wie folgt,

$$(\gamma, p)\psi = \begin{pmatrix} 0 & (\sigma, p) \\ (\tilde{\sigma}, p) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\sigma, p)\chi \\ (\tilde{\sigma}, p)\phi \end{pmatrix} = mc \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}.$$

Die Dirac-Gleichung zerfällt in 2 gekoppelte Systeme für das Spinor- und Antispinorfeld,

$$\begin{aligned} (\sigma, p)\chi &= mc\phi \\ (\tilde{\sigma}, p)\phi &= mc\chi. \end{aligned} \quad (7.15)$$

Beide Felder erfüllen wegen (7.3) die Klein-Gordon-Gleichung

$$(p, p)\chi = m^2 c^2 \chi \quad \text{und} \quad (p, p)\phi = m^2 c^2 \phi.$$

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 ersetzen wir die klassische Drehgruppe $SO(3)$ durch die quantenmechanische Drehgruppe $SU(2)$. Analog konstruieren wir nun die zweifache Überlagerung $SL(2, \mathbb{C})$ der Lorentzgruppe. Spinorfelder transformieren nach Darstellungen der $SL(2, \mathbb{C})$ 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

$$A(\sigma, \xi)A^\dagger = (\sigma, \eta) = (\sigma, \Lambda(A)\xi), \quad (7.16)$$

wobei wir in der letzten Gleichung benutzten, dass η linear von ξ abhängt. Wegen

$$\begin{aligned} (\sigma, \Lambda(A_1 A_2)\xi) &= A_1 A_2(\sigma, \xi)(A_1 A_2)^\dagger = A_1 A_2(\sigma, \xi)A_2^\dagger A_1^\dagger \\ &= A_1(\sigma, \Lambda(A_2)\xi)A_1^\dagger = (\sigma, \Lambda(A_1)\Lambda(A_2)\xi) \end{aligned}$$

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 *speziellen linearen Gruppe* liegen,

$$SL(2, \mathbb{C}) = \{A \in GL(2, \mathbb{C}) \mid \det A = 1\}.$$

Die Liegruppe $SL(2, \mathbb{C})$ hängt wie die Lorentzgruppe von 6 reellen Parametern ab. Wegen

$$(\xi, \xi) = \det(\sigma, \xi) \stackrel{\det A=1}{=} \det A(\sigma, \xi)A^\dagger \stackrel{(7.16)}{=} \det(\sigma, \Lambda(A)\xi) = (\Lambda(A)\xi, \Lambda(A)\xi)$$

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

$$\Lambda(SL(2, \mathbb{C})) = L_+^\uparrow \quad (7.17)$$

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 ,

$$L_+^\uparrow = SL(2, \mathbb{C})/\mathbb{Z}_2. \quad (7.18)$$

Bilden wir nun die Spur von (7.16) für ein unitäres $A = U \in SU(2)$, so folgt

$$\text{Sp } U(\sigma, \xi)U^\dagger = \text{Sp } (\sigma, \xi) = 2\xi^0 = \text{Sp } (\sigma, \Lambda(U)\xi) = 2(\Lambda(U)\xi)^0.$$

Also ist $\Lambda(U)$ eine Lorentz-Transformation ohne Zeitdilatation und deshalb eine reine Drehung im Raum:

$$\Lambda(U) = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & R(U) \end{pmatrix}, \quad \text{mit } R(U) \in SO(3). \quad (7.19)$$

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 heißt $SL(2, \mathbb{C})$ auch *quantenmechanische Lorentzgruppe*.

Lorentztransformationen: Nun müssen wir Transformationen der 2-er Spinoren finden,

$$(\phi, \chi) \longrightarrow (\phi', \chi'),$$

so dass die Dirac-Gleichung unter Poincare-Transformationen

$$x' = \Lambda(A)x + a \quad \text{und} \quad p' = \Lambda(A)p \quad (7.20)$$

kovariant ist. In anderen Worten, falls die Weyl-Spinoren (ϕ, χ) die Dirac-Gleichung im Inertialsystem mit Koordinaten (x^μ) erfüllen, sollten die transformierten Spinoren (ϕ', χ') die Dirac-Gleichung im Inertialsystem mit Koordinaten (x'^μ) erfüllen. Wir müssen also nachprüfen, ob Lösungen von (7.15) zu Lösungen von

$$\begin{aligned} (\sigma, p')\chi' &\stackrel{?}{=} (\sigma, \Lambda(A)p)\chi' = A(\sigma, p)A^\dagger\chi' \stackrel{!}{=} mc\phi' \\ (\tilde{\sigma}, p')\phi' &\stackrel{?}{=} (\tilde{\sigma}, \Lambda(A)p)\phi' = A^{\dagger-1}(\tilde{\sigma}, p)A^{-1}\phi' \stackrel{!}{=} mc\chi'. \end{aligned} \quad (7.21)$$

Anlass geben. Man sieht leicht, daß dies für die Transformationen

$$\phi'(x') = A\phi(x) \quad \text{und} \quad \chi'(x') = A^{\dagger-1}\chi(x) \quad (7.22)$$

gilt. Die Dirac-Gleichung im gestrichenen Inertialsystem ist erfüllt, falls sie im ursprünglichen Inertialsystem erfüllt war. Dies beweist, dass unter (7.22) Lösungen im Inertialsystem I in Lösungen im Inertialsystem I' übergehen, falls die beiden Systeme durch eine ortho-

chone eigentliche Lorentz-Transformation verbunden werden können.

Raumpiegelung: Um zu sehen, wie Spinoren unter der Raumpiegelung

$$x' = Px \quad , \quad p' = Pp, \quad \text{mit} \quad P = G \quad (7.23)$$

transformieren, bemerken wir zuerst, dass $(\sigma, p') = (\tilde{\sigma}, p)$ und $(\tilde{\sigma}, p') = (\sigma, p)$ gilt. Wenn wir nun die Spinoren gemäß

$$\phi'(x') = \chi(x) \quad \text{und} \quad \chi'(x') = \phi(x) \quad (7.24)$$

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 Raumpiegelungen 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 (7.19) ein Spezialfall von (7.22). Für unitäre $A = U$ ist nämlich $\Lambda(U)$ eine Drehung im Raum. Mit $A^\dagger = U^\dagger = U^{-1}$ findet man

$$\phi'(t, R\mathbf{x}) = U\phi(t, \mathbf{x}) \quad \text{und} \quad \chi'(t, R\mathbf{x}) = U\chi(t, \mathbf{x}), \quad (7.25)$$

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 bei der Raumpiegelung das 2-Spinorfeld und das 2-Antispinorfeld vertauscht werden. Deshalb liegt die Wurzel der Einführung zweier Felder in der besonderen Rolle den die Raumpiegelung in der Lorentzgruppe spielt. 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 Neutrino²) offensichtlich auch L_+^\uparrow -kovariante Feldgleichungen formulieren, zum Beispiel

$$(\sigma, p)\chi = 0, \quad (7.26)$$

wobei χ wie ein 2-Antispinorfeld transformiert. Die Gleichung (7.26) für das Neutrino ist die bekannte Weyl-Gleichung. Die entsprechende L_+^\uparrow -kovariante freie Weyl-Gleichung für

²Es gibt inzwischen allerdings gute Evidenz, dass Neutrinos massiv sind.

das Spinorfeld lautet

$$(\tilde{\sigma}, p)\phi = 0. \quad (7.27)$$

7.3.1 Transformationsgesetz für ψ

Unter den Elementen der orthochronen eigentlichen Lorentzgruppe iL_+^\uparrow transformiert der Diracspinor gemäß

$$\psi'(x') = \begin{pmatrix} \phi'(x') \\ \chi'(x') \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & A^{\dagger-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi(x) \\ \chi(x) \end{pmatrix} \equiv S(A)\psi(x), \quad (7.28)$$

und unter Raumspiegelungen

$$\psi'(x') = \begin{pmatrix} \phi'(x') \\ \chi'(x') \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_0 \\ \sigma_0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi(x) \\ \chi(x) \end{pmatrix} = \gamma^0\psi(x) \equiv S(P)\psi(x). \quad (7.29)$$

Unter Benutzung der expliziten Form von $S(A)$ und (7.16) findet man nun leicht

$$S(A)(\gamma, p)S^{-1}(A) = (\gamma, \Lambda(A)p) = (\Lambda^{-1}(A)\gamma, p)$$

was äquivalent zur wichtigen Formel

$$S^{-1}(A)\gamma^\mu S(A) = \Lambda^\mu_\nu \gamma^\nu \quad (7.30)$$

ist. Weiterhin gelten

$$S^{-1}(P)\gamma^0 S(P) = \gamma^0 \quad \text{und} \quad S^{-1}(P)\gamma^i S(P) = \gamma^0 \gamma^i \gamma^0 = -\gamma^i,$$

beziehungsweise

$$S^{-1}(P)\gamma S(P) = P\gamma. \quad (7.31)$$

Später benötigen wir noch die adjungierte S^\dagger der Spinortransformation S . Es gilt

$$\gamma^0 S^\dagger \gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_0 \\ \sigma_0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^\dagger & 0 \\ 0 & A^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_0 \\ \sigma_0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^{-1} & 0 \\ 0 & A^\dagger \end{pmatrix}$$

was wie folgt geschrieben werden kann,

$$\gamma^0 S^\dagger \gamma^0 = S^{-1}. \quad (7.32)$$

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 ψ^\dagger

und $\bar{\psi}$ einreihige Objekte. Es gilt

$$\bar{\psi}'(x') = (S\psi(x))^\dagger \gamma^0 = \psi^\dagger(x) S^\dagger \gamma^0 = \psi^\dagger(x) \gamma^0 S^{-1} = \bar{\psi}(x) S^{-1},$$

wobei wir (7.32) benutzten. Also gelten die Transformationsformeln

$$\psi'(x') = S(A)\psi(x) \quad \text{und} \quad \bar{\psi}'(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1}(A) \quad (7.33)$$

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 $\gamma_5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$ und diese Matrix hat in der chiralen Darstellung folgende Form

$$\gamma_5 = \sigma_3 \otimes \sigma_0 = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sigma_0 \end{pmatrix}, \quad \{\gamma_5, \gamma^\mu\} = 0. \quad (7.34)$$

Insbesondere gelten

$$\gamma_5^\dagger = \gamma_5, \quad (\gamma_5)^2 = \mathbb{1} \quad \text{und} \quad S^{-1}(P)\gamma_5 S(P) = -\gamma_5. \quad (7.35)$$

Es folgt dann, dass

$$P_+ = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \gamma_5) \quad \text{und} \quad P_- = \frac{1}{2}(\mathbb{1} - \gamma_5) \quad \text{mit} \quad P_+ + P_- = \mathbb{1} \quad (7.36)$$

orthogonale Projektoren sind,

$$P_\pm^2 = P_\pm, \quad P_\pm^\dagger = P_\pm \quad \text{und} \quad P_+P_- = P_-P_+ = 0. \quad (7.37)$$

Aus der expliziten Form von γ_5 in der HE-Darstellung (7.34), sieht man sofort, dass

$$P_+\psi = \begin{pmatrix} \phi \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad P_-\psi = \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix} \quad (7.38)$$

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

$$j'^\mu(x') = \bar{\psi}'(x')\gamma^\mu\psi'(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1}(A)\gamma^\mu S(A)\psi(x).$$

Wegen (7.30) erhalten wir also

$$j'^{\mu}(x') = \Lambda^{\mu}_{\nu} j^{\nu}(x) \quad (7.39)$$

und j^{μ} transformiert unter eigentlichen Lorentz-Transformationen wie ein Vektorfeld. Unter Raumspiegelungen transformiert es wie

$$j'^{\mu}(x') = \bar{\psi}(x) S^{-1}(P) \gamma^{\mu} S(P) \psi(x) = (Pj)^{\mu}(x). \quad (7.40)$$

Also ist $j^{\mu}(x)$ ein Vektorfeld unter L^{\uparrow} . Analog beweist man, dass die folgenden 16 Felder (Pseudo)Tensoren sind:

$S(x) = \bar{\psi}(x)\psi(x)$	Skalarfeld	1
$j^{\mu}(x) = \bar{\psi}(x)\gamma^{\mu}\psi(x)$	Vektorfeld (Strom)	4
$T^{\mu\nu}(x) = \bar{\psi}(x)[\gamma^{\mu}, \gamma^{\nu}]\psi(x)$	antisymm. Tensorfeld	6
$A^{\mu}(x) = \bar{\psi}(x)\gamma_5\gamma^{\mu}\psi(x)$	Pseudovektorfeld (Axialstrom)	4
$P(x) = \bar{\psi}(x)\gamma_5\psi(x)$	Pseudoskalarfeld	1

Zum Beispiel transformiert das Tensorfeld unter Lorentz-Transformationen gemäß

$$T'^{\mu\nu}(x') = \Lambda^{\mu}_{\alpha} \Lambda^{\nu}_{\beta} T^{\alpha\beta}(x).$$

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

$$\psi_p = \frac{1}{\sqrt{2\omega(\mathbf{k})}} e^{-ikx} u_p \quad (7.41)$$

beschrieben. Der Index p bezeichnet den 4-er Impuls $p = \hbar k$ und

$$\omega(\mathbf{k}) = +\sqrt{\mathbf{k}^2 + \mu^2}$$

ist die Kreisfrequenz der Lösung. Das Spinorfeld $\psi_p(x)$ löst die freie Dirac-Gleichung falls der konstante Spinor u_p der algebraischen Gleichung

$$(\not{k} - \mu)u_p = 0 \quad (7.42)$$

genügt. Für $p_0c = \hbar\omega$ beschreibt ψ_p eine Lösung mit positiver Energie und für $p_0c = -\hbar\omega$ mit negativer Energie. Wir normieren die konstanten Spinoren nach der invarianten Vorschrift

$$\bar{u}_p u_p = 2\mu \operatorname{sign}(p_0). \quad (7.43)$$

Die Multiplikation von (7.42) mit \bar{u}_p ergibt

$$\bar{u}_p \not{k} u_p = \mu \bar{u}_p u_p = 2\mu^2 = 2k^2, \quad \text{so dass} \quad \bar{u}_p \gamma^\mu u_p = 2k^\mu$$

gilt. Der 4-Vektor für die Stromdichte ist

$$j^\mu = \bar{\psi}_p \gamma^\mu \psi_p = \frac{1}{2\omega} \bar{u}_p \gamma^\mu u_p = \frac{k^\mu}{\omega}. \quad (7.44)$$

Für eine Lösung mit positiver Energie ist $j = (1, \mathbf{v})$ wenn \mathbf{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 $A_\mu = (\phi, -\mathbf{A})$, ergibt sich durch Ersetzen der gewöhnlichen durch die kovariante Ableitung

$$\partial_\mu \longrightarrow D_\mu = \partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c} A_\mu, \quad (7.45)$$

so dass in Anwesenheit von elektromagnetischen Feldern die Dirac-Gleichung folgendermaßen aussieht:

$$\left(i\not{D} - \frac{mc}{\hbar} \right) \psi = 0 \quad , \quad \not{D} = \gamma^\mu D_\mu. \quad (7.46)$$

Wie wir früher gesehen haben, transformiert die kovariante Ableitung, und damit der Diracoperator \not{D} , kovariant unter Eichtransformationen

$$\not{D}_{A'} = e^{ie\lambda/\hbar c} \not{D}_A e^{-ie\lambda/\hbar c}, \quad \text{wobei} \quad A'_\mu = A_\mu - \partial_\mu \lambda$$

ist. Falls also ψ die Dirac-Gleichung im Potential A löst, so löst $\psi' = e^{ie\lambda/\hbar c} \psi$ die Dirac-Gleichung im eichtransformierten Potential A' . Offensichtlich ist die lokale Feldtransformation

$$(A, \psi) \longrightarrow (A', \psi')$$

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

$$j^\mu(x) = \bar{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x) \quad , \quad \partial_\mu j^\mu = 0.$$

Übungsaufgabe: Man beweise explizit, unter Zuhilfenahme der Dirac-Gleichung und der daraus folgenden Dirac-Gleichung für den konjugierten Spinor,

$$i \left(\partial_\mu - \frac{ie}{\hbar c} A_\mu \right) \bar{\psi} \gamma^\mu + \frac{mc}{\hbar} \bar{\psi} = 0,$$

dass die elektromagnetische Stromdichte erhalten ist.

7.5 Hamiltonscher Formalismus

Wir wollen die Dirac-Gleichung (7.46) in eine Hamiltonsche Form mit einem hermiteschen Hamilton-Operator bringen. Dazu multiplizieren wir die Gleichung mit γ^0 , so dass folgt

$$iD_0\psi = -i\gamma^0\gamma^j D_j\psi + \frac{mc}{\hbar}\gamma^0\psi,$$

oder durch Auflösung nach der Zeitableitung

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi \quad , \quad H = c(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\pi}) + mc^2\beta + eA_0, \quad (7.47)$$

wobei wir die Matrizen

$$\alpha_k = \gamma^0\gamma^k \quad \text{und} \quad \beta = \gamma^0 \quad (7.48)$$

definiert haben. Weiterhin ist $\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}$ mit $\mathbf{A} = -(A_i)$ 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

$$\gamma^0\gamma^{0\dagger}\gamma^0 = \gamma^0 \quad , \quad \gamma^0\gamma^{j\dagger}\gamma^0 = \gamma^j$$

gelten und damit die γ -Matrizen die Realitätsbedingungen

$$\gamma^0\gamma^{\mu\dagger}\gamma^0 = \gamma^\mu \quad (7.49)$$

erfüllen. Diese Bedingungen gelten dann in jeder (unitär äquivalenten) Darstellung:

$$\tilde{\gamma}^\mu = U\gamma^\mu U^{-1} \longrightarrow \tilde{\gamma}^0 \tilde{\gamma}^{\mu\dagger} \tilde{\gamma}^0 = U\gamma^0 U^{-1} U^{\dagger-1} \gamma^{\mu\dagger} U^\dagger U\gamma^0 U^{-1} U\gamma^\mu U^{-1} = \tilde{\gamma}^\mu.$$

Wegen der Realitätseigenschaften (7.49) gilt

$$\beta^\dagger = \beta \quad , \quad \alpha_j^\dagger = \gamma^{j\dagger} \gamma^0 = \gamma^0 \underbrace{\gamma^0 \gamma^{j\dagger} \gamma^0}_{\gamma^j} = \alpha_j$$

und die Matrizen α_j und β sind hermitesch. Damit ist der Hamilton-Operator H in (7.47) (formal) selbstadjungiert

$$H = H^\dagger. \quad (7.50)$$

Unter Benutzung der Dirac-Algebra beweist man leicht die folgenden Antikommutationsregeln

$$\{\beta, \alpha_j\} = 0 \quad , \quad \{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{ij} \quad \text{und} \quad \{\beta, \beta\} = 2.$$

Die zweite Identität beweist man zum Beispiel folgendermaßen:

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = \gamma^0 \gamma^i \gamma^0 \gamma^j + \gamma^0 \gamma^j \gamma^0 \gamma^i = -(\gamma^0)^2 \{\gamma^i, \gamma^j\} = 2\delta_{ij} \mathbb{1}.$$

Definieren wir $\alpha_4 = \beta$, so lassen sich die Realitätseigenschaften und Antikommutatoren folgendermaßen zusammenfassen:

$$\alpha_\mu^\dagger = \alpha_\mu \quad \text{und} \quad \{\alpha_\mu, \alpha_\nu\} = 2\delta_{\mu\nu}. \quad (7.51)$$

7.5.1 Kräftefreie Lösungen der Dirac-Gleichung

Hier wollen wir die Energien und Eigenfunktionen des freien Dirac-Hamilton-Operators diskutieren:

$$H\psi = E\psi \quad , \quad H = c(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{p}) + mc^2\beta \equiv \alpha_\mu \xi_\mu, \quad (7.52)$$

wobei wir $(\xi_\mu) = (cp_1, cp_2, cp_3, mc^2)^T$ eingeführt haben. Mit

$$(\alpha_\mu \xi_\mu)^2 = \xi_\mu \xi_\nu \alpha_\mu \alpha_\nu = \frac{1}{2} \xi_\mu \xi_\nu \{\alpha_\mu, \alpha_\nu\} = \sum \xi_\mu^2$$

finden wir

$$(H + E)(H - E)\psi = (\xi_\mu \xi_\mu - E^2)\psi = (c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4 - E^2)\psi = 0. \quad (7.53)$$

Da die Impulse mit dem freien Hamilton-Operator vertauschen, können wir annehmen, dass diese feste Werte haben (uneigentliche Wellenfunktionen). Die Energien sind dann

$$E = \pm c\sqrt{m^2c^2 + \mathbf{p}^2} = \pm\hbar\omega(\mathbf{p}), \quad (7.54)$$

wobei $\omega(\mathbf{p}) > 0$ die zu \mathbf{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, $H^2 = c^2\mathbf{p}^2 + m^2c^4$, 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:

$$P_{\pm}^{\omega} = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{H}{\hbar\omega} \right). \quad (7.55)$$

Aus $H^2\psi = E^2\psi$ mit $E = \hbar\omega$ folgt unmittelbar

$$HP_{\pm}^{\omega}\psi = \frac{1}{2}H \left(1 \pm \frac{H}{\hbar\omega} \right) \psi = \frac{1}{2}(H \pm \hbar\omega)\psi = \pm\frac{\hbar\omega}{2} \left(1 \pm \frac{H}{\hbar\omega} \right) \psi = \pm\hbar\omega P_{\pm}^{\omega}\psi$$

und deshalb projizieren P_{\pm}^{ω} auf die Unterräume mit positiver und negativer Energie. Wegen

$$P_{\pm}^{\omega\dagger} = P_{\pm}^{\omega}, \quad P_{+}^{\omega} + P_{-}^{\omega} = \mathbb{1} \quad \text{und} \quad P_{+}^{\omega}P_{-}^{\omega} = P_{-}^{\omega}P_{+}^{\omega} = 0$$

sind die P_{\pm}^{ω} orthogonale Projektoren. In der Dirac(Standard) Darstellung sind

$$\gamma^0 = \beta = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sigma_0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \gamma^j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ -\sigma_j & 0 \end{pmatrix}, \quad (7.56)$$

so dass $\alpha_j = \sigma_1 \otimes \sigma_j$ gilt. Deshalb haben diese orthogonalen Projektoren die explizite Form

$$P_{\pm}^{\omega} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (1 \pm mc^2/\hbar\omega)\sigma_0 & \pm c(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p})/\hbar\omega \\ \pm c(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p})/\hbar\omega & (1 \mp mc^2/\hbar\omega)\sigma_0 \end{pmatrix}. \quad (7.57)$$

Für ein Teilchen in Ruhe ist $\mathbf{p} = 0$ und $\hbar\omega_0 = mc^2$. Dann projizieren P_{\pm} auf die unteren und oberen Komponenten eines Spinors,

$$P_{+}^{\omega_0} = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad P_{-}^{\omega_0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \sigma_0 \end{pmatrix}. \quad (7.58)$$

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

$$\hbar = c = 1 \quad (7.59)$$

ist. Diese Wahl ist in der Hochenergiephysik üblich. Die korrekten Potenzen von \hbar und c im Endresultat können über eine Dimensionsanalyse wieder eindeutig reproduziert werden. In diesen sehr angenehmen Einheiten werden alle Felder, Massen und Ladungen in Potenzen einer Länge L gemessen:

$$\begin{aligned} \text{Masse:} & \quad \left[\frac{mc}{\hbar} \right] = [m] = L^{-1} \\ \text{Ladung:} & \quad \left[\frac{e^2}{\hbar c} \right] = [e^2] = L^0 \\ \text{Potential:} & \quad \left[\frac{e}{\hbar c} A_\mu \right] = [A_\mu] = L^{-1} \Rightarrow [E] = [B] = L^{-2} \\ \text{Spinor:} & \quad [Q] = L^0 \Rightarrow [j^\mu] = [\bar{\psi}\gamma^\mu\psi] = L^{-3} \Rightarrow [\psi] = L^{-3/2}. \end{aligned}$$

Nun wollen wir die Ladungskonjugation zuerst in einer Majorana-Darstellung, in welcher alle γ -Matrizen imaginär sind,

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \sigma_2 & 0 \\ 0 & \sigma_2 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} i\sigma_3 & 0 \\ 0 & i\sigma_3 \end{pmatrix}, \quad \gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & i\sigma_1 \\ i\sigma_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} i\sigma_1 & 0 \\ 0 & -i\sigma_1 \end{pmatrix} \quad (7.60)$$

und in der

$$\gamma_5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_1 \\ i\sigma_1 & 0 \end{pmatrix},$$

ist, diskutieren.

Sei nun $\hat{\psi} = \psi^{\dagger t}$ der zu ψ komplex konjugierte Spinor ($\bar{\psi}$ ist bereits belegt). Komplex konjugieren wir die Dirac-Gleichung in der Majorana-Darstellung,

$$(i\gamma^\mu(\partial_\mu + ieA_\mu) - m)\psi = 0 \xrightarrow{c.c.} (i\gamma^\mu(\partial_\mu - ieA_\mu) - m)\hat{\psi} = 0 \quad (7.61)$$

so sehen wir, dass $\hat{\psi}$ eine Lösung der Dirac-Gleichung mit umgekehrter Ladung ist, $e \rightarrow$

–e. Mit Hilfe von

$$\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0 \implies \psi^\dagger = \bar{\psi} \gamma^0 \quad \text{und} \quad \hat{\psi} = \gamma^{0T} \bar{\psi}^T = -\gamma^0 \bar{\psi}^T$$

können wir die Ladungskonjugation eines Spinors folgendermaßen schreiben

$$\psi_c = -i\hat{\psi} = C\bar{\psi}^T, \quad (7.62)$$

wobei in der Majorana-Darstellung $C = i\gamma^0$ ist. In dieser Darstellung gilt offensichtlich

$$CC^\dagger = \mathbb{1} \quad \text{und damit} \quad C^{-1} = C^\dagger, \quad C^T = -C^T. \quad (7.63)$$

In jeder unitär äquivalenten Darstellung,

$$\psi \rightarrow \tilde{\psi} = U\psi \quad , \quad \tilde{\gamma}^\mu = U\gamma^\mu U^{-1}$$

soll dann entsprechend gelten

$$\tilde{\psi}_c = \tilde{C}\tilde{\psi}^T.$$

Dies ist äquivalent zu

$$U\psi_c = \tilde{C}(U^{-1})^T \bar{\psi}^T \quad \text{oder auch zu} \quad \psi_c = U^{-1} \tilde{C}(U^{-1})^T \bar{\psi}^T = C\bar{\psi}^T.$$

Die letzte Gleichung impliziert, dass in der neuen Darstellung die C -Matrix folgende Form hat

$$\tilde{C} = UCU^T. \quad (7.64)$$

Nun folgt unmittelbar, dass die Eigenschaften (7.63) auch für die getildete C -Matrix gelten und daher darstellungsunabhängig sind. Wie man in der Majorana-Darstellung leicht nachrechnet, ist weiterhin

$$C^{-1}\gamma^\mu C = -(\gamma^\mu)^T, \quad (7.65)$$

und wiederum gilt diese Beziehung in jeder Darstellung.

Durch die Ladungskonjugation (7.62) geht eine Lösung für ein Elektron zu negativer (positiver) Energie, $\psi \sim e^{-iEt}$, in eine Lösung für ein Positron da $e \rightarrow -e$ zu positiver (negativer) Energie über. Daraus folgt insbesondere, dass $H(e)$ nach unten unbeschränkt ist, da $H(-e)$ sicher nach oben unbeschränkt ist. Dies ist die Schwierigkeit mit den negativen 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 (7.56) ist besonders geeignet zur Untersuchung des nichtrelativistischen Grenzfalls der Dirac-Gleichung in der Hamiltonschen Form (7.47). 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,

$$\psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} e^{-imc^2t}. \quad (7.66)$$

In der Dirac-Darstellung lautet der Hamilton-Operator

$$H = \begin{pmatrix} (mc^2 + eA_0)\sigma_0 & c\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} \\ c\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} & (-mc^2 + eA_0)\sigma_0 \end{pmatrix} \quad (7.67)$$

und wir erhalten die gekoppelten Wellengleichungen

$$\begin{aligned} (i\partial_t - eA_0)\phi &= c\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}\chi \\ (i\partial_t - eA_0 + 2mc^2)\chi &= c\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}\phi. \end{aligned} \quad (7.68)$$

Speziell für $\mathbf{p} = 0$ und $A_\mu = 0$ ist $\chi = 0$ und $\phi = \text{konstant}$ 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 (7.68) nur den letzten Term mitnehmen, d.h.

$$\chi = \frac{1}{2mc}\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}\phi, \quad \boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}.$$

Eingesetzt in die erste Gleichung finden wir dann

$$(i\partial_t - eA_0)\phi = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})^2\phi.$$

Mit der Identitäten

$$\sigma_i\sigma_j\pi_i\pi_j = \boldsymbol{\pi}^2 + \frac{i}{2}\epsilon_{ijk}[\pi_i, \pi_j]\sigma_k \quad \text{und} \quad [\pi_i, \pi_j] = ie\epsilon_{ijk}B_k \quad (7.69)$$

finden wir schlussendlich

$$i\hbar\partial_t\phi = H^{(1)}\phi, \quad H^{(1)} = \frac{1}{2m}\boldsymbol{\pi}^2 + eA_0 - \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}. \quad (7.70)$$

Wir erhalten also den nichtrelativistischen Pauli-Hamilton-Operator mit der korrekten Kopplung an das Magnetfeld. Das magnetische Moment des Elektrons ist

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma} = \frac{e}{mc}\mathbf{S}, \quad \mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}. \quad (7.71)$$

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, eine systematische Methode zu entwickeln. Diese wird durch die Foldy-Wouthuysen-Transformation geliefert.

7.7.1 Die Foldy-Wouthuysen Transformation

Für $\mathbf{p} = 0$ und $A_\mu = 0$ ist

$$H = \begin{pmatrix} mc^2\sigma_0 & 0 \\ 0 & -mc^2\sigma_0 \end{pmatrix},$$

und hat zwei Arten von Eigenvektoren:

$$E > 0 : \begin{pmatrix} * \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad E < 0 : \begin{pmatrix} 0 \\ * \end{pmatrix},$$

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 mittels einer unitären Transformation

$$\psi' = e^S \psi, \quad S^\dagger = -S \quad (7.72)$$

zu entkoppeln, d.h. der transformierte Hamilton-Operator soll die Form

$$H' = \begin{pmatrix} H'_+ & 0 \\ 0 & H'_- \end{pmatrix},$$

haben, wenigstens in einer Entwicklung nach \mathbf{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

$$\mathcal{E} = \begin{pmatrix} * & 0 \\ 0 & * \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad \mathcal{O} = \begin{pmatrix} 0 & * \\ * & 0 \end{pmatrix}.$$

In der Diracdarstellung ist $\beta = \sigma_3 \otimes \sigma_0$, so dass

$$\left[\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \beta \right] = 2 \begin{pmatrix} 0 & -b \\ c & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \left\{ \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \beta \right\} = 2 \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & -d \end{pmatrix}$$

gilt. Deshalb kann man die geraden und ungeraden Operatoren auch durch

$$[\beta, \mathcal{E}] = 0 \quad \text{und} \quad \{\beta, \mathcal{O}\} = 0 \quad (7.73)$$

charakterisieren. Jeder Operator ist eindeutig eine Summe eines geraden und eines ungeraden Operators, e.g.

$$H = mc^2\beta + \mathcal{E} + \mathcal{O}, \quad \text{mit} \quad \mathcal{E} = eA_0, \quad \mathcal{O} = c(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\pi}). \quad (7.74)$$

Als nächstes studieren wir die Transformation von H unter (7.72). Aus

$$-\frac{\hbar}{i}\partial_t\psi = H\psi \quad \text{und} \quad \psi' = e^S\psi$$

folgt unmittelbar

$$-\frac{\hbar}{i}\partial_t\psi' = -\frac{\hbar}{i}(e^S)_{,t}\psi - \frac{\hbar}{i}e^S\partial_t\psi = -\frac{\hbar}{i}(e^S)_{,t}e^{-S}\psi' + e^SHe^{-S}\psi'$$

und damit lautet der transformierte Hamilton-Operator

$$H' = e^SHe^{-S} - \frac{\hbar}{i}(e^S)_{,t}e^{-S}. \quad (7.75)$$

Für verschwindende Impulse und elektromagnetische Potentiale ist $S = 0$ und daher wird S für kleine Impulse und Potentiale „klein“ sein. Deshalb wollen wir (7.75) in Potenzen von S entwickeln. Der erste Term hat die Entwicklung

$$e^SHe^{-S} = H + [S, H] + \frac{1}{2}[S, [S, H]] + \dots = \sum_0^{\infty} \frac{1}{k!}(\text{ad}S)^k H, \quad (7.76)$$

wobei $\text{ad}S$ die lineare Abbildung $(\text{ad}S)H = [S, H]$ bezeichnet. Den zweiten Term in (7.75) gewinnt man, indem man

$$\frac{d}{d\lambda}((e^{\lambda S})_{,t}e^{-\lambda S}) = (e^{\lambda S}S)_{,t}e^{-\lambda S} - (e^{\lambda S})_{,t}Se^{-\lambda S} = e^{\lambda S}S_{,t}e^{-\lambda S} = \sum_0^{\infty} \frac{\lambda^k}{k}(\text{ad}S)^k S_{,t},$$

bezüglich λ von 0 bis 1 integriert,

$$(e^S)_{,t}e^{-S} = \sum_0^{\infty} \frac{1}{(k+1)!}(\text{ad}S)^k S_{,t}. \quad (7.77)$$

Damit finden wir schlussendlich

$$\begin{aligned} H' = H &+ \left([S, H] + \frac{1}{2!}[S, [S, H]] + \frac{1}{3!}[S, [S, [S, H]]] + \dots \right) \\ &- \frac{\hbar}{i} \left(S_{,t} + \frac{1}{2!}[S, S_{,t}] + \frac{1}{3!}[S, [S, S_{,t}]] + \dots \right) \end{aligned} \quad (7.78)$$

Wir wenden dies auf den Dirac-Hamilton-Operator (7.74) an. Wir wählen S so, dass der führende Term in einer Entwicklung nach $1/c$ des ungeraden Operators \mathcal{O} in (7.74) verschwindet. Um dieses S zu finden, betrachten wir nur die führenden Terme $[S, H] + i\hbar S_{,t}$ in der Transformation (7.78). Da S zeitunabhängig gewählt werden kann, ist

$$H' \sim mc^2\beta + \mathcal{E} + \mathcal{O} + [S, mc^2\beta], \quad (7.79)$$

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

$$S = \frac{1}{2mc^2}\beta \cdot \mathcal{O},$$

wie man problemlos beweist:

$$[S, mc^2\beta] = \frac{1}{2}[\beta\mathcal{O}, \beta] = \frac{1}{2}\beta[\mathcal{O}, \beta] = -\beta^2\mathcal{O} = -\mathcal{O}.$$

In der zweitletzten Gleichung benutzten wir, dass ein ungerader Operator mit β anti-vertauscht. Das so bestimmte S benutzen wir nun in (7.74) und berechnen H' bis zur gewünschten Ordnung in $1/c$. Der transformierte Hamilton-Operator hat die Form

$$H' = mc^2\beta + \mathcal{E}' + \mathcal{O}',$$

wobei aber \mathcal{O}' noch nicht von der gewünschten Ordnung in $1/c$ ist. Deshalb wird dieser Schritt iteriert:

$$\psi'' = e^{S'}\psi' \quad \text{und} \quad H'' = H' + [S', H'] + \dots,$$

wobei S' so gewählt wird, dass $[S', mc^2\beta] = -\mathcal{O}'$ ist, d.h.

$$S' = \frac{1}{2mc^2}\beta\mathcal{O}'.$$

Damit wird

$$H'' = mc^2\beta + \mathcal{E}'' + \mathcal{O}''.$$

Nach nochmaliger Iteration findet man dann den bis zur Ordnung $1/c^2$ entkoppelten Hamilton-Operator

$$\begin{aligned} H''' &= \beta \left(mc^2 + \frac{1}{2m}\boldsymbol{\pi}^2 - \frac{1}{8m^3c^2}(\boldsymbol{\pi}^2)^2 + \dots \right) + eA_0 \\ &\quad - \frac{e\hbar}{2mc}(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{B})\beta \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{i\hbar}{8m^2c^3} (\boldsymbol{\sigma}, \nabla \wedge \mathbf{E}) - \frac{e\hbar}{4m^2c^2} (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{E} \wedge \mathbf{p}) \\
& - \frac{e^2\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla \cdot \mathbf{E} + \dots
\end{aligned} \tag{7.80}$$

7.7.2 Interpretation der Terme

Wir werden nun die Terme in (7.80) mit bereits bekannten Termen vergleichen. Wegen

$$c\sqrt{m^2c^2 + \boldsymbol{\pi}^2} + eA_0 \sim mc^2 \left(1 + \frac{1}{2m^2c^2} \boldsymbol{\pi}^2 - \frac{1}{8m^4c^4} (\boldsymbol{\pi}^2)^2 \dots \right) + eA_0$$

ist die erste Zeile in (7.80) die semirelativistische Entwicklung der kinetischen Energie eines Teilchens. Die zweite Zeile in (7.80) ist die bekannte Kopplung des magnetischen Moments an das Magnetfeld mit $g = 2$. Zur Interpretation der dritten Zeile wollen wir eine statisches Feld annehmen, $\nabla \wedge \mathbf{E} = 0$, so dass $\mathbf{E} = -\nabla\phi$ gilt und weiterhin, dass ϕ nur von r abhängt, $\nabla\phi = \phi_{,r} \mathbf{x}/r$. Dann vereinfacht sich die dritte Zeile in (7.80) zu

$$\frac{e\hbar}{4m^2c^2} (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x} \wedge \mathbf{p}) \frac{\phi_{,r}}{r} = \frac{e}{2m^2c^2} (\mathbf{S}, \mathbf{L}) \frac{\phi_{,r}}{r}$$

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 \mathbf{B} -Feld wechselwirkt mit dem Spin des Elektrons. Der letzte Term in (7.80) 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

$$\psi(x) \longrightarrow (\Gamma(A)\psi)(x) = S(A)\psi(\Lambda^{-1}x), \quad A \in SL(2, \mathbb{C}) \tag{7.81}$$

transformiert. Die auf Spinoren wirkende Operatoren transformieren dann unter Lorentz-Transformationen gemäß

$$H \longrightarrow \Gamma(A)H\Gamma^{-1}(A).$$

Deshalb ist ein Hamilton-Operator drehinvariant, falls

$$\Gamma(U)H\Gamma^{-1}(U) = H, \quad U \in SU(2), \quad \Lambda(U) = \begin{pmatrix} 1 & \boldsymbol{\theta}^T \\ \mathbf{0} & R \end{pmatrix}, \quad (7.82)$$

gilt, wobei R eine eigentliche Drehung im Raum ist. Wegen $S^{-1}\gamma S = \Lambda\gamma$ ist β drehinvariant und $\boldsymbol{\alpha}$ ein Vektoroperator,

$$S(U)\beta S^{-1}(U) = \beta \quad \text{und} \quad S(U)\boldsymbol{\alpha}S^{-1}(U) = R^{-1}\boldsymbol{\alpha}. \quad (7.83)$$

Deshalb findet man für den Hamilton-Operator im gedrehten System ($\hbar = c = 1$)

$$(\Gamma(U)H\Gamma^{-1}(U)\psi)(t, \mathbf{x}) = \{(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{p} - R\mathbf{A}(t, R^{-1}\mathbf{x})) + m\beta + eA_0(t, R^{-1}\mathbf{x})\}\psi(t, \mathbf{x}).$$

Wir schliessen, dass H drehinvariant ist für drehinvariante Eichpotentiale,

$$A_0(t, \mathbf{x}) = A_0(t, R^{-1}\mathbf{x}) \quad \text{und} \quad \mathbf{A}(t, \mathbf{x}) = R\mathbf{A}(t, R^{-1}\mathbf{x}).$$

Diese Bedingungen implizieren folgende Form des Eichpotentials

$$A_0 = A_0(t, r) \quad \text{und} \quad \mathbf{A} = \mathbf{x}f(t, r), \quad (7.84)$$

und daraus folgt unmittelbar, dass das magnetische Feld verschwindet und das elektrische Feld ein Zentralfeld ist, $\mathbf{E} = \mathbf{x} \cdot g(t, r)$.

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

$$U(\theta, \mathbf{e}) = \exp(-i\theta \mathbf{e} \cdot \boldsymbol{\sigma}/2) \in SU(2), \quad (7.85)$$

eine „Drehung“ um die Achse \mathbf{e} mit Winkel θ . Dann transformieren Spinorfelder mit

$$\Gamma(\theta, \mathbf{e}) \equiv \Gamma(U(\theta, \mathbf{e})) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\theta \mathbf{e} \cdot \mathbf{J}\right). \quad (7.86)$$

In der chiralen Darstellung haben die den Drehungen zugeordneten Spintransformationen die Form

$$S(U) = \begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & U \end{pmatrix} = \sigma_0 \otimes U.$$

Für U wählen wir eine quantenmechanische „Drehung“ (7.85) um die Achse \mathbf{e} mit Winkel θ . Die entsprechende Drehung im Raum hat dann die Form

$$R(\theta, \mathbf{e}) = \exp(\theta \mathbf{e} \cdot \boldsymbol{\Omega}).$$

Die Ableitung von

$$(\Gamma(\theta, \mathbf{e})\psi)(t, \mathbf{x}) = (\sigma_0 \otimes U(\theta, \mathbf{e})) \psi(t, R^{-1}(\theta, \mathbf{e}) \mathbf{x})$$

nach θ an der Stelle $\theta = 0$ ergibt folgenden Gesamtdrehimpuls in der chiralen Darstellung,

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \frac{\hbar}{2} \sigma_0 \otimes \boldsymbol{\sigma}. \quad (7.87)$$

Die Drehinvarianz (7.82) ist äquivalent zu

$$[H, \mathbf{J}] = 0, \quad \mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \quad \mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \sigma_0 \otimes \boldsymbol{\sigma}. \quad (7.88)$$

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

$$\Sigma^{\alpha\beta} = \frac{1}{4i} [\gamma^\alpha, \gamma^\beta] \quad (7.89)$$

ein. Diese haben folgende Vertauschungsrelationen mit den γ -Matrizen und untereinander:

$$[\Sigma^{\alpha\beta}, \gamma^\mu] = i (g^{\alpha\mu} \gamma^\beta - g^{\beta\mu} \gamma^\alpha) \quad (7.90)$$

$$[\Sigma_{\alpha\beta}, \Sigma_{\mu\nu}] = i (g_{\alpha\mu} \Sigma_{\beta\nu} + g_{\beta\nu} \Sigma_{\alpha\mu} - g_{\alpha\nu} \Sigma_{\beta\mu} - g_{\beta\mu} \Sigma_{\alpha\nu}). \quad (7.91)$$

Es sei nun

$$\Gamma^\mu(\theta) = S^{-1}(\theta) \gamma^\mu S(\theta), \quad \text{wobei} \quad S(\theta) = \exp\left(\frac{i}{2} \theta \omega_{\alpha\beta} \Sigma^{\alpha\beta}\right), \quad \omega_{\alpha\beta} = -\omega_{\beta\alpha}$$

eine einparametrische Gruppe von Transformationen mit $S(0) = \mathbb{1}$. Unter Benutzung von (7.90) findet man die folgende einfache gewöhnliche Differentialgleichung für $S(\theta)$,

$$\frac{d}{d\theta} \Gamma^\mu(\theta) = \omega^\mu_\nu \Gamma^\nu(\theta),$$

welche mit $\Gamma^\mu(0) = \gamma^\mu$ folgende eindeutige Lösung hat,

$$\Gamma^\mu(\theta) = S^{-1}(\theta) \gamma^\mu S(\theta) = \Lambda(\theta)^\mu_\nu \gamma^\nu \quad \Lambda(\theta) = \exp(\theta \omega), \quad \omega = (\omega^\mu_\nu). \quad (7.92)$$

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

$$S^{-1}\gamma^\mu S = \Lambda^\mu{}_\nu \gamma^\nu \quad \text{mit} \quad S = \exp\left(\frac{i}{2}\omega_{\alpha\beta}\Sigma^{\alpha\beta}\right) \quad \text{und} \quad \Lambda = \exp(\omega). \quad (7.93)$$

Also ist S die gesuchte Verallgemeinerung von $S(A)$ in (7.29) für beliebige Darstellungen. Jeder Spintransformation S ist eine Lorentz-Transformation Λ gemäß (7.93) zugeordnet. Die Abbildung $S \rightarrow \Lambda(S)$ definiert eine Darstellung der „Spintransformationen“ als Lorentz-Transformationen. Nun leiten wir

$$(\Gamma(\theta)\psi)(x) = S(\theta)\psi(\Lambda^{-1}(\theta)x)$$

an der Stelle $\theta = 0$ ab und erhalten für die infinitesimalen Lorentz-Transformationen

$$\left.\frac{d}{d\theta}\right|_{\theta=0} (\Gamma(\theta)\psi)(x) = (\Gamma_*(\omega))\psi(x) = \frac{i}{2}\omega_{\alpha\beta} (M^{\alpha\beta} + \Sigma^{\alpha\beta}) \psi(x), \quad (7.94)$$

wobei wir die Differentialoperatoren erster Ordnung,

$$M_{\alpha\beta} = \frac{1}{i} (x_\alpha \partial_\beta - x_\beta \partial_\alpha),$$

eingeführt. Diese Operatoren $M_{\alpha\beta}$ erfüllen dieselben Vertauschungrelationen wie die $\Sigma_{\alpha\beta}$ in (7.91). Damit erfüllen die infinitesimalen Erzeugenden der Lorentzgruppe,

$$J_{\alpha\beta} = M_{\alpha\beta} + \Sigma_{\alpha\beta}, \quad (7.95)$$

ebenfalls die Vertauschungrelationen (7.91) 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

$$\epsilon_{kij} M^{ij} = -\frac{2}{\hbar} L_k \quad \text{und} \quad \epsilon_{kij} \Sigma^{ij} = \frac{1}{2i} \epsilon_{kij} \gamma^i \gamma^j$$

müssen wir den Spin eines Teilchens in $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ folgendermaßen definieren:

$$S_k = -\frac{\hbar}{4i} \epsilon_{kij} \gamma^i \gamma^j = -\frac{\hbar}{2} \epsilon_{kij} \Sigma^{ij}. \quad (7.96)$$

In der Dirac- und der chiralen Darstellung findet man für die Spinoperatoren,

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \sigma_0 \otimes \boldsymbol{\sigma} \quad (7.97)$$

und in der Majorana-Darstellung lauten sie

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \{-\sigma_2 \otimes \sigma_0, -\sigma_3 \otimes \sigma_2, \sigma_1 \otimes \sigma_2\}. \quad (7.98)$$

7.9 Elektronen in elektromagnetischen Wellenfeldern

Die Diracsche Gleichung wurde 1928 publiziert [20] und sieben Jahre später veröffentlichte VOLKOV seine Lösung für die Bewegung von Elektronen in ebenen elektromagnetischen Wellen [21]. 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

$$(i\mathcal{D} - \mu) \psi = 0, \quad (7.99)$$

wobei μ die inverse Compton-Wellenlänge des Elektrons bezeichnet. Wir multiplizieren mit $i\mathcal{D} + \mu$ und finden die zweite-Ordnungsgleichung

$$\left(\mathcal{D}^2 + \mu^2\right) \psi = 0. \quad (7.100)$$

Um das Quadrat des Dirac-Operator auszurechnen benutzen wir die Dirac-Algebra (7.4), die Matrizen (7.89) und den Kommutator zweier kovarianter Ableitungen in (6.52),

$$\begin{aligned} \mathcal{D}\mathcal{D} &= \gamma^\mu \gamma^\nu D_\mu D_\nu = \frac{1}{2} (\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} + [\gamma^\mu, \gamma^\nu]) D_\mu D_\nu \\ &= g^{\mu\nu} D_\mu D_\nu + \frac{1}{4} [\gamma^\mu, \gamma^\nu] [D_\mu, D_\nu] = D_\mu D^\mu - \frac{e}{\hbar c} \Sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu}. \end{aligned}$$

Die führt auf die gesuchte Wellengleichung

$$\left(-D_\mu D^\mu + \frac{e}{\hbar c} F_{\mu\nu} \Sigma^{\mu\nu} - \mu^2\right) \psi = 0. \quad (7.101)$$

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 elektri-

sche Moment des Teilchens beschreibt. Jede Lösung der Dirac-Gleichung ist eine Lösung von (7.101). Die Umkehrung ist nicht immer wahr. Für jede Lösung ψ von (7.101) ist aber $(i\mathcal{D} + \mu)\psi$ 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,

$$\frac{e}{\hbar c} A_\mu = a_\mu(\varphi), \quad \text{mit} \quad \varphi = kx, \quad k^2 = 0. \quad (7.102)$$

Das Feld a^μ hat die Dimension 1/Länge. Wir wählen die kovariante Lorentzzeichnung

$$\frac{e}{\hbar c} \partial_\mu A^\mu = k_\mu a'^\mu = (k_\mu a^\mu)' = 0,$$

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

$$k_\mu a^\mu \equiv ka = 0 \quad (7.103)$$

gilt. Der Feldstärketensor hat die Gestalt

$$\frac{e}{\hbar c} F_{\mu\nu} = k_\mu a'_\nu - k_\nu a'_\mu. \quad (7.104)$$

Anstelle der Dirac-Gleichung betrachten wir die zweite-Ordnungs Gleichung (7.101). In der Lorentzzeichnung ist

$$D^\mu D_\mu = \square + 2ia\partial - a^2$$

und wegen (7.104) und (7.103) gilt

$$\frac{e}{\hbar c} F_{\mu\nu} \Sigma^{\mu\nu} = \frac{1}{2i} (k\phi' - \phi'k) = -ik\phi',$$

so dass die zweite-Ordnungs Gleichung folgende Form annimmt,

$$(-\square - 2ia\partial + a^2 - ik\phi' - \mu^2) \psi = 0. \quad (7.105)$$

Hier folgen wir VOLKOV und machen den folgenden Lösungsansatz,

$$\psi = e^{-iqx} F(\varphi) \quad \text{mit} \quad q^2 = \mu^2. \quad (7.106)$$

Mit Hilfe von $k^2 = ka = 0$ findet man für die Amplitude F folgende gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung,

$$2i(qk)F' = (2aq - a^2 + ik\phi') F. \quad (7.107)$$

Die Lösung dieser Gleichung lautet

$$F = \exp\left(-\frac{i}{kq} \int^\varphi \left(aq - \frac{a^2}{2}\right) d\varphi'\right) \left(1 + \frac{1}{2} \frac{k\phi}{kq}\right) \frac{1}{\sqrt{2\omega}} u_p, \quad (7.108)$$

mit einem konstanten Bispinor $u_p/2\omega$. Beim Beweis benutzt man die Lorentzzeichnung in

$$\not{k}\not{k} = -\not{k}\not{k} + \{\not{k}, \not{k}\} = -\not{k}\not{k} + 2k_\mu a^\mu = -\not{k}\not{k}$$

und dass k ein lichtartiger Vektor ist, so dass

$$(\not{k}\not{k}')(\not{k}\phi) = -(\not{k}\not{k}')(\phi'\phi) = -k^2(\phi'\phi) = 0$$

gilt. An dieser Stelle wird of the *Hamilton-Jacobi-Funktion*

$$S = -qx - \frac{1}{kq} \int_0^{kx} \left(aq - \frac{a^2}{2}\right) d\varphi \quad (7.109)$$

eingeführt. Damit schreibt sich die Lösung der zweiten Ordnungs-Gleichung

$$\psi = \left(1 + \frac{1}{2} \frac{k\phi}{kq}\right) e^{iS} \frac{1}{\sqrt{2\omega}} u_p. \quad (7.110)$$

Dies ist im Allgemeinen noch keine Lösung der ersten-Ordnungs Gleichung. Aber wegen

$$i\not{D}\psi = \left(1 + \frac{1}{2} \frac{k\phi}{kq}\right) e^{iS} \frac{1}{\sqrt{2\omega}} \not{k}u_p.$$

ist sie eine derartige Lösung falls der konstante Spinor die freie Dirac-Gleichung erfüllt

$$(\not{k} - \mu)u_p = 0 \quad \text{bzw.} \quad \bar{u}_p(\not{k} - \mu) = 0. \quad (7.111)$$

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

$$\phi^\dagger \gamma^0 = \gamma^0 \phi$$

finden wir mit $\not{k}^2 = \{\not{k}, \not{A}\} = 0$ einen konstanten bilinearen Skalar

$$\bar{\psi}\psi = \frac{1}{2\omega} u_p^\dagger \left(1 + \frac{1}{2kq} \phi^\dagger \not{k}^\dagger\right) \gamma^0 \left(1 + \frac{1}{2kq} k\phi\right) u_p$$

$$= \frac{1}{2\omega} \bar{u}_p \left(1 + \frac{1}{2kq} \not{a} \not{k} \right) \left(1 + \frac{1}{2kq} \not{k} \not{a} \right) u_p = \frac{\mu}{\omega}.$$

Dagegen hängt die Stromdichte von Raum und Zeit ab. Mit Hilfe der Identitäten

$$\not{a} \not{k} \gamma^\mu + \gamma^\mu \not{k} \not{a} = 2(k^\mu \not{a} - a^\mu \not{k}) \quad \text{und} \quad \not{a} \not{k} \gamma^\mu \not{k} \not{a} = -2k^\mu a^2 \not{k}$$

und der aus (7.111) abgeleiteten Gleichung

$$\mu \bar{u}_p \gamma^\mu u_p = q^\mu \bar{u}_p u_p = 2\mu q^\mu$$

findet man die Stromdichte

$$\begin{aligned} \bar{\psi} \gamma^\mu \psi &= \frac{1}{2\omega} \bar{u}_p \left(\gamma^\mu + \frac{1}{kq} (k^\mu \not{a} - a^\mu \not{k}) - \frac{1}{2(kq)^2} (k^\mu a^2 \not{k}) \right) u_p \\ &= \frac{1}{\omega} \left(q^\mu - a^\mu + k^\mu \left(\frac{aq}{kq} - \frac{a^2}{2kq} \right) \right). \end{aligned} \quad (7.112)$$

Für periodische Funktionen $a^\mu(\varphi)$ sind die (zeitlichen) Mittelwerte Null, und der Mittelwert der Stromdichte ist

$$\bar{j}^\mu = \frac{1}{\omega} \left(q^\mu - \frac{1}{2kq} \overline{a^2} k^\mu \right). \quad (7.113)$$

Also ist die Stromdichte in einer harmonischen ebenen Welle $a^\mu(x) = a_0^\mu \cos(kx)$ gleich

$$\bar{j}^\mu = \frac{1}{\omega} \left(q^\mu - \frac{a_0^2}{4kq} k^\mu \right).$$

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 Strahlungskorrekturen 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

$$\mathbf{A} = 0 \quad \text{und} \quad eA_0 = V(r)$$

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

$$J_k = L_k - \frac{\hbar}{4i} \epsilon_{kij} \gamma^i \gamma^j$$

mit dem Hamilton-Operator

$$H = c(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{p}) + \beta mc^2 + V(r). \quad (8.1)$$

In der Dirac-Darstellung lauten die auftretenden Matrizen

$$\beta = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sigma_0 \end{pmatrix}, \quad \alpha = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_0 \\ \sigma_0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \equiv \rho_1 \boldsymbol{\sigma},$$

wobei wir die im Folgenden oft benutzte Matrix ρ_1 einführen. Der Gesamtdrehimpuls ist blockdiagonal

$$\mathbf{J} = \mathbf{x} \wedge \mathbf{p} + \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{L} + \mathbf{S} = \hbar \left(\mathbf{M} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \right). \quad (8.2)$$

Ob mit $\boldsymbol{\sigma}$ die 2 oder 4-dimensionalen Matrizen gemeint sind, geht jeweils aus dem Zusammenhang hervor. In (8.2) sind die σ_i offensichtlich 4×4 -Matrizen. Wir werden öfter die Eigenschaften

$$\rho_1 \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma} \rho_1, \quad \rho_1^2 = \mathbb{1} \quad \text{und} \quad \{\beta, \rho_1\} = 0 \quad (8.3)$$

benutzen. Im letzten Kapitel sahen wir, daß der gesamte Drehimpuls \mathbf{J} erhalten ist, $[\mathbf{J}, H] = 0$. Entsprechend gibt es folgende Integrale in Involution (Konstanten der Bewegung):

$$\mathbf{J}^2, \quad J_3 \quad \text{und} \quad H. \quad (8.4)$$

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

$$\hbar^2 j(j+1) \quad \text{mit} \quad j \in \frac{1}{2} + \mathbb{N}_0.$$

Insbesondere 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 \mathbf{p} auf den Vektoroperator \mathbf{x} . Dazu definieren wir die drehinvariante r -Komponente α_r von $\boldsymbol{\alpha}$:

$$r \cdot \boldsymbol{\alpha}_r \equiv (\mathbf{x}, \boldsymbol{\alpha}).$$

Offensichtlich gilt

$$\alpha_r^\dagger = \alpha_r, \quad \alpha_r^2 = \frac{1}{r^2} x_i x_j \frac{1}{2} \{\alpha_i, \alpha_j\} = \mathbb{1} \quad \text{und} \quad \{\alpha_r, \beta\} = 0. \quad (8.5)$$

Der drehinvariante radiale Impuls ist gegeben durch

$$r \cdot p_r \equiv (\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{\hbar}{i} r \frac{\partial}{\partial r}.$$

In der Quantenmechanik I haben sie gelernt, daß der Operator p_r nicht hermitisch ist,

$$p_r^\dagger = \frac{2\hbar}{ir} + p_r \quad \text{aber} \quad \left(p_r + \frac{\hbar}{ir} \right)^\dagger = \left(p_r + \frac{\hbar}{ir} \right).$$

Nach diesen Vorbereitungen wollen wir nun die Terme im Dirac-Hamilton-Operator umschreiben. Um $(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{p})$ durch drehinvariante Größen auszudrücken, berechnen wir zuerst

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}, \boldsymbol{\alpha})(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{p}) &= (\mathbf{x}, \rho_1 \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{p}, \rho_1 \boldsymbol{\sigma}) \stackrel{(8.3)}{=} \rho_1^2 (\mathbf{x}, \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{p}, \boldsymbol{\sigma}) \\ &= (\mathbf{x}, \mathbf{p}) + i(\mathbf{x} \wedge \mathbf{p}, \boldsymbol{\sigma}) = r p_r + i(\mathbf{L}, \boldsymbol{\sigma}). \end{aligned}$$

Mit $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\alpha}) = r \alpha_r$ und $\alpha_r^2 = \mathbb{1}$ können wir diese Gleichung nach $(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{p})$ auflösen:

$$(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{p}) = \alpha_r p_r + \frac{i}{r} \alpha_r (\mathbf{L}, \boldsymbol{\sigma}). \quad (8.6)$$

Eingesetzt in Hamilton-Operator finden wir

$$H = c \left(\alpha_r p_r + i \alpha_r \frac{\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{r} \right) + \beta m c^2 + V(r). \quad (8.7)$$

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

$$k = \beta (\mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbb{1}), \quad \mathbf{M} = \mathbf{L}/\hbar \quad (8.8)$$

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 $\mathbf{M} \wedge \mathbf{M} = i\mathbf{M}$ ist, rechnen wir

$$\begin{aligned} k^2 &= \beta(\mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbb{1})\beta(\mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbb{1}) = (\mathbf{M}, \boldsymbol{\sigma})^2 + 2(\mathbf{M}, \boldsymbol{\sigma}) + \mathbb{1} \\ &= (\mathbf{M}, \mathbf{M}) + i(\mathbf{M} \wedge \mathbf{M}, \boldsymbol{\sigma}) + 2(\mathbf{M}, \boldsymbol{\sigma}) + \mathbb{1} = (\mathbf{M}, \mathbf{M}) + (\mathbf{M}, \boldsymbol{\sigma}) + \mathbb{1} \\ &= \left(\mathbf{M} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\right)^2 - \frac{1}{4}\boldsymbol{\sigma}^2 + \mathbb{1} = (\mathbf{J}/\hbar)^2 + \frac{1}{4}\mathbb{1}. \end{aligned}$$

Als Skalarprodukt von zwei Vektoroperatoren vertauscht der skalare Operator k mit dem Gesamtdrehimpuls

$$[\mathbf{J}, k] = 0.$$

Wir können deshalb \mathbf{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 \mathbf{J}^2 in Verbindung zu bringen. Wegen

$$j(j+1) + \frac{1}{4} = \left(j + \frac{1}{2}\right)^2, \quad j \in \frac{1}{2} + \mathbb{N}_0$$

ist das Spektrum von k gleich

$$k = \{\dots, -2, -1, 1, 2, \dots\} \quad (0 \text{ fehlt}). \quad (8.9)$$

Wir müssen noch beweisen, daß k mit dem Hamilton-Operator (8.7) vertauscht. Dazu berechnen wir die Kommutatoren der verschiedenen Terme in H mit k :

- Der orbitale Drehimpuls \mathbf{L} vertauscht mit einem radialsymmetrischen Potential und daher ist

$$[k, V(r)] = 0.$$

- Da $\boldsymbol{\sigma}$ mit β kommutiert, gilt auch

$$[k, \beta] = 0 \quad \text{und} \quad [k, \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}] = 0.$$

- $p_r = \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}/r$ ist drehinvariant und vertauscht mit \mathbf{L} und deshalb mit k :

$$[k, p_r] = 0.$$

- Es verbleibt noch zu zeigen, daß α_r mit k kommutiert. Dies wollen wir nun beweisen. Da β mit $\mathbf{x}\boldsymbol{\sigma}$ und ρ_1 mit $\mathbf{M}\boldsymbol{\sigma}$ vertauscht, ist

$$[r\alpha_r, k] = [\rho_1\mathbf{x}\boldsymbol{\sigma}, \beta(\mathbf{M}\boldsymbol{\sigma} + \mathbb{1})] = \rho_1\beta[\mathbf{x}\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{M}\boldsymbol{\sigma} + \mathbb{1}] + [\rho_1, \beta](\mathbf{M}\boldsymbol{\sigma} + \mathbb{1})\mathbf{x}\boldsymbol{\sigma}$$

Nun benutzen wir, daß ρ_1 und β antivertauschen, so daß $[\rho_1, \beta] = 2\rho_1\beta$ gilt und

entsprechend ist

$$[r\alpha_r, k] = \rho_1\beta([\mathbf{x}\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{M}\boldsymbol{\sigma}] + 2(\mathbf{M}\boldsymbol{\sigma} + 1)\mathbf{x}\boldsymbol{\sigma}) = \rho_1\beta(\{\mathbf{x}\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{M}\boldsymbol{\sigma}\} + 2\mathbf{x}\boldsymbol{\sigma}).$$

Um zu zeigen, daß der Ausdruck in der Klammer verschwindet benutzen wir, daß \mathbf{x} ein Vektoroperator ist, d.h. daß $M_j x_i = -i\epsilon_{jpi}x_p + x_i M_j$ gilt, und finden

$$\{\mathbf{x}\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{M}\boldsymbol{\sigma}\} = x_i M_j \{\sigma_i, \sigma_j\} - i\epsilon_{jpi}x_p \sigma_j \sigma_i = 2\mathbf{x}\mathbf{M} + \epsilon_{jpi}\epsilon_{jik}x_p \sigma_k = -2\mathbf{x}\boldsymbol{\sigma}. \quad (8.10)$$

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 $\mathbf{L}\boldsymbol{\sigma}$ im Hamilton-Operator (8.7) durch k ersetzen,

$$k = \beta(\mathbf{M}\boldsymbol{\sigma} + 1) \implies \mathbf{L}\boldsymbol{\sigma} = \hbar(\beta k - 1).$$

und finden

$$\begin{aligned} H &= c\left(\alpha_r p_r + i\hbar\frac{\alpha_r}{r}(\beta k - 1)\right) + \beta mc^2 + V(r) \\ &= c\left(\alpha_r\left(p_r + \frac{\hbar}{ir}\right) + \frac{i\hbar}{r}\alpha_r\beta k\right) + \beta mc^2 + V(r). \end{aligned} \quad (8.11)$$

Wir haben die folgenden Integrale mit den angegebenen Eigenwerten in Involution:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2/\hbar^2 &: j \in \{1/2, 3/2, \dots\} \\ J_3/\hbar &: \mu \in \{\pm 1/2, \pm 3/2, \dots\} \\ k &: k \in \{\pm 1, \pm 2, \dots\} \\ H &: E_{j,\mu,k} = ? \end{aligned}$$

Wir wählen die Energie-Eigenzustände als Eigenzustände der kommutierenden Operatoren \mathbf{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 \mathbf{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:

$$J_3\psi_{j,\mu,k} = \begin{pmatrix} L_3 + \frac{1}{2}\hbar\sigma_3 & 0 \\ 0 & L_3 + \frac{1}{2}\hbar\sigma_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \mu \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}.$$

Für die Komponenten des 2-er Spinor ϕ bedeutet dies

$$L_3\phi_1 = \hbar(\mu - \frac{1}{2})\phi_1 \quad \text{und} \quad L_3\phi_2 = \hbar(\mu + \frac{1}{2})\phi_2$$

und analog für die Komponenten von χ . Wegen $L_3 Y_{\ell m} = \hbar m Y_{\ell m}$ können wir daher setzen

$$\phi = \begin{pmatrix} f_1(r) Y_{\ell, \mu - \frac{1}{2}} \\ f_2(r) Y_{\ell, \mu + \frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \chi = \begin{pmatrix} g_1(r) Y_{\ell, \mu - \frac{1}{2}} \\ g_2(r) Y_{\ell, \mu + \frac{1}{2}} \end{pmatrix}. \quad (8.12)$$

Diagonalisierung von k : Wegen

$$k = \begin{pmatrix} \mathbf{M}\boldsymbol{\sigma} + \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\mathbf{M}\boldsymbol{\sigma} - \sigma_0 \end{pmatrix}$$

lauten die Eigenwertgleichungen für k folgendermaßen:

$$(\mathbf{M}\boldsymbol{\sigma} + \sigma_0)\phi = k\phi \quad \text{und} \quad -(\mathbf{M}\boldsymbol{\sigma} + \sigma_0)\chi = k\chi.$$

Mit Hilfe der Aufsteige- und Absteigeoperatoren,

$$L_{\pm} = L_1 \pm iL_2 \implies [L_3, L_{\pm}] = \pm L_{\pm},$$

nimmt die Eigenwertgleichung für ϕ folgende Form an,

$$\begin{pmatrix} L_3 + \hbar & L_- \\ L_+ & -L_3 + \hbar \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 Y_{\ell, \mu - \frac{1}{2}} \\ f_2 Y_{\ell, \mu + \frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \hbar k \begin{pmatrix} f_1 Y_{\ell, \mu - \frac{1}{2}} \\ f_2 Y_{\ell, \mu + \frac{1}{2}} \end{pmatrix}.$$

Der Aufsteige- bzw. Absteigeoperator L_+ und L_- erhöhen bzw. erniedrigen die magnetische Quantenzahl um Eins,

$$L_{\pm} Y_{\ell, m} = \hbar \sqrt{(\ell \mp m)(\ell \pm m + 1)} Y_{\ell, m \pm 1},$$

und die Eigenwertgleichung für ϕ schreibt sich gemäß

$$\begin{pmatrix} \mu + \frac{1}{2} & \sqrt{(\ell + \mu + \frac{1}{2})(\ell - \mu + \frac{1}{2})} \\ \sqrt{(\ell - \mu + \frac{1}{2})(\ell + \mu + \frac{1}{2})} & -\mu + \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = k \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}.$$

Diese algebraische Gleichung hat nur eine nichtverschwindende Lösung falls

$$\left(\mu + \frac{1}{2} - k\right) \left(-\mu + \frac{1}{2} - k\right) = \left(\mu + \frac{1}{2} + \ell\right) \left(-\mu + \frac{1}{2} + \ell\right)$$

gilt. Offensichtlich hat diese quadratische Gleichung die beiden Lösungen:

$$\begin{aligned} k = \ell + 1 > 0: \quad f_2 &= \left(\frac{\ell - \mu + \frac{1}{2}}{\ell + \mu + \frac{1}{2}}\right)^{1/2} f_1 \\ k = -\ell < 0: \quad f_2 &= -\left(\frac{\ell + \mu + \frac{1}{2}}{\ell - \mu + \frac{1}{2}}\right)^{1/2} f_1. \end{aligned} \quad (8.13)$$

Die entsprechenden ϕ und χ diagonalisieren das Quadrat des Gesamtdrehimpulses. Um

dies einzusehen und die entsprechenden Werte von j zu bestimmen, drücken wir j durch ℓ und k aus. Wegen

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad \text{und} \quad \hbar^2 \beta k = 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + \hbar^2$$

erhalten wir

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + \hbar^2(\beta k - 1) \quad \text{oder} \quad j(j+1) = \ell(\ell+1) \pm k - \frac{1}{4}, \quad (8.14)$$

wobei das positive Vorzeichen für ϕ gilt und das negative für χ . Die jetzt folgenden expliziten Rechnungen werden für ϕ durchgeführt. Falls nun insbesondere

$$\begin{aligned} k = \ell + 1 > 0 & \quad \text{gilt, ist} & \quad j(j+1) = (\ell + \frac{1}{2})(\ell + \frac{3}{2}) & \quad \text{oder} & \quad j = \ell + \frac{1}{2} \\ k = -\ell < 0 & \quad \text{gilt, ist} & \quad j(j+1) = (\ell - \frac{1}{2})(\ell + \frac{1}{2}) & \quad \text{oder} & \quad j = \ell - \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Wir können also die folgenden Ersetzungen vornehmen:

$$j = \ell + \frac{1}{2} \longleftrightarrow k = j + \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad j = \ell - \frac{1}{2} \longleftrightarrow k = -(j + \frac{1}{2}),$$

oder zusammengefasst

$$k = (-)^{\ell+1/2-j} (j + \frac{1}{2}). \quad (8.15)$$

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:

$$\begin{aligned} k = \ell + \frac{1}{2} > 0, \quad j = \ell + \frac{1}{2}: & \quad \psi_{j,\mu,k} = \begin{pmatrix} f(r) \xi_{j\mu}^+ \\ g(r) \xi_{j\mu}^- \end{pmatrix} \\ k = -\ell < 0, \quad j = \ell - \frac{1}{2}: & \quad \psi_{j,\mu,k} = \begin{pmatrix} f(r) \xi_{j\mu}^- \\ g(r) \xi_{j\mu}^+ \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (8.16)$$

Bezeichnet c_μ^j die positive Wurzel von $(j + \mu)/2j$, dann lauten die *Spinor-Harmonischen*

$$\xi_{j\mu}^+ = \begin{pmatrix} c_\mu^j Y_{j-1/2,\mu-1/2} \\ c_{-\mu}^j Y_{j-1/2,\mu+1/2} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \xi_{j\mu}^- = \begin{pmatrix} c_{-\mu}^{j+1} Y_{j+1/2,\mu-1/2} \\ -c_\mu^{j+1} Y_{j+1/2,\mu+1/2} \end{pmatrix}$$

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 bestim-

men, brauchen wir die Wirkung von α_r auf den 4-komponentigen Wellenfunktionen: Wegen

$$\alpha_r = \frac{1}{r} \mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{n}\boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{n}\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$$

ist für positive k

$$\alpha_r \psi_{j,\mu,k} = \begin{pmatrix} g(r) \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \xi_{j\mu}^- \\ f(r) \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \xi_{j\mu}^+ \end{pmatrix}.$$

Wir müssen also herausfinden wie $\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}$ auf die Spinor-Harmonischen ξ^\pm wirkt. Wir notieren noch einmal, daß aufgrund der Form von k ,

$$k = \begin{pmatrix} \kappa & 0 \\ 0 & -\kappa \end{pmatrix}, \quad \kappa = M\boldsymbol{\sigma} + 1$$

die Spinor-Harmonischen ξ^\pm eindeutig charakterisiert sind durch:

$$\begin{aligned} \xi_{j\mu}^+ : & \quad j, \mu, \kappa \xi_{j\mu}^+ = k \xi_{j\mu}^+ \\ \xi_{j\mu}^- : & \quad j, \mu, \kappa \xi_{j\mu}^- = -k \xi_{j\mu}^-, \end{aligned} \quad (8.17)$$

wobei k ein positiver Eigenwert von k ist.

- Da $\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}$ nur von den Winkelvariablen abhängt und sein Quadrat Eins ist, muß $\xi \rightarrow (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n})\xi$ eine Kombination von Spinor-Harmonischen mit derselben Norm als ξ sein. Weiterhin ist $\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}$ dreihinvariant, d.h. vertauscht mit \mathbf{J} , und deshalb haben ξ und $(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n})\xi$ dieselben Quantenzahlen j und μ .
- Als nächstes zeigen wir, daß $(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n})\xi$ ein Eigenzustand von κ ist, falls ξ ein solcher war. Dazu beweisen wir, daß

$$\{\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}, \kappa\} = 0$$

ist. In der Tat ist

$$\{\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}, \kappa\} = \{\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}, M\boldsymbol{\sigma} + \mathbb{1}\} = \{\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}, M\boldsymbol{\sigma}\} + 2\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \stackrel{(8.10)}{=} 0.$$

Damit haben wir

$$\kappa(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n})\xi^\pm = -(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n})\kappa\xi^\pm = \mp k(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n})\xi^\pm.$$

Also haben $(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n})\xi_{j\mu}^\pm$ und $\xi_{j\mu}^\pm$ dieselben j und μ , aber entgegengesetztes k . Wir schließen,

daß

$$(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}) \xi_{j\mu}^{\pm} = d_{j\mu} \xi_{j\mu}^{\mp}$$

gelten muß. Um die Koeffizienten $d_{j\mu}$ zu finden, benutzen wir daß $\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}$ dreihinvariant ist und daher mit \mathbf{J} vertauscht. Also gilt insbesondere $[J_{\pm}, \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}] = 0$. Wir folgern

$$(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}) \xi_{j\mu}^{\pm} = d_{j\mu} \xi_{j\mu}^{\mp} \implies (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}) J_{\pm} \xi_{j\mu}^{\pm} = d_{j\mu} J_{\pm} \xi_{j\mu}^{\mp}.$$

Da $J_{\pm} \xi_{j\mu} \sim \xi_{j, \mu \pm 1}$ ist, folgt unmittelbar, daß die Koeffizienten unabhängig von μ sind:

$$(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{n}) \xi_{j\mu}^{\pm} = d_j \xi_{j\mu}^{\mp}.$$

Nun erinnern wir uns daran, daß die hermitesche Matrix $\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}$ zu $\mathbb{1}$ quadriert und deshalb normerhaltend ist,

$$|d_j|^2 (\xi_{j\mu}^{\mp}, \xi_{j\mu}^{\mp}) = (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \xi_{j\mu}^{\pm}, \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \xi_{j\mu}^{\pm}) = (\xi_{j\mu}^{\pm}, \xi_{j\mu}^{\pm})$$

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

$$\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \xi_{j\mu}^{\pm} = \xi_{j\mu}^{\mp}, \quad (8.18)$$

d.h. das $\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}$ 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 (8.11) auf die Spinoren

$$\psi_{j,\mu,k} = \begin{pmatrix} f(r) \xi_{j\mu}^+ \\ g(r) \xi_{j\mu}^- \end{pmatrix}, \quad k > 0,$$

an mit dem Resultat

$$H \psi_{j,\mu,k} = \begin{pmatrix} mc^2 + V & c(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}) \left((p_r + \frac{\hbar}{ir}) - \frac{i\hbar k}{r} \right) \\ c(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}) \left((p_r + \frac{\hbar}{ir}) + \frac{i\hbar k}{r} \right) & -mc^2 + V \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f \xi_{j\mu}^+ \\ g \xi_{j\mu}^- \end{pmatrix}.$$

Benutzen wir die Formeln (8.18), so finden wir folgende Gleichungen für die radialen Funktionen (die Spinor-Harmonischen können wie erwartet gekürzt werden) f und g :

$$\begin{aligned} \frac{\hbar c}{i} \left(g' + \frac{1}{r} g \right) - \frac{ic\hbar k}{r} g + (V + mc^2) f &= E f \\ \frac{\hbar c}{i} \left(f' + \frac{1}{r} f \right) + \frac{ic\hbar k}{r} f + (V - mc^2) g &= E g. \end{aligned} \quad (8.19)$$

Für $k < 0$ haben die Eigenfunktionen die Form

$$\psi_{j,\mu,k} = \begin{pmatrix} f(r)\xi_{j\mu}^- \\ g(r)\xi_{j\mu}^+ \end{pmatrix}, \quad k < 0.$$

Wiederum benutzt man (8.18) um die Gleichungen für die radialen Funktionen zu finden. Man findet exakt dieselben Gleichungen wie für $k > 0$, d.h. die gekoppelten gewöhnlichen Differentialgleichungen (8.19).

Wie in der Schrödingertheorie führen wir die neuen Radialfunktionen

$$F = rf \Rightarrow F' = rf' + f \quad \text{und} \quad G = irg \Rightarrow G' = irg' + ig \quad (8.20)$$

ein. Mit diesen reskalierten Funktionen vereinfachen sich die radialen zu

$$\begin{aligned} G' + \frac{k}{r}G &= \frac{mc^2 - E}{\hbar c}F + \frac{V}{\hbar c}F \\ F' - \frac{k}{r}F &= \frac{mc^2 + E}{\hbar c}G - \frac{V}{\hbar c}G. \end{aligned} \quad (8.21)$$

Gebundene Zustände sind normierbar. Für die reskalierten Funktionen bedeutet dies, daß

$$\int dr (|F|^2 + |G|^2) = 1 \quad (8.22)$$

gelten muß, damit der Zustand gebunden ist.

Asymptotisches Verhalten der Radialfunktionen:

Wir setzen

$$a_1 = \frac{mc^2 - E}{\hbar c} \quad \text{und} \quad a_2 = \frac{mc^2 + E}{\hbar c}.$$

Für gebundene Zustände mit $0 < E < mc^2$ sind beide Zahlen positiv.

Für $r \rightarrow \infty$ vereinfachen sich die Differentialgleichungen zu

$$G' \sim a_1 F \quad \text{und} \quad F' \sim a_2 G \iff F'' \sim a_1 a_2 F \quad \text{und} \quad G'' \sim a_1 a_2 G.$$

Also haben die Lösungen der radialen Dirac-Gleichung die asymptotische Form

$$F \sim e^{-ar} \quad \text{und} \quad G \sim e^{-ar}, \quad \text{wobei} \quad a = \sqrt{a_1 a_2} = \frac{1}{\hbar c} \sqrt{m^2 c^4 - E^2}$$

ist. Wir wollen nun dieses asymptotische Verhalten abspalten und definieren neue Radialfunktionen gemäß

$$F = e^{-ar} \tilde{f} \quad \text{und} \quad G = e^{-ar} \tilde{g}. \quad (8.23)$$

Für die neuen Funktionen sehen die radialen Dirac-Gleichungen folgendermaßen aus

$$\tilde{f}' - \left(a + \frac{k}{r}\right) \tilde{f} = \left(a_2 - \frac{V}{\hbar c}\right) \tilde{g} \quad , \quad \tilde{g}' - \left(a - \frac{k}{r}\right) \tilde{g} = \left(a_1 + \frac{V}{\hbar c}\right) \tilde{f}. \quad (8.24)$$

Wir machen nun einen Potenzreihenansatz für die geschlängelten Radialfunktionen:

$$\tilde{f} = \sum_{s \in s_0 + \mathbb{N}_0} c_s r^s \quad \text{und} \quad \tilde{g} = \sum_{s \in s_0 + \mathbb{N}_0} c'_s r^s, \quad (8.25)$$

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,

$$\frac{V}{\hbar c} = -\frac{e^2 Z}{\hbar c r} = -\frac{\alpha Z}{r}. \quad (8.26)$$

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:

$$\begin{pmatrix} s-k & -Z\alpha \\ Z\alpha & s+k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_s \\ c'_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & a_2 \\ a_1 & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{s-1} \\ c'_{s-1} \end{pmatrix}. \quad (8.27)$$

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:

$$(a, -a_2) \begin{pmatrix} a & a_2 \\ a_1 & a \end{pmatrix} = 0.$$

Multiplizieren wir also (8.27) skalar von links mit $(a, -a_2)$, so finden wir folgende Beziehung zwischen den c und c' :

$$\left[(s-k)a - Z\alpha a_2\right] c_s - \left[(s+k)a_2 + Z\alpha a\right] c'_s = 0. \quad (8.28)$$

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 (8.27), verschwinden. Deshalb muß die Determinante der Matrix auf der linken Seite in (8.27) Null sein:

$$s_0^2 = k^2 - Z^2 \alpha^2 \implies s_0 = \sqrt{k^2 - Z^2 \alpha^2}.$$

Hier müssen wir die positive Wurzel wählen, da \tilde{f} und \tilde{g} quadratintegrierbar sein müssen. Wir sehen also, daß offensichtlich

$$1 - Z^2\alpha^2 > 0 \quad \text{oder} \quad Z < \alpha^{-1} \sim 137 \quad (8.29)$$

gelten muß, damit wir mit unserer Methode gebundene Zustände konstruieren können.

Vermittels der Rekursionsformel (8.27) kann man untersuchen wie die c_s für große s anwachsen. Man findet, daß die geschlängelten Funktionen im Unendlichen exponentiell anwachsen, $\sim e^{2ar}$, falls die Reihe (8.25) nicht abbricht. Wir müssen also fordern, daß für $s > s_1$, wobei

$$s_1 = s_0 + n_r \quad \text{mit} \quad n_r \in \mathbb{N}_0$$

ist, die c_s und c'_s verschwinden. Für $s - 1 = s_1$ ist die linke Seite in (8.27) Null, so dass

$$ac_{s_1} + a_2c'_{s_1} = 0 \quad (8.30)$$

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 (8.28)

$$((s_1 - k)a - Z\alpha a_2)c_{s_1} - ((s_1 + k)a_2 + Z\alpha a)c'_{s_1} = 0. \quad (8.31)$$

Man rechnet nun leicht nach, daß die beiden linearen Gleichungen (8.30,8.31) nur dann eine Lösung zulassen (Determinantenbedingung), wenn

$$2as_1 = Z\alpha(a_2 - a_1) \iff s_1^2(m^2c^4 - E^2) = Z^2\alpha^2E^2$$

gilt. Dies ist gleichbedeutend mit

$$E^2 = \frac{m^2c^4s_1^2}{Z^2\alpha^2 + s_1^2}$$

wobei wir uns daran erinnern müssen, daß

$$s_1 = n_r + s_0 = n_r + \sqrt{k^2 - Z^2\alpha^2}$$

gilt. Setzen wir dies in die obige Formel für das Quadrat der Energie ein, so ergibt sich

$$\frac{E}{mc^2} = \left(1 + \frac{Z^2\alpha^2}{(n_r + \sqrt{k^2 - Z^2\alpha^2})^2}\right)^{-1/2} > 0 \quad n_r > 0. \quad (8.32)$$

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 (8.30), was nach Division durch $\sqrt{a_2}$ folgendermaßen geschrieben werden kann,

$$\sqrt{a_1}c_{s_0} + \sqrt{a_2}c'_{s_0} = 0, \quad (8.33)$$

haben wir wegen (8.27) jetzt statt (8.31) die stärkere zweite Bedingung

$$(s_0 - k)c_{s_0} - Z\alpha c'_{s_0} = 0. \quad (8.34)$$

Diese beiden Gleichungen haben nur eine nichtverschwindende Lösung falls die Determinante der entsprechenden Matrix verschwindet, was äquivalent zu

$$k = s_0 + \sqrt{\frac{a_1}{a_2}}Z\alpha \quad (8.35)$$

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

$$\frac{a_1}{a_2} = \frac{1 - \epsilon}{1 + \epsilon}, \quad \text{wobei } \epsilon = E/mc^2$$

ist. Dies setzen wir in die nach a_1/a_2 aufgelöste Formel für k ein und finden nach einer einfachen Rechnung

$$\frac{E}{mc^2} = \sqrt{1 - \frac{Z^2\alpha^2}{k^2}} \quad \text{für } s_0 = s_1. \quad (8.36)$$

Diese Formel stimmt mit der Sommerfeldschen Formel (8.32) überein wenn wir in dieser $n_r = 0$ setzen. Wir haben also als Schlussresultat die wohlbekannte *Feinstruktur-Formel*

$$\frac{E}{mc^2} = \left(1 + \frac{Z^2\alpha^2}{(n_r + \sqrt{k^2 - Z^2\alpha^2})^2}\right)^{-1/2} \quad \begin{array}{ll} n_r = 0 : & k = 1, 2, 3, \dots \\ n_r > 0 : & k = \pm 1, \pm 2, \dots \end{array} \quad (8.37)$$

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

$$\frac{E}{mc^2} = \left(1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{(n - |k| + \sqrt{k^2 - Z^2 \alpha^2})^2} \right)^{-1/2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad |k| = 1, 2, 3, \dots \quad (8.38)$$

Wir entwickeln diesen Ausdruck für die Eigenwerte des Dirac-Hamilton-Operators nach Potenzen von $Z\alpha$,

$$E = mc^2 \left(1 - \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} + \frac{3(Z\alpha)^4}{8n^4} - \frac{1}{2} \frac{(Z\alpha)^4}{n^3} \frac{1}{j + \frac{1}{2}} + O((Z\alpha)^6) \right), \quad (8.39)$$

mit

$$|k| = j + \frac{1}{2}, \quad n \in j + \frac{1}{2} + \{0, 1, 2, 3, \dots\}. \quad (8.40)$$

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

$$E_B = E - mc^2 = mc^2 \left(1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{(n - |k| + \sqrt{k^2 - Z^2 \alpha^2})^2} \right)^{-1/2} - mc^2. \quad (8.41)$$

Für $n = 1$ und $j = \frac{1}{2}$ ($|k| = 1$) ist

$$E_B = mc^2 \left(\sqrt{1 - Z^2 \alpha^2} - 1 \right).$$

Für $Z\alpha = 1$ ist $E = 0$ oder $E_B = -mc^2$ und für $Z > 1/\alpha$ werden die Energien imaginär. Dieses seltsame Ergebnis wird als *Instabilität des Vakuums* interpretiert. Bei diesen star-

ken 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

$$\frac{E - mc^2}{mc^2} \sim -(Z\alpha)^2 \left(\frac{1}{2n^2} + \frac{(Z\alpha)^2}{2n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right). \quad (8.42)$$

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.

Bezeichnung	n	ℓ	j	n_r	k	$E_B[\text{eV}]$
$1s_{1/2}$	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

(8.43)

	2S	2P		2D		2F		2G	
j	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{7}{2}$	$\frac{7}{2}$	$\frac{7}{2}$
k	1	-1	2	-2	3	-3	4	-4	5
$n = 4$	[Energy level diagram for n=4 showing sub-levels for S, P, D, F, G]								
$n = 3$	[Energy level diagram for n=3 showing sub-levels for S, P, D, F, G]								
$n = 2$	[Energy level diagram for n=2 showing sub-levels for S, P, D, F, G]								
$n = 1$	[Energy level diagram for n=1 showing sub-levels for S, P, D, F, G]								

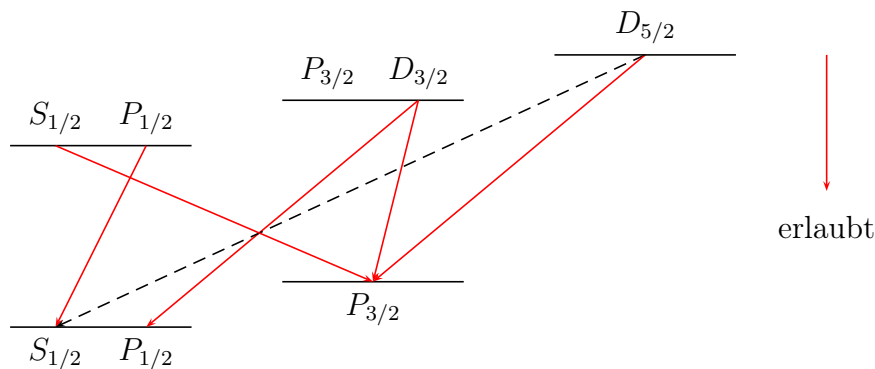


Abbildung 8.1: Das Spektrum des Wasserstoffs in der Diractheorie und erlaubte Übergänge von $n = 3$ nach $n = 2$.

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 nachwiesen 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 Feinstruktur-niveaus in Komponenten, die man zusammenfassend als *Hyperfeinstruktur* bezeichnet. Die wohlbekannteste, und in der Radioastronomie bedeutende 21cm Linie des Wasserstoffs rührt von der Hyperfeinaufspaltung des s -Niveaus. Die seit etwa 1979 verfügbare Technik

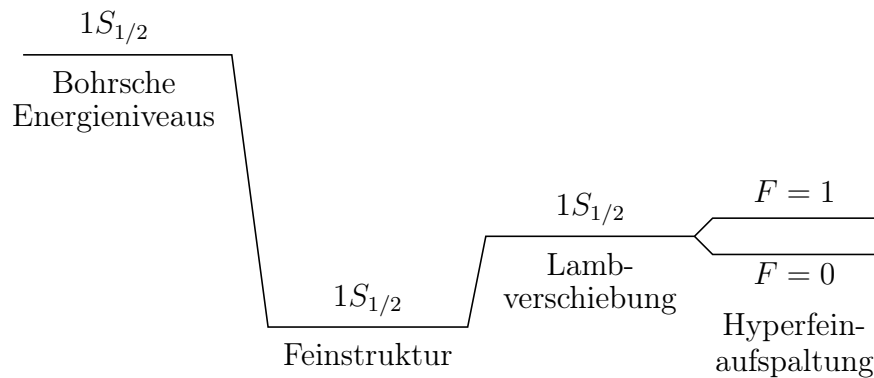


Abbildung 8.2: Die Feinstruktur, Lamb-Verschiebung und Hyperfeinstruktur des Grundzustandes.

der Laser-Spektroskopie hat die Auflösung der Spektrallinien wesentlich verbessert, da sie die Anwendung neuer Methoden (durchstimmbare Farblaser, Sättigungsspektroskopie, Polarisationspektroskopie) zur Vermeidung der Doppler-Verbreiterung ermöglicht. Die Auflösung der Hyperfeinstruktur gelingt mit der 2-Photonen-Spektroskopie.

Kapitel 9

Einführung in Pfadintegrale

Siehe das zweite Kapitel meines Skriptes über Pfadintegrale [22].

Literaturverzeichnis

- [1] V. Fock, *Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems*, Zeitschr. f. Phys. 61 (1930) 126
- [2] Latter, *Atomic Energy Levels for the Thomas-Fermi and Thomas-Fermi-Dirac Potential*, Phys. Rev. 99, (1955) 510
- [3] V. Fock und Petraschen, Phys. Zeits. Sowjetunion 6 (1934) 368
- [4] G.W. Kellner, *Die Ionisierungsspannung des Heliums nach der Schrödinger'schen Theorie*, Z. Phys. 44 (1928) 469
- [5] E. Hylleraas, *Reminiscences from early quantum mechanics of two-electron atoms*, Rev. Modern Phys. 35 (1963) 421
- [6] R.N. Hill, *Proof that the H^- Ion Has Only One Bound State*, Phys. Rev. Letters, 38 (1977) 643
- [7] E. U. Condon and G. H. Shortley, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge Univ. Press, London (1935)
- [8] C. L. Pekeris, *$1^1S, 2^1S$, and 2^3S States of H^- and of He* , Phys. Rev. 126 (1962) 1470
- [9]
- [10]
- [11] M. Born, *Quantenmechanik der Stoßvorgänge*, Zeitschrift für Physik 38 (1926) 803
- [12] G. Baym, *Lectures on Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, 1973, Seite 202
- [13] siehe z.B. Abramowicz, Seite 504 ff
- [14] N.F. Mott, *The Collision between Two Electrons*, Proc. Soc. London 126 (1930) 259
- [15] C. Gerthsen, Annalen der Physik 9 (1931) 769

- [16] J. Williams, Proceedings Royal Society London 128 (1930) 459
- [17] A. A. Michelson and E. W. Morley, Phil. Mag **24** (1887) 463; A. A. Michelson, **34** (1892) 280.
- [18] G. Hansen, Annalen der Physik **78** (1925) 558
- [19] 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.
- [20] P.A.M. Dirac, Proc. Roy. Soc. **A117** (1928) 610 und **118** (1928) 351.
- [21] D.M. Volkov, *Über eine Klasse von Lösungen der Diracschen Gleichung*, Zeitschrift für Physik 94 (1935) 250
- [22] A. Wipf, *Vorlesung über Pfadintegrale*, Kapitel 1 und Kapitel 2; zu finden unter <http://www.personal.uni-jena.de/~p5anwi/lectures/pfad/>

Index

- α -Matrizen, 133
- γ_5 , 130
- Übergänge, 55
 - erste Ordnung, 55
 - zweite Ordnung, 61
- Übergangsamplitude
 - 1. Ordnung, 55
- Übergangsrate, 57
- 3j-Symbole, 36

- Absorption, 61
- Adiabatische Approximation, 58
- Antikommutator, 123
- Antispinorfeld, 125
- Antiteilchen, 117, 118
- asymptotisch vollständig, 98
- Atommodelle, 21
- Ausschlussprinzip, 10
- Austauscheffekte
 - bei Streuung, 93
- Austauschenergie, 25
- Austauschentartung, 9
- Austauschterm, 23, 94
- Auswahlregel, 37
 - für Tensoroperatoren, 39

- Besselgleichung, 91
- Bilineare Tensorfelder, 130
- Bohr-Magneton, 42
- Bornsche Näherung, 74
- Bornsche Reihe, 73
- Bosonen, 9, 10

- Clebsch-Gordan Koeffizienten, 31, 33
- Compton-Wellenlänge, 111
- Coulombstreuung, 77
 - von α -Teilchen, 95

- Darstellung
 - irreduzible, 124
 - reduzible, 124
- Darstellung der Permutationsgruppe, 7
- Darwin-Term, 48, 142
- Differentialgleichung
 - hypergeometrische, 78
- Dipol-Operator, 65
- Dipolübergänge, 164
- Dirac-Hamiltonian, 133
- Diracalgebra, 123
- Diracbild, 52
- Diracgleichung, 121
 - nichtrelativistische Näherung, 138
 - radiale, 156
 - zweite Ordnungs-Gleichung, 146
- Diracscher Erhaltungssatz, 152
- Diracsee, 121
- Diractheorie
 - freie Lösungen, 134
- Drehimpuls
 - Produktzustände, 30
- Drehimpuls in Diractheorie, 142
- drehinvarianter Hamiltonian, 143
- Dreiecksregel, 32
- Dyson-Reihe, 55

- Eichpotential, 115

- Eichtransformation
 - in Diractheorie, 132
- Einstein-Koeffizient, 66
- Einteilchenoperator, 23
- Elektron, 122
- Elektronenfeld, 122
- Emission
 - induzierte, 61
- Ereignis, 104
- Erzeugende
 - der Lorentzgruppe, 108
- Exponentialpotential, 90
- Feinstruktur, 45, 150, 164
 - von pionischen Atomen, 119
- Feinstruktur-Formel, 162
- Feinstrukturkonstante, 118
- Feldstärketensor, 116
- Fermi-Energie, 13
- Fermienergie, 14
- Fermifläche, 14
- Fermigas
 - ideales, 13
- Fermionen, 9, 10
- Foldy-Wouthuyson-Transformation, 139
- Formfaktor, 76
- Gamma-Matrizen, 123
- Gesamtdrehimpuls
 - in chiraler Darstellung, 144
 - in Diractheorie, 150
- goldene Regel, 62
- goldene Regel von Fermi, 57
- Greensche Funktion
 - für Radialproblem, 85
- Grundzustand im TF-Atom, 21
- Gruppe
 - nicht-Abelsche, 7
 - spezielle lineare, 126
- Hamilton-Operator, 3
- Hartree-Fock Gleichungen, 26
- Hartree-Fock-Gleichungen, 26
- Hyperfeinstruktur, 49, 166
- identische Teilchen, 7, 10
- Impuls
 - relativistischer, 111
- Instabilität des Vakuums, 163
- Ionisierungsenergie, 163
- Jost-Funktion
 - für Exponentialpotential, 93
- Jostfunktion, 89
- Kernmagneton, 49
- Klein-Gordon Gleichung, 103, 110, 116
 - freie, 111
- Korrespondenzregel, 111
- kovariante Ableitung, 115
- Kummerfunktion, 78
- Ladung
 - elektrische, 113
- Ladungskonjugation, 117, 136
- Lamb-Verschiebung, 165
- Landé Faktor, 42
- Larmorfrequenz, 42
- Leiteroperatoren, 29
- Levinson-Theorem, 89, 90
- Lippmann-Schwinger-Gleichung, 69, 73
- Lorentzalgebra, 108
- Lorentzgruppe
 - quantenmechanische, 127
- Lorentztransformation, 106
- magnetisches Moment des Elektrons, 138
- Majorana-Darstellung, 136
- Mehrkörpersysteme, 3
- Metrik, 104

- Minkowskiraum, 104
 Mott-Streuung, 95
 Møller-Operatoren, 97
 negative Energielösungen, 113
 Noetherstrom, 112
 Operator
 symmetrischer, 9
 Operatoren
 symmetrische, 8
 optisches Theorem, 83
 Partialwellen, 81
 Pauli-Hamiltonian, 138
 Permutation, 7
 Permutationen, 8
 Pionische Atome, 118
 plötzliches Einschalten, 56
 Poincare Transformationen, 104
 Poincare-Gruppe, 106
 Polarisierung des Vakuums, 118
 Positron, 122
 Potentialstreuung, 69
 Produktzustand, 5
 Propagator, 53
 Rückwärtslichtkegel, 107
 Raumspiegelung, 107
 Raumzeitspiegelung, 107
 Resonanz, 61
 Resonanzen, 89
 Rutherford-Formel, 75, 76
 S-Matrix, 100, 101
 Schatten, 84
 Schiebeoperatoren auf ℓ_2 , 98
 Schrödingergleichung, 4
 Sirius B, 17
 skalare Operatoren, 37
 Slater-Determinante, 12
 Spektraldichte, 14, 58
 Spin
 des Elektrons, 145
 Spin-Bahn-Kopplung, 46, 142
 Spinor
 Dirac-konjugierter, 129
 Spinor-Harmonische, 156
 Spinoren
 Drehungen, 128
 Lorentztransformation, 127
 Raumspiegelungen, 128
 Spinorfeld, 125
 Störungen
 periodische, 60
 Störungstheorie
 zeitabhängige, 52
 Streuamplitude
 analytische Eigenschaften, 80
 Streumatrix, 55
 Streuoperator, 100, 101
 Streuphase
 für Exponentialpotential, 92
 Streuphasen, 82
 Streutheorie
 formale, 97
 Streuung
 elastische, 67, 75
 inelastische, 67
 von identischen Bosonen, 93
 von identischen Fermionen, 95
 Streuwinkel, 74
 Strom
 in Diractheorie, 133
 Teilchen
 identische, 7
 zusammengesetzte, 10
 Tensorfeld

- bilinear in ψ , 131
- Tensoroperator, 38
- Tensoroperatoren, 38
- Tensorprodukt, 4
- Thomas-Fermi
 - Gleichung, 18
 - Potential, 19
- Thomas-Fermi Atome, 17
- Thomas-Präzession, 46
- Thomas-Term, 142
- Translation, 106
- Transposition, 8

- Umkehrproblem, 90

- Vektorfeld, 131
- Verflechtungsrelation
 - für Møller-Operatoren, 99
- Volkov-Lösung, 147
- Vorwärtslichtkegel, 107

- Wechselwirkungsbild, 52
- weisser Zwerg, 16
- Wellenfunktion
 - antisymmetrische, 10
 - symmetrische, 10
- Weylgleichung, 128
- Wirkungsquerschnitt, 68
- Wronski-Determinante, 85

- Yukawa-Potential, 74

- zeitgeordnetes Produkt, 54
- Zeitumkehr, 107
- Zweiteilchenoperator, 24