Theoretische Physik V

Quantenmechanik II

Vorlesungsskript des WS2004-05 von

Heiko Rieger

3. März 2006

Inhaltsverzeichnis

1 Pfadintegrale **5**

1.1 Der Propagator 5
1.2 Pfadintegrale und statistische Mechanik 9
1.3 Semi-klassische Approximation 12
1.4 Anwendungen des Feynman'schen Pfadintegrales 15
1.4.1 Freies Teilchen 15
1.4.2 Quantenmechanik-Teilchen im Potentialtopf 16
1.4.3 Doppel-Mulden-Potential 18

2 Zweite Quantisierung **24**

2.1 "Identische" Teilchen und Mehrteilchenzustände 24
2.2 Bosonen 26
2.3 Fermionen 29
2.4 Feldoperatoren 31
2.5 Impulsdarstellung 33
2.6 Anwendung der zweiten Quantisierung 35
2.6.1 Spin-$\frac{1}{2}$ Fermion 35
2.6.2 Freie Bosonen 38
2.6.3 Schwach wechselwirkende Bosonen 40
2.6.4 Suprafluidität 44

3 Streuung und Response **47**

3.1 Streuung und Response 47
3.2 Korrelations- und Responsefunktionen 51
3.3 Dynamische Suszeptibilität 53
3.4 Dispersionsrelation 55
3.5 Spektraldarstellung 56
3.6 Fluktuations-Dissipationstheorem 56
3.7 Phasenkorrelationsfunktion 59

4 Quantisierung des klassischen Strahlungsfeldes **62**

4.1 Quantisierung des klassischen Strahlungsfeldes 62
4.2 Emission und Absorption von Photonen durch Atome 68
4.3 Streuung von Licht an Atomen 71
4.3.1 Elastische Streuung 71
4.3.2 Inelastische Streuung 72

5 Relativistische Quantenmechanik **73**
5.1 Lorentz-Transformationen 73
5.2 Klein-Gordon-Gleichung 74
5.3 Lagrange-Formalismus, Kanonische Quantisierungsregeln 79

6 Die Dirac-Gleichung **81**
6.1 Die Dirac-Gleichung 81
6.2 Lösungen der Dirac-Gleichung 85
6.3 Quantisierung des Dirac-Feldes 87
6.4 Transformationsverhalten von Spinoren 90
6.4.1 SL(2,C)und die Lorentzgruppe 92
6.4.2 Transformationsverhalten von Pauli-Spinoren unter Lorentz-Transformationen 93
6.4.3 Lorentz-Kovarianz der Dirac-Gleichung 98
6.4.4 Transformationsverhalten bilinearer Ausdrücke wie $\bar{\psi}\psi$, $\bar{\psi}\gamma^{\mu}\psi$ etc. 100
6.5 Nicht-relativistischer Grenzfall 102

7 Quantenelektrodynamik **106**
7.1 Quantisierung des elektromagnetischen Feldes 106
7.2 Normal- und zeitgeordnete Produkte 110
7.3 Elektromagnetische Kopplung und Störungsentwicklung 113
7.4 Die Feynman- Regeln 116

Kapitel 1

Pfadintegrale

Die Feynman'sche Formulierung der Quantenmechanik stellt nicht die Schrödinger Gleichung an den Anfang, sondern das Pfadintegral - eine explizite Formel für die Wahrscheinlichkeitsamplitude als Summe (Integral) über alle möglichen klassischen Pfade des Teilchens, gewichtet mit einem imaginären Gewicht. Diese Formulierung ist der Schrödingergleichung völlig äquivalent - zum Aufbau systematischer Näherungsverfahren (quasiklassische Näherung) und vor allem für numerische Zwecke (Quanten-Monte-Carlo) äußerst hilfreich.

1.1 Der Propagator

Beginnen wir mit der Einführung des Begriffs des **Propagators**:
Zur Erinnerung die Zeitentwicklung eines quantenmechanischen Zustandes

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)\,|\psi(t_0)\rangle\,; \quad \hat{U}(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)$$

$$\begin{aligned} \Longrightarrow \quad \psi(\mathbf{r},t) = \langle \mathbf{r}|\psi(t)\rangle &= \int d^3r'\,\langle \mathbf{r}|\,\hat{U}(t,t_0)\,\big|\mathbf{r}'\big\rangle\,\big\langle \mathbf{r}'|\psi(t_0)\big\rangle \\ &= \int d^3r' \mathcal{K}(\mathbf{r},t;\,\mathbf{r}',t_0)\psi(\mathbf{r}',t_0) \end{aligned}$$

Definition: Propagator

$$\boxed{\mathcal{K}(\mathbf{r},t;\,\mathbf{r}',t_0) = \langle \mathbf{r}|\,\hat{U}(t,t_0)\,\big|\mathbf{r}'\big\rangle = \langle \mathbf{r}|\,e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}\,\big|\mathbf{r}'\big\rangle} \qquad (t > t_0\,!)$$

Es gilt offenbar $\lim_{t\to t_{0^+}} \mathcal{K}(\mathbf{r},t;\,\mathbf{r}',t_0) = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$. Der Propagator $\mathcal{K}(\mathbf{r},t;\,\mathbf{r}',t_0)$ entspricht der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r},t)$ eines Teilchens, das zur Zeit t_0 bei $\mathbf{r}$ konzentriert war.

$$\psi(\mathbf{r},t_0) = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0) = \langle \mathbf{r}|\mathbf{r}_0\rangle \quad \Longrightarrow \quad \psi(\mathbf{r},t) \underset{t>t_0}{=} \mathcal{K}(\mathbf{r},t;\,\mathbf{r}_0,t_0)$$

Für $t < t_0$ setzen wir $\mathcal{K} = 0$

$$\rightarrow \mathcal{K}(\mathbf{r}, t;\, \mathbf{r}', t_0) = \Theta(t - t_0) \left\langle \mathbf{r} \right| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} \left| \mathbf{r}' \right\rangle$$

Eigenschaften: $(t > t_0)$
Schrödingergleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{K}(\mathbf{r}, t;\, \mathbf{r}', t_0) = \int d^3 r'' \left\langle \mathbf{r} \right| \hat{H} \left| \mathbf{r}'' \right\rangle \mathcal{K}(\mathbf{r}'', t;\, \mathbf{r}', t_0) + i\hbar\delta(t - t_0)\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

Kompositionseigenschaften $(t_0 < t_1 < t)$

$$\mathcal{K}(\mathbf{r}, t;\, \mathbf{r}', t_0) = \int d^3 r'' \mathcal{K}(\mathbf{r}, t;\, \mathbf{r}'', t_0) \mathcal{K}(\mathbf{r}'', t;\, \mathbf{r}', t_0)$$

denn

$$\begin{aligned} \left\langle \mathbf{r} \right| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} \left| \mathbf{r}' \right\rangle \Theta(t - t_0) &= \left\langle \mathbf{r} \right| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_1)} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_1-t_0)} \left| \mathbf{r}' \right\rangle \Theta(t - t_1)\Theta(t_1 - t_0) \\ &= \int d^3 r'' \left\langle \mathbf{r} \right| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_1)} \left| \mathbf{r}'' \right\rangle \Theta(t - t_1) \left\langle \mathbf{r}'' \right| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_1-t_0)} \left| \mathbf{r}' \right\rangle \Theta(t_1 - t_0) \end{aligned}$$

Erinnerung:
$\mathcal{K}(\mathbf{r}, t;\, \mathbf{r}', t_0)$ ist aufgrund des oben gesagten die **Wahrscheinlichkeitsamplitude** für den Übergang eines Teilchens, das zum Zeitpunkt t_0 am Ort $\mathbf{r}'$ war und zum späteren Zeitpunkt t am Ort $\mathbf{r}$ gefunden wird.

Andere Darstellung als Ortsdarstellung:
Sei $\{|n\rangle\}$ aus Eigenfunktion von $\hat{H}$: $\qquad \hat{H} \left| n \right\rangle = E_n \left| n \right\rangle$

$$\begin{aligned} \mathcal{K}(\mathbf{r}, t;\, \mathbf{r}', t_0) &= \sum_n \left\langle \mathbf{r} \right| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \left| n \right\rangle \left\langle n \right| e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t_0} \left| \mathbf{r}' \right\rangle \Theta(t - t_0) \\ &= \sum_n \left\langle \mathbf{r} | n \right\rangle \left\langle n | \mathbf{r} \right\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)} \Theta(t - t_0) \\ &= \sum_n \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}') e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)} \Theta(t - t_0) \end{aligned}$$

Kommen wir nun zur Pfadintegraldarstellung des Propagators. (Sei $\hat{H}$ nach wie vor zeitunabhängig und o.B.d.A. $t_0 = 0$):

Es ist

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) &= \lim_{N\to\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\frac{t}{N}} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\frac{t}{N}} \ldots e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\frac{t}{N}} \\ &\underset{(\varepsilon := t/N)}{=} \lim_{N\to\infty} \int \left(\prod_{n=1}^{N-1} d^3 r_n \right) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\varepsilon} \left| \mathbf{r}_1 \right\rangle \left\langle \mathbf{r}_1 \right| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\varepsilon} \left| \mathbf{r}_2 \right\rangle \ldots \left\langle \mathbf{r}_{N-1} \right| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\varepsilon} \end{aligned}$$

also folgt auch aus der Kompositionseigenschaft von $\mathcal{K}$:

$$\mathcal{K}(\mathbf{r}, t;\, \mathbf{r}_0, 0) = \lim_{\substack{N\to\infty \\ (\varepsilon := t/N)}} \int \left(\prod_{n=1}^{N-1} d^3 r_n \right) \underbrace{\left\langle \mathbf{r} \right| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\varepsilon} \left| \mathbf{r}_{N-1} \right\rangle \cdots \left\langle \mathbf{r}_1 \right| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\varepsilon} \left| \mathbf{r}_0 \right\rangle}_{= \mathcal{K}(\mathbf{r}, \varepsilon;\, \mathbf{r}_{N-1}, 0) \mathcal{K}(\mathbf{r}_{N-1}, \varepsilon;\, \mathbf{r}_{N-2}, 0) \cdots \mathcal{K}(\mathbf{r}_1, \varepsilon;\, \mathbf{r}_0, 0)}$$

Sei $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$ (andere Form für $\hat{H}$ analog):

$$\begin{aligned} \Longrightarrow \quad \mathcal{K}(\mathbf{r}_2, \varepsilon;\, \mathbf{r}_1, 0) &= \langle \mathbf{r}_2 | \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \right) |\mathbf{r}_1\rangle \\ &= \int d^3p \, \langle \mathbf{r}_2 | \mathbf{p} \rangle \, \langle \mathbf{p} | \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \right) |\mathbf{r}_1\rangle \end{aligned}$$

Es ist

$$e^{\varepsilon(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\varepsilon\hat{A}} e^{\varepsilon\hat{B}} + \mathcal{O}(\varepsilon^2)[\hat{A},\, \hat{B}].$$

Im Limes $\varepsilon \to 0$ kann man den Term $\propto \varepsilon^2$ vernachlässigen.

$$\begin{aligned} \Longrightarrow \mathcal{K}(\mathbf{r}_2, \varepsilon;\, \mathbf{r}_1, 0) &= \int d^3p_2 \, \langle \mathbf{r}_2 | \mathbf{p}_2 \rangle \underbrace{\langle \mathbf{p}_2 | \, e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}} e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar}V(\hat{\mathbf{r}})} \, |\mathbf{r}_1\rangle}_{= e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar}\frac{p_2^2}{2m}} e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar}V(\mathbf{r}_1)} \langle \mathbf{p}_2 | \mathbf{r}_1 \rangle} \\ &= \int \frac{d^3p_2}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(\frac{i\mathbf{p}_2 \cdot (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)}{\hbar} \right) \exp\left(-\frac{i\varepsilon}{\hbar} \left(\frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + V(\mathbf{r}_1) \right) \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \underset{\mathbf{r}_N = \mathbf{r}}{\Longrightarrow} \mathcal{K}(\mathbf{r}, t;\, \mathbf{r}_0, 0) &= \lim_{\substack{N\to\infty \\ (\varepsilon = t/N)}} \int \left(\prod_{n=1}^{N-1} \frac{d^3r_n d^3p_n}{(2\pi\hbar)^3} \right) \frac{d^3p_N}{(2\pi\hbar)^3} \\ &\quad \times \exp\left(\frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{n=1}^{N} \left[\frac{\mathbf{p}_n \cdot (\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n-1})}{\varepsilon} - \left(\frac{\mathbf{p}_n^2}{2m} + V(\mathbf{r}_{n-1}) \right) \right] \right) \end{aligned}$$

Wir ersetzen im Limes $N \to \infty$, i.e. $\varepsilon \to 0$:

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_n = \mathbf{p}(t_n = n\varepsilon) &\to \mathbf{p}(t) \\ \mathbf{r}_n = \mathbf{r}(t_n = n\varepsilon) &\to \mathbf{r}(t) \\ \frac{\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n-1}}{\varepsilon} &\to \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{r}(t) \end{aligned}$$

und erhalten so die **Pfadintegraldarstellung des Propagators in Hamiltonform**:

$$\mathcal{K}(\mathbf{r}, t;\, \mathbf{r}_0, 0) = \int_{\mathbf{r}(0)=\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}(t)=\mathbf{r}} \mathcal{D}\mathbf{r}(t)\mathcal{D}\mathbf{p}(t) \, \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \left(\mathbf{p}\frac{\partial}{\partial t'}\mathbf{r}(t') - \hat{H}\left(\mathbf{p}(t'),\, \mathbf{r}(t')\right) \right) \right\}$$

wobei

$$\mathcal{D}\mathbf{p}(t) = \lim_{N\to\infty} \prod_{n=1}^{N} \frac{d^3p_n}{(2\pi\hbar)^3}$$

Nach Integration über $\mathbf{p}$ erhält man das **Pfadintegral in Lagrangeform**:

$$
\begin{aligned}
& \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int d^3p_n \exp\left\{\frac{i\mathbf{p}_n\cdot(\mathbf{r}_n-\mathbf{r}_{n-1})}{\hbar}-\frac{i\varepsilon}{\hbar}\frac{\mathbf{p}_n^2}{2m}\right\} \\
= & \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int d^3p_n \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\left[\frac{\varepsilon}{2m}\left(\mathbf{p}_n-\frac{(\mathbf{r}_n-\mathbf{r}_{n-1})m}{\varepsilon}\right)^2-\frac{m(\mathbf{r}_n-\mathbf{r}_{n-1})^2}{2\varepsilon}\right]\right\} \\
= & \underbrace{\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\left(\frac{2\pi m\hbar}{i\varepsilon}\right)^{3/2}}_{=\left(\frac{m}{2\pi i\varepsilon}\right)^{3/2}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2\varepsilon}(\mathbf{r}_n-\mathbf{r}_{n-1})^2\right\}
\end{aligned}
$$

$$
\Longrightarrow \qquad \boxed{\mathcal{K}(\mathbf{r},t;\,\mathbf{r}_0,0)=\int_{\mathbf{r}(0)=\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}(t)=\mathbf{r}}\mathcal{D}\mathbf{r}(t)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\left(\frac{m}{2}\dot{\mathbf{r}}^2(t)-V(\mathbf{r}(t))\right)\right\}}
$$

mit

$$
\mathcal{D}\mathbf{r}(t)=\lim_{N\to\infty}\prod_{n=1}^{N-1}\left(\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}\right)^{3/2}d\mathbf{r}_n
$$

kurz

$$
\boxed{\mathcal{K}(\underbrace{b}_{\mathbf{r}_b(t_b)},\underbrace{a}_{\mathbf{r}_a(t_a)})=\int_a^b\mathcal{D}\mathbf{r}(t)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}[\mathbf{r}(t)]\right)} \qquad (*)
$$

mit der Wirkung

$$
\mathcal{S}[\mathbf{r}(t)]=\int_{t_a}^{t_b}dt\mathcal{L}(\mathbf{r},\,\dot{\mathbf{r}},\,t)
$$

Beachte unter $(*)$ verstehen wir immer den **Grenzwert**.

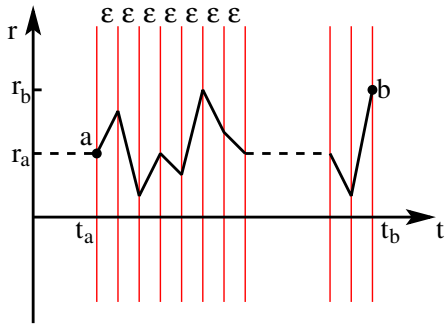
$$
\begin{aligned}
\mathcal{K}(b,\,a) \underset{\varepsilon=\frac{t_b-t_a}{N}}{=} \lim_{N\to\infty}\int d\mathbf{r}_{N-1}\cdots d\mathbf{r}_1 \qquad & \left(\frac{m}{(2\pi i\hbar\varepsilon)}\right)^{3N/2} \\
\times \quad & \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{n=1}^{N-1}\varepsilon\left[\frac{m}{2}\left(\frac{\mathbf{r}_{n+1}-\mathbf{r}_n}{\varepsilon}\right)^2-V(\mathbf{r}_n)\right]\right\}
\end{aligned} \qquad (**)
$$

Die $N-1$ Punkte zwischen festem a und b könnnen durch Kurven miteinander verbunden werden. Jeder Integrationspunkt in dem $(N-1)$-dim. Integral in $(**)$ entspricht daher einem Pfad. Die Integration entspricht einer Summe über alle solche Pfade.

Mit $N\to\infty$, $\varepsilon=\frac{t_b-t_a}{N}\to 0$ kann die Summe im Exponenten von $(**)$ als die Riemann'sche Summe für das Integral

$$
\int_{t_a}^{t_b}dt\left\{\frac{m}{2}\left(\frac{d\mathbf{r}}{dt}\right)^2-V(\mathbf{r})\right\}=\int_{t_a}^{t_b}\mathcal{L}(\mathbf{r},\,\dot{\mathbf{r}})dt\equiv\mathcal{S}\left[\mathbf{r}(t)\right]
$$

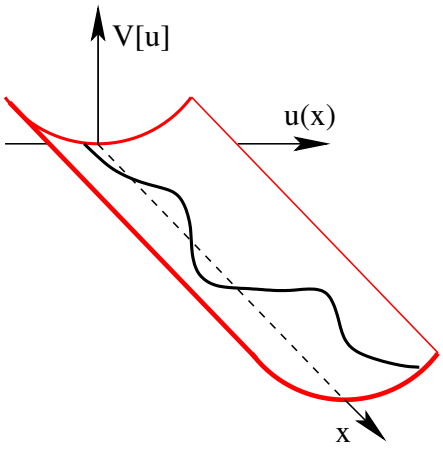
interpretiert werden, welches die klassische Wirkung entlang des Pfades von a nach b ist.



1.2 Pfadintegrale und statistische Mechanik

Das Pfadintegral etabliert eine Verbindung zwischen Quantenmechanik und klassischer (und quantenmechanischer) statistischer Mechanik, deren Wichtigkeit für alle Gebiete der Feldtheorie sowie der statistischen Physik kaum übertrieben werden kann.

Um diese Verbindung sichtbar zu machen, betrachten wir ein klassisches eindimensionales Kontinuum-Modell eines flexiblen (elastischen) Fadens der Länge L im Potential V.



Transversale Fluktuation des Fadens seien bestraft durch die Linsenspannung σ,

$$\begin{aligned} u \ll 1: \quad \delta V_\sigma &= \sigma\left[(dx^2 + du^2) - dx\right] \\ &\approx \frac{\sigma}{2} dx \left(\frac{du}{dx}\right)^2 \end{aligned}$$

$$\Longrightarrow \quad V_\sigma[u] = \int_0^L \delta V_\sigma = \frac{1}{2}\int_0^L dx\, \sigma \left(\frac{du}{dx}\right)^2$$

sowie das externe Potential V:

$$V_{\text{ext}}[u] = \int_0^L dx\, V[u(x)]$$

$$\Longrightarrow \quad \overline{V} = V_\sigma + V_{\text{ext}} = \int_0^L dx \left[\frac{\sigma}{2}\left(\frac{du}{dx}\right)^2 + V(u)\right]$$

$\Longrightarrow$ Zustandssumme

$$\boxed{\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}u \, \exp\left[-\beta \int_0^L dx \left(\frac{\sigma}{2}\left(\frac{du}{dx}\right)^2 + V(u)\right)\right]}$$

Vgl. ergibt: Die Zustandssumme des klassischen Systems stimmt überein mit der quantenmechanischen Amplitude (für Teilchen im Potential V).

$$\mathcal{Z} = \int dq \int_{\substack{q=a \\ a=b \text{ (Faden m. period. R.B.)}}}^{b} \mathcal{D}q \, \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}\left[q(t)\right]\right) \Big|_{t_a=0}^{t_b=-iL}; \; \beta = \frac{1}{\hbar}, \, \tau = -it$$

Explizit: Betrachte eine Quanten-Propagation in imaginärer Zeit, i.e.

$$\underset{\text{(Positivität von } \hat{H} \text{ angenommen)}}{e^{-it\hat{H}/\hbar} \to e^{-\tau\hat{H}/\hbar}} \qquad \text{oder} \quad t \to -i\tau$$

Dieselbe Konstruktion wie beim Feynman'schen Pfadintegral führt wieder zu einem Pfadintegral, nur

- Lagrangian wird entlang der imaginären Zeitachse integriert

$$t' \to -i\tau' \in [0, \, -i\tau]$$

- das Vorzeichen der kinetischen Energie dreht sich um

$$(\partial_{t'} q)^2 \to -(\partial_{\tau'} q)^2$$

Identifiziere $\tau \to L, \; \hbar \to T$ (Temperatur) fertig.

Bemerkung:
Die Wichtigkeit der Verknüpfung von Quantenmechanik und statistischer Physik.
Äquivalenz: d-dim. quantenmechanische Systeme $\longleftrightarrow$ $d+1$-dim. klassische Systeme.

Übergangs-Amplituden in imaginärer Zeit entsprechen Zustandssummen
$\rightsquigarrow$ Real-Zeit-Dynamik und Quanten-Stat.-Physik können auf gemeinsame Basis gestellt werden.

Wick-Rotation $t \to -i\tau$.

Beispiel:
Freies Teilchen: $V(\mathbf{r}) = 0$

$$\begin{aligned}
\Longrightarrow \quad \mathcal{K}_0(\mathbf{r}, t; \, \mathbf{r}_0, 0) &= \int_{\mathbf{r}(0)=\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}(t)=\mathbf{r}} \mathcal{D}\mathbf{r}(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' \frac{m}{2}\dot{\mathbf{r}}^2(t)\right) \\
&= \lim_{N\to\infty} \int \prod_{n=1}^{N-1} \left[\left(\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}\right)^{3/2} d\mathbf{r}_n\right] \exp\left[\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2\varepsilon}\sum_{n=1}^{N}\left(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n-1}\right)^2\right], \quad (\mathbf{r}_N = \mathbf{r}\,!)
\end{aligned}$$

Nun ist

$$\begin{aligned}\int_\infty^\infty \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{3/2} d\mathbf{r}_1 \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2\varepsilon}\left[(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_0)^2+(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1)^2\right]\right\}\\ = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar(2\varepsilon)}\right)^{3/2} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2(2\varepsilon)}\left[(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_0)^2\right]\right\}\end{aligned}$$

analog

$$\begin{aligned}\int_\infty^\infty \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}\right)^{3/2} d\mathbf{r}_2 \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2\varepsilon}\left[(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_0)^2+(\mathbf{r}_3-\mathbf{r}_2)^2\right]\right\}\\ = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar(3\varepsilon)}\right)^{3/2} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2(3\varepsilon)}\left[(\mathbf{r}_3-\mathbf{r}_0)^2\right]\right\}\end{aligned}$$

etc., nach $N-1$ Integrationen:

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_0(\mathbf{r},t;\,\mathbf{r}_0,0) &= \left(\frac{m}{2\pi i\hbar(N\varepsilon)}\right)^{3/2} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2(N\varepsilon)}\left[(\mathbf{r}_N-\mathbf{r}_0)^2\right]\right\}\\ &= \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{3/2} \exp\left\{\frac{i}{2\hbar}\frac{m}{t}\left[(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)^2\right]\right\}\\ &= \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{3/2} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\mathbf{r}-\mathbf{r}_0}{t}\right)^2 t\frac{m}{2}\right\}\end{aligned}$$

Klassisch bewegt sich das Teilchen mit konstanter Geschwindigkeit $\dot{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}-\mathbf{r}_0}{t}$. Energie = Kinetische Energie = $\frac{m}{2}\dot{\mathbf{r}}^2 = \frac{m}{2}(\frac{\mathbf{r}-\mathbf{r}_0}{t})^2$ von $\mathbf{r}_0$ nach $\mathbf{r}$. Klassische Wirkung für diesen Pfad

$$\mathcal{S}_c^{(0)} = \int_0^t \mathcal{L}dt = \int_0^t \frac{m}{2}\dot{\mathbf{r}}^2 dt = \frac{m}{2}\left(\frac{\mathbf{r}-\mathbf{r}_0}{t}\right)^2 t$$

$\Longrightarrow$

$$\boxed{\mathcal{K}_0(\mathbf{r},t;\,\mathbf{r}_0,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i\hbar m^{-1}t}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}_c^{(0)}}\,\Theta(t)}$$

Übung:

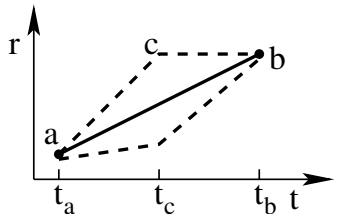
a) Berechne die zeitliche Entwicklung eines Gauß-Paketes

$$\psi(\mathbf{r}_0,0) = \frac{1}{(2\pi\sigma)^{3/4}} e^{-\mathbf{r}_0^2/\sigma} \quad \rightarrow \quad \psi(\mathbf{r},t) = \int d\mathbf{r}_0 \mathcal{K}(\mathbf{r},t;\,\mathbf{r}_0,0)\,\psi(\mathbf{r}_0,0)$$

b) Zeige durch explizite Integration, dass

$$\mathcal{K}(b,\,a) = \int dx_c\, \mathcal{K}(b,\,c)\mathcal{K}(c,\,a), \qquad (t_a < t_c < t_b)$$

gilt, wobei die Integration über alle Linien in der Figur geht.



1.3 Semi-klassische Approximation

Pfadintegrale erweitern *nicht* den Zoo *exakt* lösbarer Quantenmechanik-Modell - die bleiben selten - aber erlauben eine wesentlich höhere Flexibilität, Approximationsverfahren zu entwickeln. Pfadintegralformulierung ist besonders stark in Fällen, wo semiklassische Grenzfälle von Quantentheorien betrachtet werden.

Betrachte

$$\mathcal{K}(b,\, a) = \int_a^b \mathcal{D}\mathbf{r}(t)\, \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}[\mathbf{r}(t)]\right) \qquad (*)$$

im Limes $\hbar \to 0$. In diesem Fall wird das Pfadintegral dominiert von Pfadintegralen mit stationärer Wirkung - nicht-stationäre Beiträge zum Integral bewirken massive Phasen-Fluktuationen, die sich größtenteils zu Null mitteln. Da der Exponent in $(*)$ gerade ein klassisches Wirkungsfunktional (hier in Lagrange-Form) ist, sind die Pfadkonfigurationen, die das Pfadintegral extremalisieren, gerade die Lösungen der klassischen Bewegungsgleichung:

$$\delta\mathcal{S}[\overline{q}] = 0 \quad \Rightarrow \quad \left(\frac{d}{dt}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{q}} - \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial q}\right)|_{q=\overline{q}} = 0$$
$$+ \text{ Rand. Bed.} \quad \overline{q}(0) = q_{\mathrm{I}}(= a),\ \overline{q}(t) = q_{\mathrm{F}}(= b)$$

Statt der euklidischen Ortskoordinaten $\mathbf{r}(t)$ benutzen wir im Folgenden die im Lagrange-Formalismus üblichen generalisierten Koordinaten $q(t)$, die kanonisch konjugierte Impulse bleiben $p(t)$.

Beachte: Die Randbedingungen spezifizieren i.a. nicht *eindeutig* eine Lösung - d.h. im Allgemeinen gibt es mehrere Lösungen.

Aber: Die Quantenmechanik verschwindet nicht vollständig - wie bei der Sattelpunktintegration nicht nur der Sattelpunkt, sondern auch die Fluktuationen um ihn herum tragen dazu bei. Zumindest die Gauß'schen (quadratischen) Fluktuationen um den Punkt stationärer Phase müssen notwendigerweise ausintegriert werden.

Beim Pfadintegral involvieren die Fluktuationen *nicht*-klassische Trajektorien (d.h. sie lösen *nicht* die klassische Bewegungsgleichung) –den Effekt der Quantenmechanik.

Allgemein: **Näherung der stationären Phase** für generelle Funktionalintegrale.

Betrachte

$$\int \mathcal{D}(x) e^{-F[x]}$$

wobei $\mathcal{D}(x) = \lim_{N\to\infty} \prod_{n=1}^{N} dx_n$, $(x_1, \cdots, x_N) \underset{N\to\infty}{\to} x(t)$ ein Funktional-Maß, das durch den Kontinuums-Limes eines endlich-dimensionalen Integrationsraumes gewonnen wurde.

a) Finde die "Punkte" der stationären Phase, i.e. Konfigurationen $\overline{x}$, die die Bedingungen verschwindender Funktionalableitungen erfüllen.

$$\frac{\partial F[\overline{x}]}{\partial \overline{x}} \equiv \lim_{\varepsilon} \frac{F\left[x(t) + \varepsilon y(t)\right] - F[x(t)]}{\varepsilon} = 0$$

Können viele sein - betrachte zunächst nur eine.

b) Entwickle das Funktional bis zur 2. Ordnung um $\overline{x}$

$$F[x] = F[\overline{x} + y] = F[\overline{x}] + \frac{1}{2} \int dt dt' y(t') A(t,\, t') y(t) + \cdots$$

wobei

$$A(t,\, t') = \frac{\partial^2 F[x]}{\partial x(t) \partial x(t')} \mid_{x=\overline{x}}$$

die 2. Funktionalableitung ist (keine 1. Ableitung wg. Stationarität von $\overline{x}$).

c) Prüfe, ob Operator $A(t,\, t')$ positiv definiert ist. Wenn nicht, gibt es ein Problem, da die Integration über Gauß'sche Fluktuationen unten divergiert. Für positive $\hat{A}$ jedoch kann die Funtkional-Integration über y durchgeführt werden:

$$\int \mathcal{D}x e^{-F[x]} \simeq e^{-F[\overline{x}]} \det \left(\frac{\hat{A}}{2\pi} \right)^{-1/2}$$

d) Schließlich, wenn es mehrere Konfigurationen $\overline{x}_i$ stationärer Phasen gibt, müssen die jeweiligen Beiträge addiert werden.

$$\int \mathcal{D}x e^{-F[x]} \simeq \sum_i e^{-F[\overline{x}_i]} \det \left(\frac{\hat{A}}{2\pi} \right)^{-1/2}$$

Angewandt auf die Lagrange-Form des Feynman-Pfadintegrales kann dieses Programm sofort implementiert werden:

Def. $\varepsilon(t) = q(t) - \overline{q}(t)$ als Abweichung eines allgemeinen Pfades $q(t)$ vom nahegelegenen klassischen Pfad $\overline{q}(t)$ gilt, dann (angenommen nur 1. klassische Lösung)

$$\mathcal{K}(q_{\mathrm{F}},\, q_{\mathrm{I}}) \simeq e^{i\mathcal{S}[\overline{q}]/\hbar} \int_{\varepsilon(0)=\varepsilon(t)=0} \mathcal{D}\varepsilon \exp\left[\frac{i}{2\hbar} \int_0^t dt' \int_o^t dt'' \varepsilon(t') \frac{\delta^2 \mathcal{S}[q]}{\delta q(t') \delta q(t'')} \mid_{q=\overline{q}} \varepsilon(t'') \right]$$

Für Potential-Lagrangians $\mathcal{L}(q, \dot{q}) = \frac{m}{2}\dot{q}^2 - V(q)$ kann die 2. Funktional-Ableitung direkt berechnet werden (z.B. durch Entwicklung der Wirkung in einer Taylorekce in ε ($\to$ Übung).

$$\rightsquigarrow \quad \frac{1}{2} \int_0^t dt \int dt' \varepsilon(t) \frac{\delta^2 \mathcal{S}(q)}{\delta q(t) \delta q(t')} \varepsilon(t') = -\frac{1}{2} \int dt \varepsilon(t) \left[m\partial_t^2 + V''[\overline{q}(t)] \right] \varepsilon(t')$$

Das heißt, die Gauß'sche Integration über ε ergibt die Wurzel der Determinante von $m\partial_t^2 + V''[\overline{q}(t)]$ - interpretiert als Operator im Raum der Funktionen $\varepsilon(t)$ mit Randbedingung $\varepsilon(0) = \varepsilon(t) = 0$.

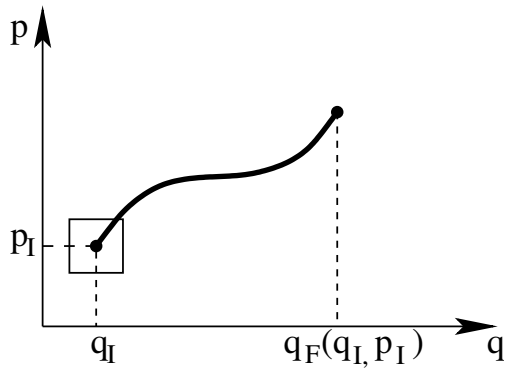
Ganz allgemein würden wir

$$\langle q_{\rm F}|\, e^{-i\hat{H}t/\hbar}\, |q_{\rm I}\rangle \simeq \det\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\frac{\partial^2 \mathcal{S}[\overline{q}]}{\partial q_{\rm I}\partial q_{\rm F}}\right)^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}[\overline{q}]}$$

für die semi-klassische Auswertung der Übergangsamplitude (für einen Zustand mit Anfangskoordinaten $q_{\rm I}$ und Endkoordinaten $q_{\rm F}$) erhalten. Statt einer detaillierten Herleitung machen wir hier nur eine heuristische Interpretation dieses Resultates, die recht einfach ist: $\mathcal{P}(q_{\rm F},\, q_{\rm I},\, t) = \left|\langle q_{\rm F}|\, e^{-i\hat{H}t/\hbar}\, |q_{\rm I}\rangle\right|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit für ein Teilchen, das mit Koordinaten $q_{\rm I}$ startet, nach einer Zeit t mit $q_{\rm F}$ zu enden.
Die semi-klassische Rechnung ergibt

$$\mathcal{P}(q_{\rm F},\, q_{\rm I},\, t) = \left|\det\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\frac{\partial^2 \mathcal{S}[\overline{q}]}{\partial q_{\rm I}\partial q_{\rm F}}\right)\right|$$

Um diese Voraussage zu verstehen, beachte man, dass für fixierte Anfangskoordinaten $q_{\rm I}$ die Endkoordinaten $q_{\rm F}(q_{\rm I},\, p_{\rm I})$ eine Funktion auch des Anfangsimpulses $p_{\rm I}$ ist.



Die klassische Wahrscheinlichkeitsdichte $\mathcal{P}(q_{\rm F},\, q_{\rm I})$ kann somit mit der Wahrscheinlichkeitsdichte $\tilde{\mathcal{P}}(q_{\rm I},\, p_{\rm I})$ für ein Teilchen mit Anfangs-Phasenraumkoordinaten $(q_{\rm I},\, p_{\rm I})$ verknüpft werden:

$$\begin{aligned}\mathcal{P}(q_{\rm I},\, q_{\rm F})dq_{\rm I}dq_{\rm F} &= \mathcal{P}(q_{\rm I},\, q_{\rm F})\left|\det\frac{\partial q_{\rm F}}{\partial p_{\rm I}}\right| dq_{\rm I}dp_{\rm I} \\ &= \tilde{\mathcal{P}}(q_{\rm I},\, p_{\rm I})dq_{\rm I}dp_{\rm I}\end{aligned}$$

In der Quantenmechanik können wir nicht sagen, dass ein Teilchen die Koordinaten $(q_{\rm I},\, p_{\rm I})$ hat. Alles was wir sagen können ist, dass das Teilchen anfangs in einer "Planck-Zelle" um $(q_{\rm I},\, p_{\rm I})$ herum zentriert, mit Volumen $(2\pi\hbar)^d$, war - d.h. $\tilde{\mathcal{P}}(q_{\rm I},\, p_{\rm I}) = 1/(2\pi\hbar)^d$ in $\square$ in obiger Figur, sonst $\emptyset$.

$$\Longrightarrow \quad \mathcal{P}(q_{\rm I},\, q_{\rm F}) = \left|\det\frac{\partial q_{\rm F}}{\partial p_{\rm I}}\right| (2\pi\hbar)^{-d}$$

Schließlich, da $p_{\mathrm{I}} = -\partial\mathcal{S}/\partial q_{\mathrm{I}}$, erhalten wir so:

$$\mathcal{P}(q_{\mathrm{I}},\, q_{\mathrm{F}}) = \left|\det\left(-\frac{1}{2\pi\hbar}\frac{\partial^2\mathcal{S}}{\partial q_{\mathrm{I}}\partial q_{\mathrm{F}}}\right)\right|$$

Bevor wir fortfahren, rekapitulieren wir noch einmel die wesentlichen Schritte in der Konstruktion des Pfadintegrals:

Betrachte eine quantenmechanische Übergangsamplitude $\langle\psi|\, e^{-i\hat{H}t/\hbar}\,|\psi'\rangle$, wobei t reell, imaginär ($t = -i\tau,\ \tau$ reell) oder komplex ($t = z \in \mathbb{C}$) sein kann. Zur Konstruktion des Pfadintegrals:

a) Unterteile das "Zeit"-Intervall in $N \gg 1$ Schritte:

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \left[e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar}\right]^N, \quad \Delta t = t/N$$

b) Sortiere die Operatoren in der Entwicklung eines jeden Faktors $e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar}$ um gemäß

$$e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} = 1 + \Delta t \sum_{mn} c_{mn}\hat{A}^m\hat{B}^n + \mathcal{O}(\Delta t^2)$$

wobei die Eigenzustände $|a\rangle$, $|b\rangle$ von $\hat{A}$, $\hat{B}$ bekannt sind und die Koeffizienten c_{mn} (komplexe) Zahlen sind. (In der Quantenmechanik-Anwendung oben waren $\hat{A} = \hat{p}$ und $\hat{B} = \hat{q}$ oder $\hat{r}$.)

c) Füge Darstellungen der **1** ein:

$$\begin{aligned} e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} &\rightarrow \sum_{a,\,b} |a\rangle\langle a| \left(1 + \Delta t \sum_{mn} \hat{A}^m\hat{B}^n + \mathcal{O}(\Delta t^2)\right) |b\rangle\langle b| \\ &= \sum_{a\,b} |a\rangle\langle a|\, e^{-i\hat{H}(a,\,b)\Delta t/\hbar}\,|b\rangle\langle b| \end{aligned}$$

wobei $\hat{H}(a,\, b)$ der bei den Eigenwerten von $\hat{A}$ und $\hat{B}$ ausgewertete Hamiltonian ist.

d) Ordne die Terme im Exponenten um: Aufgrund des "Mismatches" der Eigenzustände bei benachbarten Zeitscheiben n und $n+1$ erscheint nicht nur der Hamiltonian $H(a,\, b)$, sondern auch Summen über Differenzen von Eigenwerten.

e) Führe Kontinuumslimes durch.

1.4 Anwendungen des Feynman'schen Pfadintegrales

1.4.1 Freies Teilchen

(s.o.) (Anfangskoordinaten q_{I}, Endkoordinaten q_{F})

$$\begin{aligned} & G_{\mathrm{free}}(q_{\mathrm{F}},\, q_{\mathrm{I}};\, t) \quad (= \mathcal{K}_0(q_{\mathrm{F}}, t;\, q_{\mathrm{I}}, 0)) \\ = \;& \langle q_{\mathrm{F}}|\, e^{-\frac{i}{\hbar}t\frac{\hat{p}^2}{2m}}\,|q_{\mathrm{I}}\rangle\,\Theta(t) \\ = \;& \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{d/2} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\frac{mt}{2}\left(\frac{q_{\mathrm{F}} - q_{\mathrm{I}}}{t}\right)^2\right] \end{aligned}$$

[Vergleiche mit Lösungen der klassischen Diffusionsgleichung für $\mathcal{P}$:

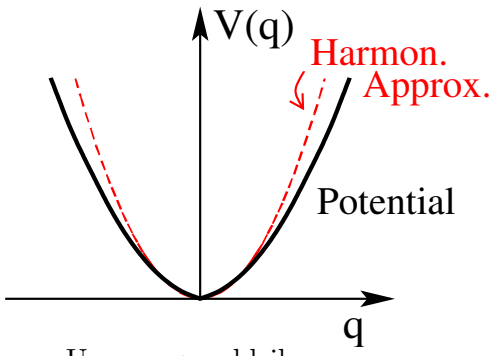
$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \tau} = \frac{D}{2}\frac{\partial^2 \mathcal{P}}{\partial x^2} \quad \underset{x(0)=0}{\rightsquigarrow} \quad \mathcal{P}(x,\,\tau) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D\tau}} \exp\left(-\frac{x^2}{2D\tau}\right)$$

$$\text{SG:} \quad \frac{\hbar}{i}\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad \Longrightarrow \quad \boxed{\tau = it,\ D = \tfrac{\hbar}{m}}$$

]

1.4.2 Quantenmechanik-Teilchen im Potentialtopf

$$V(q) = V(-q), \quad V(0) = 0$$



Wahrscheinlichkeitsamplitude für das Teilchen am Ursprung zu bleiben:

$$\begin{aligned} G(0,0;t) &= \langle q_{\mathrm{F}} = 0 | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} t \underbrace{\hat{H}}_{\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{V}} \right) | q_{\mathrm{I}} = 0 \rangle \, \Theta(t) \\ &= \int_{q(t)=q(0)=0} \mathcal{D}q \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \underbrace{\mathcal{L}(q,\,\dot{q})}_{\mathcal{L}=\frac{m\dot{q}^2}{2}-V(q)} \right] \end{aligned}$$

Wir wollen das Pfadintegral in der semi-klassischen Approximation berechnen. Dazu zunächst Lösungen der klassischen Bewegungsgleichung (Euler-Lagrange)

$$m\ddot{q} = -V'(q)$$

Randbedingung: $q(t) = q(0) = 0 \quad \Rightarrow\ \overline{q}(t) = 0$ Minimum der klassischen Wirkung.
Angenommen, dies sei die einzige Lösung (i.a. falsch), dann ergibt die semi-klassische Approximation

$$G(0,0;t) = \int_{\varepsilon(0)=\varepsilon(t)=0} \mathcal{D}\varepsilon \exp\left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \varepsilon(t') \left(\frac{\partial^2}{\partial t'^2} + \omega^2 \right) \varepsilon(t') \right\}$$

wobei $m\omega^2 = V''(0)$ per def.
Beachte, dass hierbei der Betrag der Sattelpunkts-Lösung $\mathcal{S}[\overline{q}] = 0$!

Die Gauß'sche Integration über ε führt zu

$$G(0,0;t) \simeq J \det\left(-\frac{m}{2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{m\omega^2}{2} \right)^{-1/2}, \quad J: \text{ absorbierte Vorfaktoren}$$

Die Determinante berechnet man entweder durch Diskretisierung des Pfadintegrals (siehe Übung) oder durch Darstellung als ein Produkt über Eigenwerte. Hier werden diese bestimmt durch

$$\left(-\frac{m}{2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{m\omega^2}{2}\right) f_n = E_n f_n \qquad \text{mit } f_n(t) = f_n(0) = 0$$

(Erinnerung an SG für freies Teilchen im Kasten der Länge t).
Dies führt zu einem vollständigen Satz von Lösungen dieser Gleichung:

$$f_n(t') = \sin\left(\frac{n\pi t'}{t}\right), \quad n = 1, 2, \cdots$$

mit Eigenwerten $E_n = m\left[(n\pi/t)^2 - \omega^2\right]/2$.

$$\begin{aligned}
\det\left(-\frac{m}{2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{m\omega^2}{2}\right)^{-1/2} &= \prod_{n=1}^{\infty}\left(\frac{m}{2}\left(\frac{n\pi}{t}\right)^2 - \frac{m\omega^2}{2}\right)^{-1/2} \\
&= \prod_{n=1}^{\infty}\left(\sqrt{\frac{m}{2}}\frac{n\pi}{t}\right)^{-1}\left(1 - \left(\frac{\omega t}{n\pi}\right)^2\right)
\end{aligned}$$

Wir nutzen nun aus, dass wir

(a) die Übergangswahrscheinlichkeit des freien Teilchens kennen und

(b) letztere mit G im Falle $\omega = 0$ übereinstimmt.

$$\begin{aligned}
G(0,0;t) &= \frac{G(0,0;t)}{G_{\text{free}}(0,0;t)} G_{\text{free}}(0,0;t) \\
&= \prod_{n=1}^{\infty}\left[1 - \left(\frac{\omega t}{n\pi}\right)^2\right]^{-1/2}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{1/2}\Theta(t)
\end{aligned}$$

Beachte: Die Konstante J sowie $\prod_{n=1}^{\infty}\left(\sqrt{\frac{m}{2}}\frac{n\pi}{t}\right)^{-1}$ ist G und G_{free} gemeinsam, kürzt sich also weg.

Nun gilt die mathematische Identität

$$\prod_{n=1}^{\infty}\left(1 - \left(\frac{x}{n\pi}\right)^2\right)^{-1} = \frac{x}{\sin x}.$$

$\Longrightarrow$

$$\boxed{G(0,0;t) \simeq \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega t)}}\Theta(t)}$$

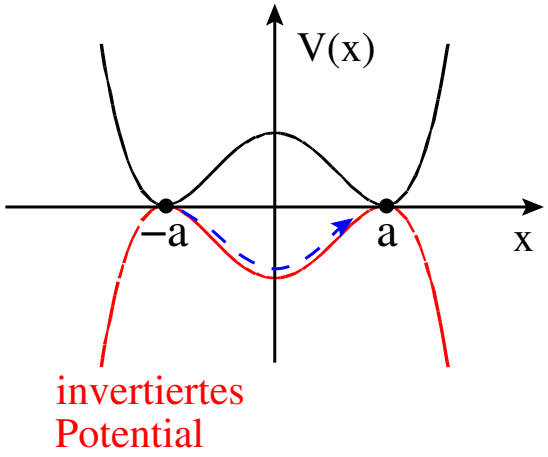
$G(0,0,t)$ stimmt *exakt* überein mit dem Resultat einer Quantenmechanik-Rechnung für die Übergangsamplitude in einem *parabolischen* Potenzial (harmonischer Oszillator).

Regel:
Die semi-klassiche Approximation ist exakt für quadratische Hamiltonians, für welche das Pfadintegral selber quadratisch (Gaußisch) ist. Höhere Beiträge zu einer semiklassischen Entwicklung existieren nicht.

Die obige Rechnung demonstriert auch, wie Koordinaten-Fluktuationen um eine komplett statische Lösung die Null-Punkts-Fluktuations-Physik installieren können, die charakteristisch für quantenmechanisch gebundene Zustände ist.

1.4.3 Doppel-Mulden-Potential

Wir betrachten nun die Bewegung eines Teilchens im Doppel-Mulden-Potential.
Unser Ziel wird es sein, die quantenmechanische Wahrscheinlichkeits-Amplitude für ein Teilchen zu berechnen, entweder in einem der beiden Minima zu bleiben *oder* von einem Minimum zum anderen zu gehen. Es versteht sich, daß der für das Teilchen erreichbare Energie-Bereich klar unterhalb der Potentialbarriere ist, d.h. der quantenmechanische Transfer zwischen den Minima ist durch Tunneln.



Auf den ersten Blick ist es völlig unklar, welche Art von Lösung mit stationärer Phase als Basis für eine Beschreibung von Quanten-Tunneln dienen könnte: es scheint keinen klassischen Pfad zu geben, der beide Minima verbindet.

Lösung:
Eine Wick-Rotation $t \to -i\tau$ zu imaginären Zeiten wird einen stationären Punkt der Wirkung offenbaren. Am Ende der Rechnung können wir die *Real*-Zeit-Amplitude direkt durch analytische Fortsetzung erhalten.

Konkret wollen wir folgende Übergangsamplitude berechnen:

$$G(a, \pm a; \tau) = \langle \pm a | \exp\left(-\frac{\tau}{\hbar}\hat{H}\right) |a\rangle = G(-a, \mp; \tau)$$

Die Euklidische Pfadintegral-Formulierung dieser Amplitude ist

$$G(a, \pm a; \tau) = \int_{q(0)=\pm a}^{q(\tau)=a} \mathcal{D}q \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int_0^\tau d\tau' \left(\frac{m}{2}\dot{q}^2 + V(q)\right)\right\}$$

Die Gleichung für die stationäre Phase lautet: $-m\ddot{q}^2+V'(q)=0$. Das heißt: das Resultat der Wick-Rotation ist das Potential zu *invertieren*: $V \to -V$

In der invertierten Potentiallandschaft ist die Barriere zu einer Senke geworden. Daher gibt es in der neuen Formulierung klassische Lösungen, die die beiden Punkte $\pm a$ verbinden. ($q(0)=\pm a$, $q(\tau)=\pm a$)

a) die Lösung in der das Teilchen permanent bei a bleibt

b) die Lösung in der das Teilchen permanent bei $-a$ bleibt

c) die Lösung in welcher das Teilchen seine Anfangsposition bei $\pm a$ verläßt, durch das Minimum bei 0 beschleunigt und schließlich die Endposition bei $\pm a$ zur Zeit τ erreicht.

Für die Übergangsamplitude müssen alle drei Typen von Pfaden berücksichtigt werden. Im Falle (a) und (b) erhält man wieder bei der Berechnung der Quantenfluktuation um diese Lösungen die Physik der Null-Punkts-Schwingungen wie beim einfachen Potential-Topf (s.o.) – aber für jede Mulde separat.

Ad (c): Das **Instanton-Gas**:
Die klassische Lösung der Bewegungsgleichung, die die beiden Potentialmaxima verbindet, wird **Instanton-Lösung** genannt. Die Lösung, die denselben Pfad in umgekehrter Richung durchläuft, wird **Anti-Instanton** genannt.

Berechnung der klassischen Wirkung für eine einzelne Instanton-Lösung:
Multiplikation von $m\ddot{\overline{q}} = V'(\overline{q})$ mit $\dot{\overline{q}}$ und Integration über die Zeit

$$\rightsquigarrow \qquad \boxed{\frac{m}{2}\dot{\overline{q}}^2 = V(\overline{q})} \qquad (*)$$

$$\begin{aligned} \Longrightarrow \qquad \mathcal{S}_{\text{inst}} &= \int_0^\tau d\tau' \left(\frac{m}{2}\dot{\overline{q}}^2 + V(\overline{q})\right) \\ &= \int_0^\tau d\tau' m\dot{\overline{q}}^2 \\ &= \int_0^\tau d\tau' \frac{d\overline{q}}{d\tau'}(m\dot{\overline{q}}) \\ &= \int_{-a}^{a} d\overline{q}\sqrt{2mV(\overline{q})} \end{aligned}$$

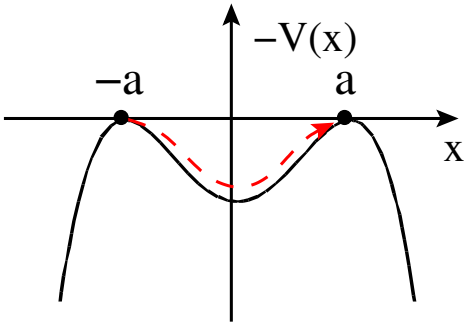
Struktur des Instantons als Funktion der Zeit:

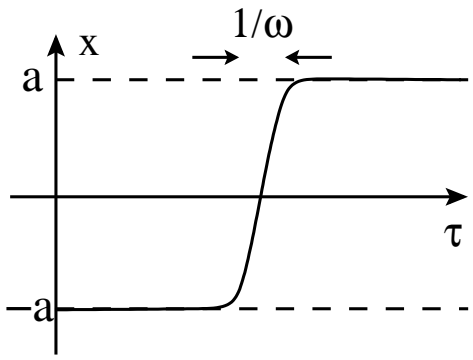
$$\text{Def.} \qquad V''(\pm a) := m\omega^2$$

Aus $(*)$ folgt für große Zeiten (d.h. für $\overline{q}(\tau) \to a$ für $\tau \to \infty$)

$$\dot{\overline{q}} = -\omega(\overline{q} - a)$$

$$\Longrightarrow \quad \overline{q}(\tau) \underset{\tau\to\infty}{\longrightarrow} a - e^{-\tau\omega}$$





Die zeitliche Ausdehnung des Instantons wird determinant durch die Oszillatorfrequenz der lokalen Potential-Minimas und kann für den Fall, daß die Tunnelzeiten sehr viel größer als $1/\omega$ sind, als kurz angesehen werden.

Die Beschränkung der Instanton-Konfiguration auf ein enges Zeitintervall hat zur Folge, daß Näherungslösungen der stationären Gleichungen existieren müssen, die weitere Anti-Instanton/Instanton-Paare involvieren (physikalisch: das Teilchen springt wiederholt hin und her).

Nach der generellen Philosophie des Sattelpunktschemas erhält man das Pfadintegral durch Summation über alle Lösungen der Sattelpunktsgleichungen und damit über alle Instanton-Lösungen.

Die Summation über Multi-Instanton-Konfigurationen – das sog. Instanton-Gas – wird wesentlich vereinfacht durch die Tatsache, daß die individuellen Instantons nur kurze zeitliche Ausdehnung haben (Ereignisse überlappender Konfigurationen sind selten) und daß nicht zu viele Instantons in einem endlichen Zeitintervall untergebracht werden können (das Instanton-Gas ist verdünnt).

Konkret:
Multi-Instanton-Konfigurationen ergeben die Übergangsamplitude

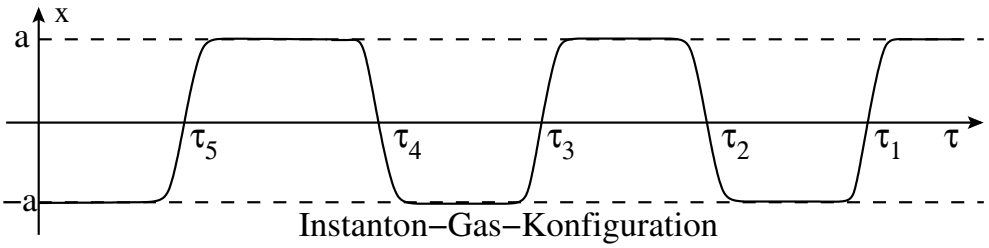
$$G(a,\pm a;\tau) \simeq \sum_{n \text{ gerade/ungerade}} K^n \int_0^\tau d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \cdots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n A_n(\tau_1,\tau_2,\cdots,\tau_n)$$

A_n bezeichnet die Amplitude, die mit n anwesenden Instantons assoziiert ist, für $a \to -a$ ungerade, für $a \to a$ gerade Anzahl von Instantons. Die n Instanton-Sprünge können zu beliebigen Zeiten $\tau_i \in [0,\tau]$ nacheinander stattfinden. K ist eine Dimensionsbehaftete Konstante.

$A_n(\tau_1,\cdots,\tau_n)$ berechnen wir in der semi-klassischen Approximation.
Für jede Amplitude gilt in der semi-klassischen Approximation:

$$\boxed{A_n = A_{n,\text{kl}} \cdot A_{n,\text{qu}}}$$

$A_{n,\text{kl}}$: enthält die Wirkung der Instanton-Konf..
$A_{n,\text{qu}}$: Quanten-Beitrag von quadrat. Fluktuationen um klassischen Pfad.



Betrachten wir zunächst $A_{n,\mathrm{kl}}$: Zu Zwischenzeiten $\tau_i \ll \tau' \ll \tau_{i+1}$, in denen das Teilchen auf dem Gipfel einse der Maxima $\pm a$ ruht, wird keine Wirkung (siehe Abschnitt einfacher Potential-Topf) akkumuliert. Jedoch jeder Instanton-Sprung hat eine endliche Wirkung $\mathcal{S}_{\mathrm{inst}}$ (s.o.)

$$\rightsquigarrow \quad A_n = A_{n,\mathrm{kl}}(\tau_1, \cdots, \tau_n) = e^{-n\mathcal{S}\mathrm{inst}/\hbar}$$

unabhängig von den Zeitkoordinaten τ_i (die Instantons wissen nichts voneinander).

Nun zu $A_{n,\mathrm{qu}}$: Zwei Beiträge:

- Während das Teilchen auf den Gipfeln der Maxima ruht (die geraden Segmente in der Instanton-Gas-Konf.), spielen die quadratischen Fluktuationen um die klassischen (i.e. räumlich konstante) Konfigurationen dieselbe Rolle wie die beim einfachen Potential-Topf betrachteten Quantenfluktuationen – der einzige Unterschied ist der, daß wir im Wick-rotierten Bild arbeiten. Hier fanden wir, daß die Quanten-Fluktuationen um eine klassische Konfiguration, die für eine (reelle) Zeit t am Boden der Potential-Mulde blieb, im Faktor $\sqrt{1/\sin(\omega t)}$ resultiert (Konstanten in K^n absorbiert). Die Rotation zu imaginären Zeiten, $t \to -i\tau$, ergibt so die während der stationären Zeit $\tau_i - \tau_{i+1}$ akkumulierten Quantenfluktuationen

$$\sqrt{1/\sin\left(-\omega\left(\tau_i - \tau_{i+1}\right)\right)} \simeq e^{-\omega(\tau_i - \tau_{i+1})/2}$$

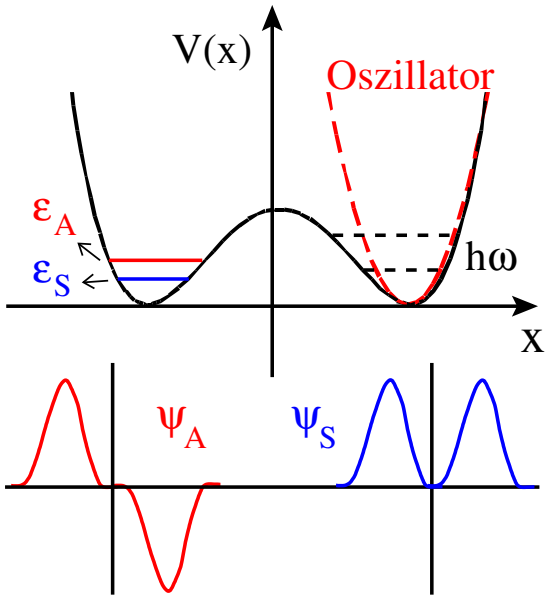
- Im Prinzip gibt es auch Fluktuationen um die "Sprung"-Segmente des Pfades. Der "Sprung" benötigt jedoch Zeiten der Ordnung $\mathcal{O}(\omega^{-1}) \ll \Delta\tau$, wobei $\Delta\tau$ die typische Zeit *zwischen* den Sprüngen angibt, weshalb wir diese Beiträge vernachlässigen (d.h. wir absorbieren sie in die Vorfaktoren K ohne explizite Rechnung).

$$\underset{\tau_{n+1}=0,\tau_0=\tau}{\rightsquigarrow} \quad A_{n,\mathrm{qu}}(\tau_1, \cdots, \tau_n) = \prod_{i=0}^{n} e^{-\omega(\tau_i - \tau_{i+1})/2} = e^{-\omega\tau/2}$$

unabhängig von τ_i.

Damit haben wir

$$\begin{aligned} G(a, \pm a, \tau) &\simeq \sum_{n \text{ gerade/ungerade}} K^n e^{-n\mathcal{S}_{\mathrm{inst}}/\hbar} e^{-\omega\tau/2} \underbrace{\int_0^\tau d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \cdots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n}_{=\tau^n/n!} \\ &= e^{-\omega\tau/2} \sum_{n \text{ gerade/ungerade}} \frac{1}{n!} \left(\tau K e^{-\mathcal{S}_{\mathrm{inst}}/\hbar}\right)^n \qquad (**) \end{aligned}$$



d.h.

$$\boxed{\begin{aligned} G(a,a;\tau) &\simeq Ce^{-\omega\tau/2}\cosh\left(\tau Ke^{-\mathcal{S}_{\rm inst}/\hbar}\right) \\ G(a,-a;\tau) &\simeq Ce^{-\omega\tau/2}\sinh\left(\tau Ke^{-\mathcal{S}_{\rm inst}/\hbar}\right) \end{aligned}} \qquad (***)$$

[Konsistenz-Check der Annahme der "*Verdünnung*" des Instanton-Gases: Die mittlere Anzahl von Instantons, $\overline{n}$, die zu der Summe in $(**)$ beiträgt, ist nach der allg. Formel

$$\overline{n} = \langle n\rangle = \frac{\sum_n nX^n/n!}{\sum_n X^n/n!} \qquad (\text{mit } X = \tau Ke^{-\mathcal{S}_{\rm inst}/\hbar})$$

gegeben durch

$$\overline{n} = \tau Ke^{-\mathcal{S}_{\rm inst}/\hbar}$$

(gerade/ungerade-Aufspaltung ist nicht wichtig für $\overline{n} \gg 1$.)
$\rightsquigarrow$ Die mittlere Instanton-Dichte $\overline{n}/\tau = Ke^{-\mathcal{S}_{\rm inst}/\hbar}$ ist exponentiell klein in der Instanton-Wirkung und unabhängig von τ.]

Zur physikalischen Interpretation:

Betrachte Spektrum des Teilchens um Doppelmulden-Potential.

$$\underset{-a}{\text{Oszillator}} + \underset{+a}{\text{Oszillator}} + \underset{\text{(Barriere)}}{\text{Störung}}$$

Nur Grundzustands-Doublett: (**S**ymmetrie/**A**ntisymmetrie)

$$G(a,\pm a;\tau) \simeq \langle a|\left\{|S\rangle\, e^{-\varepsilon_{\rm S}\tau/\hbar}\,\langle S| + |A\rangle\, e^{-\varepsilon_{\rm A}\tau/\hbar}\,\langle A|\right\}|\pm a\rangle$$

Wg. Symmetrie

$$|\langle a|S\rangle|^2 = |\langle -a|S\rangle|^2 = \frac{C}{2}; \qquad \langle a|A\rangle \langle A| - a\rangle = -|\langle a|A\rangle|^2 = -\frac{C}{2}$$

und mit $\varepsilon_{\mathrm{A/S}} = \hbar\omega/2 \pm \Delta\varepsilon/2$ ($\Delta\varepsilon$: Tunnel-Aufspaltung) ist

$$G(a, \pm a; \tau) \simeq \frac{C}{2}\left(e^{-(\hbar\omega - \Delta\varepsilon)\tau/2\hbar} \pm e^{-(\hbar\omega+\Delta\varepsilon)\tau/2\hbar}\right) = Ce^{-\omega\tau/2}\begin{cases}\cosh(\Delta\varepsilon\tau/\hbar)\\ \sinh(\Delta\varepsilon\tau/\hbar)\end{cases}$$

wobei $\Delta\varepsilon \simeq \hbar K e^{-\mathcal{S}_{\mathrm{inst}}/\hbar}$ vgl. mit $(***)$.

Kapitel 2

Zweite Quantisierung

Wir werden hier Quantenmechanik-Systeme, die aus mehreren (sehr vielen) Teilchen bestehen, behandeln und dazu einen effizienten Formalismus – die Methode der zweiten Quantisierung – einführen.

Es gibt in der Natur zwei Sorten von Teilchen: Bosonen und Fermionen. Deren Zustände sind vollkommen symmetrisch bzw. vollkommmen antisymmetrisch. Fermionen besitzen halbzahligen, Bosonen ganzzahligen Spin. Dieser Zusammenhang zwischen Spin und Symmetrie (Statistik) wird in der relativistischen Quantenfeldtheorie bewiesen (Spin-Statistik-Theorem). Zunächst einige Vorbemerkungen:

2.1 "Identische" Teilchen und Mehrteilchenzustände

Betrachte N "identische" Teilchen (z.B. Elektronen).
Hamilton-Operator: $\hat{H} = \hat{H}(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2, \cdots, \mathbf{r}_N\sigma_N)$ kurz: $\hat{H}(1, 2, \cdots, N)$.
Wellenfunktion: $\psi = \psi(\mathbf{r}_1\sigma_1, \mathbf{r}_2\sigma_2, \cdots, \mathbf{r}_N\sigma_N)$ kurz: $\psi(1, 2, \cdots, N)$.

Definition: **Permutationsoperator** P_{ij}:

$$P_{ij}\psi(\cdots, i, \cdots, j, \cdots, N) = \psi(\cdots, j, \cdots, i, \cdots, N)$$

Da $P_{ij}^2 = 1$ hat P_{ij} die EW ± 1. Wegen der Symmetrie von $\hat{H}$ gilt:

$$\forall ij: \qquad P_{ij}\hat{H} = \hat{H}P_{ij}$$

$S_N :=$ Gruppe aller Permutationen von N Objekten. $\#S_N = N!$. Jedes $P \in S_N$ kann als Produkt von Transpositionen P_{ij} dargestellt werden. P heißt gerade (ungerade), wenn die Anzahl der Transpositionen P_{ij} gerade (ungerade) ist.

Eigenschaften:

(i) $\psi(1, \cdots, N)$ ist Eigenfunktion von $\hat{H}$ mit EW E
$\implies$ $P\psi(1, \cdots, N)$ ebenfalls Eigenfunktion zum EW E

(ii) $\forall P \in S_N, \quad \langle\, \phi \,|\, \psi \,\rangle = \langle\, P\phi \,|\, P\psi \,\rangle$

(iii) P ist unitär ($P^+P = PP^+$)

(iv) Für jeden symmetrischen Operator $S(1, \cdots, N)$ gilt $[P, S] = 0$, $\forall P \in S_N$ und $\langle P\psi_i \,|\, S \,|\, P\psi_i \rangle = \langle \psi_i \,|\, S \,|\psi_i \rangle$. Umkehrung gilt ebenfalls.

Da identische Teilchen durch jeden physikalischen Prozess gleichartig beeinflusst werden, müssen alle physikalischen Operatoren symmetrisch sein. Die Zustände ψ und $P\psi$ sind deshalb experimentell ununterscheidbar.

Die *Natur* realisiert nur die vollkommen symmetrischen (ψ_S) und die vollkommen antisymmetrischen (ψ_A) Zustände.

$$\forall ij, \qquad P_{ij}\psi_S = +\psi_S; \quad P_{ij}\psi_A = -\psi_A$$

Experimentell: Zwei Sorten von Teilchen:

Bosonen	**Fermionen**
vollkommen symmetrische Zustände	antisymmetrische Zustände
ganzzahlige Spin	halbzahlige Spin

Bemerkungen:

(i) Der Symmetriecharakter eines Zustandes ändert sich im Zeitverlauf nicht.

$$\psi(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\psi(0) \quad \Longrightarrow \quad P\psi(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}P\psi(0)$$

(ii) $\forall P \in S_N$:

$$P\psi_S = \psi_S$$
$$P\psi_A = (-1)^P\psi_A \qquad \text{mit } (-1)^P = \begin{cases} +1 & \text{für gerade Permutationen } P \\ -1 & \text{für ungerade Permutationen } P \end{cases}$$

ψ_S und ψ_A bilden die Basis von zwei eindimensionalen Darstellungen von S_N.

Beispiel:

$$N = 2: \qquad \psi_S(1,2) = \psi(1,2) + \psi(2,1)$$
$$\psi_A(1,2) = \psi(1,2) - \psi(2,1)$$

$$N = 3: \qquad \psi_S(1,2,3) = \psi(1,2,3) + \psi(2,1,3) + \psi(1,3,2) + \psi(3,2,1) + \psi(3,1,2) + \psi(2,3,1)$$
$$\psi_A(1,2,3) = \psi(1,2,3) - \psi(2,1,3) - \psi(1,3,2) - \psi(3,2,1) + \psi(3,1,2) + \psi(2,3,1)$$

Sei $\{|\, i \,\rangle\}$ VONB von Einteilchenzuständen. Mit $|\, i \,\rangle_\alpha$ bezeichnen wir einen Einteilchenzustand des α-ten Teilchens.
$\rightsquigarrow$ Basis-Zustände des N-Teilchensystems:

$$|i_1, \cdots, i_\alpha, \cdots, i_N\rangle = |i_1\rangle_1 \quad \cdots \quad \underbrace{|i_\alpha\rangle_\alpha}_{\text{Teilchen } \alpha \text{ im Zustand } |i_\alpha\rangle} \quad \cdots \quad |i_N\rangle_N$$

$\{|i_1, \cdots, i_N\rangle\}$ ist VONB des N-Teilchen Hilbertraums $\mathcal{H}^N (= \mathcal{H}_S^N \oplus \mathcal{H}_A^N \oplus \text{Rest})$
Die symmetrischen bzw. antisymmetrischen Basis-Zustände (d.h. Basis von $\mathcal{H}_S^N$ und $\mathcal{H}_S^N$) sind durch

$$S_\pm |i_1, \cdots, i_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{P \in S_N} (\pm 1)^P P |i_1, \cdots, i_N\rangle$$

definiert.

Falls in $|i_1, \cdots, i_N\rangle$ Einteilchenzustände mehrfach auftreten, ist $S_+ |i_1, \cdots, i_N\rangle$ nicht auf 1 normiert. Angenommen i tritt n_i-mal auf, dann enthält $S_+ |i_1, \cdots, i_N\rangle$ nur $N!/n_1!n_2!\cdots$ verschiedene Terme und jeder dieser Terme kommt mit der Vielfachheit $n_1! \cdot n_2! \cdots$ vor.

$$\Longrightarrow \langle i_1, \cdots, i_N | S_+ S_+ |i_1, \cdots, i_N\rangle = \frac{1}{N!}(n_1!n_2!\cdots)^2 \frac{N!}{n_1!n_2!\cdots} = n_1!n_2!\cdots$$

$\rightsquigarrow$ Die normierten *Bose*-Basisfunktionen sind

$$\frac{S_+}{\sqrt{n_1!n_2!}} |i_1, \cdots, i_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!n_1!n_2!\cdots}} \sum_{P \in S_N} P |i_1, \cdots, i_N\rangle \qquad (*)$$

[n.b. Falls in $|i_1, \cdots, i_N\rangle$ Einteilchenzustände mehrfach auftreten, ist $S_- |i_1, \cdots, i_N\rangle = 0$]

2.2 Bosonen

Dieser Zustand $(*)$ ist vollkommen charakterisiert durch Angabe der Besetzungszahlen $\{n_i\}$:

$$|n_1, n_2, \cdots\rangle = \frac{S_+}{\sqrt{n_1!n_2!\cdots}} |i_1, \cdots, i_N\rangle$$

Es ist $N = \sum_{i=1}^{\infty} n_i$, abgesehen davon ist $n_i = 0, 1, 2, \cdots$ beliebig. Diese Zustände bilden ein VONB aus vollkommen symmetrisierten N-Teilchen-Zustand. Wir fassen nun die Zustände für $N = 0, 1, \cdots$ zusammen und erhalten den Fock-Raum:

$$\text{Fock-Raum} := \mathcal{H}^0 \oplus \mathcal{H}_S \oplus \cdots \oplus \mathcal{H}_S^N \oplus \cdots$$

$\mathcal{H}^0 = \{|0\rangle\}$oder Vacuum (Null Teilchen)
VONB: $\{|n_1, n_2, \cdots\rangle\}_{n_i=0,1,\cdots}$
Orthogonalitätsrelation $\langle n_1, n_2, \cdots | n_1', n_2', \cdots\rangle = \delta_{n_1 n_1'} \delta_{n_2 n_2'} \cdots$
Vollständigkeit: $\sum_{n_1,n_2,\cdots} |n_1, n_2, \cdots\rangle \langle n_1, n_2, \cdots| = \mathbf{1}$

Definition:
Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, die vom N-Teilchen-(Unter)raum in den $(N \pm 1)$-Teilchen-(Unter)raum führen:

$$\begin{aligned} a_i^+ |\cdots n_i \cdots\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |\cdots n_i + 1 \cdots\rangle \qquad (**) \\ a_i |\cdots n_i \cdots\rangle &= \sqrt{n_i} |\cdots n_i - 1 \cdots\rangle \end{aligned}$$

Offenbar erhöht a_i^+ (erniedrigt a_i) die Besetzungszahl des i-ten Zustands um 1. Man zeigt leicht, daß a_i^+ in der Tat der zu a_i adjungierte Operator ist.

$$\begin{aligned}(**) \quad &\Longrightarrow \quad \langle n_i|\, a_i = \sqrt{n_i+1}\,\langle n_i+1| \\ &\Longrightarrow \quad \langle n_i|\, a_i \left|n_i'\right\rangle = \sqrt{n_i+1}\,\langle n_i+1|n_i'\rangle = \sqrt{n_i+1}\delta_{n_i+1,n_i'}\end{aligned}$$

Es gelten die Bose-Vertauschungsrelationen

$$\boxed{[a_i, a_j] = 0\,; \quad \left[a_i^+, a_j^+\right] = 0\,; \quad \left[a_i, a_j^+\right] = \delta_{ij}}$$

$\left(a_i^+ a_i\,|n_i\rangle = a_i^+\sqrt{n_i}\,|n_i-1\rangle = n_i\,|n_i\rangle\,; \quad a_i a_i^+\,|n_i\rangle = \sqrt{n_i+1}\,a_i\,|n_i+1\rangle = (n_i+1)\,|n_i\rangle \right)$

Ausgehend vom Grundzustand $\equiv$ Vakuumzustand $|\,0\,\rangle = |\,0,0,\cdots\rangle$ kann man alle Zustände aufbauen:

$$\begin{aligned} a_i^+\,|0\rangle &= |0,\cdots,n_i=1,\cdots\rangle \\ a_i^+ a_j^+\,|0\rangle &= |0,\cdots,n_i=1,\cdots,n_j=1,\cdots\rangle \quad i\neq j \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\,a_i^{+2}\,|0\rangle &= |0,\cdots,n_i=2,\cdots\rangle \end{aligned}$$

Allgemein

$$\boxed{|n_1,n_2,\cdots\rangle = \prod_{i=1}^{\infty}\frac{(a_i^+)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}}\,|\,0\,\rangle}$$

Definition:

$\boxed{\hat{n}_i := a_i^+ a_i}$ ist der **Teilchenzahloperator** (Besetzungszahloperator für den Zustand $|\,i\,\rangle$)

$$\hat{n}_i\,|\cdots,n_i,\cdots\rangle = n_i\,|\cdots,n_i,\cdots\rangle$$

$\boxed{\hat{N} := \sum_i \hat{n}_i}$ ist der **Gesamtteilchenzahloperator**

$$\hat{N}\,|n_1,n_2,\cdots\rangle = \left(\sum_i n_i\right)|n_1,n_2,\cdots\rangle = N\,|n_1,n_2,\cdots\rangle$$

Betrachte nun einen N-Teilchen-Operator für eine Einteilchen-Observable

$$T = \sum_{\alpha=1}^{N} t_\alpha$$

wobei t_α ein Einteilchen-Operator ist (z.B. $t_\alpha = p_\alpha^2/2m$ oder $V(x_\alpha)$). Sei $t_{ij} := \langle\, i\,|\,t\,|\,j\,\rangle$ (t: Einteilchen-Operator), dann $t = \sum_{ij} t_{ij}|\,i\,\rangle\langle\,j\,|$ und $T = \sum_{ij} t_{ij}\sum_\alpha |\,i\,\rangle_\alpha\langle\,j\,|_\alpha$.

Wir wollen nun zeigen, daß sich T darstellen läßt als $\boxed{T = \sum_{ij} t_{ij} a_i^+ a_j}$

Beweis:
Betrachte dazu die Wirkung von $\hat{A}_{ij} := \sum_\alpha |\, i \,\rangle_\alpha \langle\, j \,|_\alpha$ auf $|n_1, n_2, \cdots\rangle = \frac{S_+}{\sqrt{n_1! n_2! \cdots}} |k_1, k_2, \cdots, k_N\rangle$
Wenn $n_j = 0$, ist $\forall \alpha \in \{1, \cdots, N\}\ k_\alpha \neq j$ d.h. $|\, i \,\rangle_\alpha \langle\, j \,|_\alpha\, n\rangle = 0$

$$
\begin{array}{lll}
n_j = 1, \text{ oBdA} & k_1 = j \rightsquigarrow & |\, i \,\rangle_1 \langle\, j \,|_1\, k_1, k_2, \cdots, k_N\rangle = |i, k_2, \cdots, k_N\rangle \\
n_j = 2, \text{ oBdA} & k_1 = k_2 = j \rightsquigarrow & |\, i \,\rangle_1 \langle\, j \,|_1\, k_1, k_2, \cdots, k_N\rangle = |i, k_2, k_3, \cdots, k_N\rangle \\
 & & |\, i \,\rangle_2 \langle\, j \,|_2\, k_1, k_2, \cdots, k_N\rangle = |k_1, i, k_3, \cdots, k_N\rangle
\end{array}
$$

etc.
d.h. durch $\hat{A}_{ij}$ wird n_j um 1 erniedrigt und n_i um 1 erhöht und zwar in n_j Summanden.

$$
\begin{aligned}
\rightsquigarrow \quad \hat{A}_{ij} |n_1, n_2, \cdots\rangle &= \hat{A}_{ij} \frac{S_+}{\sqrt{n_1! n_2! \cdots}} |k_1, k_2, \cdots, k_N\rangle \\
&= \frac{S_+}{\sqrt{n_1! n_2! \cdots}} \hat{A}_{ij} |k_1, k_2, \cdots, k_N\rangle \\
&= \frac{S_+}{\sqrt{n_1! n_2! \cdots}} \underbrace{(|i, k_2, \cdots, k_N\rangle + |k_1, i, k_3, \cdots\rangle + \cdots + |\cdots, k_{j-1}, i, k_{j+1}, \cdots\rangle)}_{n_j \text{ mal}} \\
&= n_j \cdot \sqrt{\frac{n_i + 1}{n_j}}\, |\cdots, n_i + 1, \cdots, n_j - 1, \cdots\rangle \\
&= \sqrt{n_j\,(n_i + 1)}\, |\cdots, n_i + 1, \cdots, n_j - 1, \cdots\rangle \\
&= a_i^+ a_j\, |\cdots, n_i, \cdots, n_j, \cdots\rangle
\end{aligned}
$$

Spezialfall $t_{ij} = \varepsilon_i \delta_{ij} \quad \rightsquigarrow \quad H_0 = \sum_i \varepsilon_i a_i^+ a_i$ ■

Analog zeigt man für Zweiteilchenoperatoren

$$
F = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} f^{(2)}(\mathbf{r}_\alpha, \mathbf{r}_\beta) \tag{+}
$$

daß sie geschrieben werden können als

$$
F = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,m} f_{ijkm} a_i^+ a_j^+ a_m a_k
$$

mit

$$
\begin{aligned}
f_{ijkm} &= \langle\, i, j \,|\, f^{(2)} \,|\, k, m \,\rangle \\
&= \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}'\, \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j^*(\mathbf{r}) f^{(2)}\big(\mathbf{r}, \mathbf{r}'\big)\, \phi_k(\mathbf{r}') \phi_m(\mathbf{r}')
\end{aligned}
$$

Beweis:
(+) bedeutet im N-Teilchen-Raum

$$
F = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \sum_{i,j,k,m} \langle\, i, j \,|\, f^{(2)} \,|\, k, m \,\rangle\, |\, i \,\rangle_\alpha\, |\, j \,\rangle_\beta \langle\, k \,|_\alpha \langle\, m \,|_\beta
$$

Nun ist

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha\neq\beta} |\, i\,\rangle_\alpha\, |\, j\,\rangle_\beta\, \langle\, k\,|_\alpha\, \langle\, m\,|_\beta \\
= & \sum_{\alpha\neq\beta} |\, i\,\rangle_\alpha\, \langle\, k\,|_\alpha\, |\, j\,\rangle_\beta\, \langle\, m\,|_\beta \\
= & \sum_{\alpha,\beta} |\, i\,\rangle_\alpha\, \langle\, k\,|_\alpha\, |\, j\,\rangle_\beta\, \langle\, m\,|_\beta - \underbrace{\langle\, k\,|\, j\,\rangle}_{\delta_{kj}} \sum_\alpha |\, i\,\rangle_\alpha\, \langle\, m\,|_\alpha \\
= & \; a_i^+ a_k\, a_j^+ a_m - a_i^+ \left[a_k, a_j^+\right] a_m \\
= & \; a_i^+ a_j^+\, a_m a_k
\end{aligned}$$

■

2.3 Fermionen

Die symmetrischen Basis-Zustände für ein N-Teilchen aus Fermionen sind

$$S_-\, |i_1 i_2 \cdots i_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |i_1\rangle_1 & |i_1\rangle_2 & \cdots & |i_1\rangle_N \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ |i_N\rangle_1 & |i_N\rangle_2 & \cdots & |i_N\rangle_N \end{vmatrix} \qquad \text{(Slater-Determinate)}$$

(n.b.: Vertauschung zweier Teilchen $\hat{=}$ Vertauschung zweier Spalten $\rightsquigarrow$ Vorzeichenwechsel)

Die Zustände werden wieder charakteristisch durch die Angabe der Besetzungszahlen, die nun nur die Werte 0 und 1 annehmen können.
$\{|n_1 n_2 \cdots\rangle\}$ ist Basis des Fock-Raumes $\underbrace{\mathcal{H}^0}_{\{|\,0\,\rangle\}} \oplus \mathcal{H}^1 \oplus \cdots \oplus \mathcal{H}^N \oplus \cdots$. Skalarprodukt und Vollständigkeitsrelation sind wie bei Bosonen.

Wir führen nun wieder Erzeugungsoperatoren a_i^+ ein. Deren zweimalige Anwendung muß Null ergeben und die Reihenfolge der Anwendung muss eine Rolle spielen:
Definition:

$$\begin{aligned}
S_-\, |i_1 i_2 \cdots i_N\rangle &= a_{i_1}^+ a_{i_2}^+ \cdots a_{i_N}^+\, |\,0\,\rangle \\
S_-\, |i_2 i_1 \cdots i_N\rangle &= a_{i_2}^+ a_{i_1}^+ \cdots a_{i_N}^+\, |\,0\,\rangle
\end{aligned}$$

Da $S_-\, |i_1 i_2 \cdots\rangle = -S_-\, |i_2 i_1 \cdots\rangle$ folgt

$$\{a_i^+,\, a_j^+\} := a_i^+ a_j^+ + a_j^+ a_i + = 0$$

und damit auch

$$\left(a_i^+\right)^2 = 0$$

In Besetzungszahldarstellung $|n_1 n_2 \cdots\rangle = \left(a_1^+\right)^{n_1} \left(a_2^+\right)^{n_2} \cdots |\,0\,\rangle$ mit $n_i \in \{0, 1\}$.
Dann ist die Wirkung von a_i^+:

$$a_i^+ \,|\cdots n_i \cdots\rangle = \underbrace{(1-n_i)}_{=0 \text{ für } n_i=1} \,(-1)^{\sum_{j<i} n_j} \,|\cdots n_i+1 \cdots\rangle$$

$\sum_{j<i} n_j$: Anzahl von Antikommutationen um a_i^+ an die Position i zu bringen.

Die adjungierte Relation ist

$$\langle\cdots n_i \cdots|\, a_i = (1-n_i)\,(-1)^{\sum_{j<i} n_j}\,\langle\cdots n_i+1\cdots|$$

$$\Longrightarrow \langle\cdots n_i \cdots|\, a_i \,|\cdots n_i' \cdots\rangle = (1-n_i)\,(-1)^{\sum_{j<i} n_j}\,\delta_{n_i+1,n_i'}$$

Damit berechnen wir

$$\begin{aligned} a_i \,|\cdots n_i' \cdots\rangle &= \sum_{n_i} |n_i\rangle \underbrace{\langle n_i|\, a_i \,|n_i'\rangle}_{=\begin{cases} 0 & \text{für} \quad n_i'=0 \\ (-1)^{\sum_{j<i} n_j}\,\delta_{n_i 0} & \text{für} \quad n_i'=1 \end{cases}} \\ &= \begin{cases} 0 & \text{für} \quad n_i'=0 \\ (-1)^{\sum_{j<i} n_j}\,|\cdots n_i'-1\cdots\rangle & \text{für} \quad n_i'=1 \end{cases} \end{aligned}$$

also

$$a_i \,|\cdots n_i \cdots\rangle = n_i (-1)^{\sum_{j<i} n_j}\,|\cdots n_i-1\cdots\rangle$$

Es folgt

$$\begin{aligned} a_i a_i^+ \,|\cdots n_i \cdots\rangle &= (1-n_i)\,(-1)^{2\sum_{j<i} n_j}\,(n_i+1)\,|\cdots n_i \cdots\rangle \\ &= (1-n_i)\,|\cdots n_i \cdots\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a_i^+ a_i \,|\cdots n_i \cdots\rangle &= n_i\,(-1)^{2\sum_{j<i} n_j}\,(1-n_i+1)\,|\cdots n_i \cdots\rangle \\ &= n_i \,|\cdots n_i \cdots\rangle \end{aligned}$$

$a_i^+ a_i$ hat offenbar die Bedeutung des Besetzungszahloperators für den Zustand $|\,i\,\rangle$. Außerdem folgt durch Bildung der Summe $\{a_i,\, a_i^+\} = 1$. Bei $\{a_i,\, a_j^+\}$ mit $i \neq j$ ist der Phasenfaktor in beiden Summanden unterschiedlich $\{a_i,\, a_i^+\} \propto (1-n_i)n_i(1-1) = 0$ $\{a_i,\, a_j\}$ hat für $i \neq j$ ebenfalls einen unterschiedlichen Phasenfaktor, und da $a_i a_i = a_i^2 = 0$ folgen

Antikommutationsregeln für Fermionen

$$\{a_i,\, a_j\} = 0; \quad \{a_i^+,\, a_j^+\} = 0; \quad \{a_i,\, a_i^+\} = \delta_{ij}$$

Die Relation $\sum_\alpha |\,i\,\rangle_\alpha \langle\, j\,|_\alpha = a_i^+ a_j$ zeigt man wie folgt: (o.B.d.A. $i_1 < i_2 < \cdots < i_N$)

$$\begin{aligned}\sum_\alpha |\,i\,\rangle_\alpha \langle\, j\,|_\alpha S_- |i_1 i_2 \cdots i_N\rangle &= S_- \left(\sum_\alpha |\,i\,\rangle_\alpha \langle\, j\,|_\alpha\right) |i_1 i_2 \cdots i_N\rangle \\ &= n_j\,(1-n_i)\,S_- |i_1 i_2 \cdots i_N\rangle\,|_{j\to i}\end{aligned}$$

$|_{j\to i}$ bedeutet, daß der Zustand $|\,j\,\rangle$ durch $|\,i\,\rangle$ ersetzt wird. Um i in die richtige Position zu bringen, muß man für $i \le j$: $\sum_{k<j} n_k + \sum_{k<i} n_k$ Zeilenvertauschungen und für $i > j$: $\sum_{k<j} n_k + \sum_{k<i} n_k - 1$ Zeilenvertauschungen durchführen. Das ergibt denselben Phasenfaktor wie bei Anwendung von $a_i^+ a_j$.

$$\begin{aligned}a_i^+ a_j\,|\cdots n_i \cdots n_j \cdots\rangle &= n_j\,(-1)^{\sum_{k<j} n_k}\, a_i^+\,|\cdots n_i \cdots n_j - 1\rangle \\ &= n_i\,(1-n_i)\,(-1)^{\sum_{k<i} n_k + \sum_{k<j} n_k - \delta_{i>j}}\,|\cdots n_i + 1 \cdots n_j - 1\rangle\end{aligned}$$

Damit gilt für Einteilchen- und Zweiteilchenoperatoren (für Fermionen und Bosonen)

$$\begin{aligned}T &= \sum_{ij} t_{ij} a_i^+ a_j \\ F &= \frac{1}{2}\sum_{ijkm} \langle\, i,j\,|\; f^{(2)}\;|\,k,m\,\rangle\, a_i^+ a_j^+ a_m a_k\end{aligned}$$

z.B.

$$\hat{H} = \sum_{ij} (\underbrace{b_{ij}}_{\mathrm{E_{kin}}} + \underbrace{U_{ij}}_{\mathrm{E_{pot}}})\, a_i^+ a_j + \frac{1}{2}\sum_{ijkm} \underbrace{f_{ijkm}}_{\mathrm{E_{ww}}} a_i^+ a_j^+ a_m a_k$$

2.4 Feldoperatoren

Seien $\{|\,i\,\rangle\}$ und $\{|\,\xi\,\rangle\}$ zwei VONB von Einteilchenzuständen. Es ist $|\,\xi\,\rangle = \sum_i |\,i\,\rangle\langle\, i\,|\xi\,\rangle$.

$$\begin{aligned}\Longrightarrow \quad a_\xi^+ &= \sum a_i^+ \langle\, i\,|\,\xi\,\rangle \qquad \text{(denn } a_i^+ \text{ } (a_\xi^+) \text{ erzeugt ein Teilchen in } |\,i,\rangle \text{ } (|\,\xi\,\rangle)\text{.)} \\ a_\xi &= \sum_i a_\xi \langle\, \xi\,|\,i\,\rangle \qquad \text{(aus adjungierter Relation)}\end{aligned}$$

Wichtiger Spezialfall: Ortseigenzustände $|\,\mathbf{r}\,\rangle$: $\langle\, \mathbf{r}\,|\,i\,\rangle = \phi_i(\mathbf{r})$ (Einteilchenwellenfunktion in Ortsdarstellung)

Definition: **Feldoperatoren**

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}) &= \sum_i \phi_i(\mathbf{r})\, a_i \\ \psi^+(\mathbf{r}) &= \sum_i \phi_i^*(\mathbf{r})\, a_i^+\end{aligned}$$

$\psi^+(\mathbf{r})$ erzeugt ein Teilchen im Ortseigenzustand $|\,\mathbf{r}\,\rangle$, d.h. an der Stelle $\mathbf{r}$. Es gilt:

$$\begin{aligned}
\left[\psi(\mathbf{r}),\ \psi(\mathbf{r}')\right]_\pm &= 0 \\
\left[\psi^+(\mathbf{r}),\ \psi^+(\mathbf{r}')\right]_\pm &= 0 \\
\left[\psi(\mathbf{r}),\ \psi^+(\mathbf{r}')\right]_\pm &= \sum_{i,j} \phi_i(\mathbf{r})\,\phi_j^*(\mathbf{r}')\, i \underbrace{\left[a_i,\ a_j^+\right]_\pm}_{\delta_{ij}} = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \\
\left([\cdots,\cdots]_+ = [\cdots,\cdots]\,;\quad [\cdots,\cdots]_- = \{\cdots,\cdots\}\right)
\end{aligned}$$

Operatoren ausgedrückt durch Feldoperatoren:
Kinetische Energie:

$$\begin{aligned}
\sum_{i,\,j} a_i^+ T_{ij} a_j \qquad &= \qquad \sum_{i,\,j} \int d^3r\, a_i^+ \phi_i^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\right) \phi_j(\mathbf{r}) a_j \\
&\underset{\psi(\mathbf{r}\to\infty)\to 0}{=} \quad \frac{\hbar}{2m} \int d^3r\, \nabla\psi^+(\mathbf{r}) \cdot \nabla\psi(\mathbf{r})
\end{aligned}$$

Ein-Teilchen-Potential:

$$\begin{aligned}
\sum_{i,\,j} a_i^+ U_{ij} a_j &= \sum_{i,\,j} \int d^3r a_i^+ \phi_i^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r}) a_j \\
&= \int d^3r U(\mathbf{r}) \psi^+(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r})
\end{aligned}$$

Zwei-Teilchen-Wechselwirkung

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2} \sum_{ijkm} \int d^3r d^3r' \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j^*(\mathbf{r}') V(\mathbf{r},\mathbf{r}') \phi_k(\mathbf{r}) \phi_m(\mathbf{r}') a_i^+ a_j^+ a_m a_k \\
= \quad &\frac{1}{2} \int d^3r d^3r' V(\mathbf{r},\mathbf{r}') \psi^+(\mathbf{r}) \psi^+(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r})
\end{aligned}$$

Hamilton-Operator:

$$\hat{H} = \int d^3r \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla\psi^+(\mathbf{r}) \nabla\psi(\mathbf{r}) + U\psi^+(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})\right) + \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \psi^+(\mathbf{r}) \psi^+(\mathbf{r}') V(\mathbf{r},\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r})$$

Teilchen-Dichte:

$$\begin{aligned}
\hat{n}(\mathbf{r}) &= \sum_\alpha \delta\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha\right) \\
&= \sum_\alpha \sum_{i,j} |\, i\,\rangle_\alpha \underbrace{\langle\, i\,|_\alpha\, \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_\alpha)\, |\, j\,\rangle_\alpha}_{\begin{array}{l}= \int d^3r' \phi_i^*(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \phi_j(\mathbf{r}') \\ = \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r})\end{array}} \langle\, j\,|_\alpha \\
&= \sum_{i,j} \underbrace{\sum_\alpha |\, i\,\rangle_\alpha \langle\, j\,|_\alpha}_{= a_i^+ a_j} \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_j(\mathbf{r})
\end{aligned}$$

$$\Longrightarrow \qquad \boxed{\hat{n}(\mathbf{r}) = \psi^+(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})}$$

Gesamtteilchenzahl-Operator:

$$\hat{N} = \int d\mathbf{r}\; n(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}\; \psi^+(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$$

Der Teilchendichteoperator des Vielteilchensystems sieht *formal* so aus wie die Wahrscheinlichkeitsdichte eines Teilchens im Zustand $\psi(\mathbf{r})$. Diese formale Korrespondenz hat zu dem Namen "Zweite Quantisierung" geführt, da man die Operatoren im Erzeugungs- und Vernichtungsformalismus erhalten kann, indem man in den Einteilchendichten die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r})$ durch den Operator $\psi(\mathbf{r})$ ersetzt.

$\rightsquigarrow$ z.B. Stromdichte-Operator $\boxed{j(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2im}\left\{\psi^+(\mathbf{r})\nabla\psi(\mathbf{r}) - \left(\nabla\psi^+(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r})\right\}}$

Feldgleichung: Heisenberg-Bild für Operatoren: $\psi(\mathbf{r},t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\psi(\mathbf{r},0)e^{-i\hat{H}t/\hbar}$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r},t) + \int d\mathbf{r}'\psi^+(\mathbf{r}',t)V(\mathbf{r},\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r},t)$$

Beweis - Übung: - mit Heisenberg Bewegungsgleichung $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = -\left[\hat{H},\psi(\mathbf{r},t)\right]$ analog für $\psi^+(\mathbf{r},t)$ [ergibt $(-)$ Zeichen auf der rechten Seite].
Hieraus folgt die Bewegungsgleichung für Dichte-Operatoren.

$$\frac{\partial}{\partial t}n(\mathbf{r},t) = \psi^+\dot{\psi} + \dot{\psi}^+\psi = \frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left\{\psi^+\Delta\psi - \left(\Delta\psi^+\right)\psi\right\}$$

d.h.

$$\frac{\partial}{\partial t}n(\mathbf{r},t) = -\nabla j(\mathbf{r},t)$$

2.5 Impulsdarstellung

Wir betrachten ein quaderförmiges Volumen $V = L_xL_yL_z$. und periodische Randbedingungen $\phi(\mathbf{r} + L_x\hat{e}_x) = \phi(\mathbf{r})$ etc. Normierte Impulseigenfunktion: $\psi_{\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}/\sqrt{V}$ mit $\mathbf{k} = 2\pi\left(\frac{n_x}{L_x},\,\frac{n_y}{L_y},\,\frac{n_z}{L_z}\right),\; n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z}$

$$\rightsquigarrow \quad \int d\mathbf{r}\phi^*_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\phi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$$

Darstellung des Hamilton-Operators in zweiter Quantisierung:
Matrixelemente:

$$E_{\text{kin}}: \quad \int d\mathbf{r}\,\phi^*_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})(-\Delta)\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\mathbf{k}^2$$

$$E_{\text{pot}}: \quad \int d\mathbf{r}\, \phi^*_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \underbrace{U_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}}_{\text{FT von } U(\mathbf{r})}$$

E_{ww}: Betrachte Zweiteilchen-Potentiale $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, die nur von $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ abhängen.
Def.: $V_{\mathbf{q}} := \int d\mathbf{r}\, e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \quad \left(\rightsquigarrow V(\mathbf{r}) = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\right)$
Das Zweiteilchen-Matrixelement ist dann

$$\begin{aligned}
\left\langle \mathbf{p}'\mathbf{k}' \right| V(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \left|\mathbf{p}\mathbf{k}\right\rangle &= \frac{1}{V^2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}'\, e^{-i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}-\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \\
&= \frac{1}{V^3} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}'\, e^{-i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r} - \mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}' + i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}' + i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \\
&= \frac{1}{V^3} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \underbrace{\delta_{-\mathbf{p}'+\mathbf{q}+\mathbf{p},0}}_{\mathbf{p}'=\mathbf{p}+\mathbf{q}} V \underbrace{\delta_{-\mathbf{k}'-\mathbf{q}+\mathbf{k},0}}_{\mathbf{k}'=\mathbf{k}-\mathbf{q}}
\end{aligned}$$

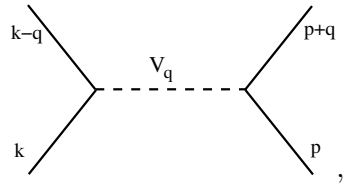
Alles zusammen ergibt:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\hbar\mathbf{k})^2}{2m} a^+_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} a^+_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}} + \underbrace{\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{p},\mathbf{k}} V_{\mathbf{q}} a^+_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} a^+_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{p}}}_{\text{WW-Term}}$$

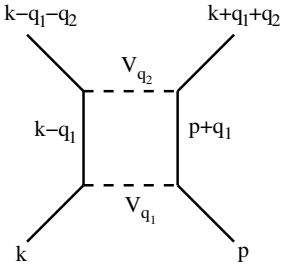
$a^+_{\mathbf{k}}$ ($a_{\mathbf{k}}$) erzeugt (vernichtet) Teilchen mit Wellenzahl $\mathbf{k}$,

$$[a_{\mathbf{k}},\ a_{\mathbf{k}'}]_{\pm} = 0, \quad \left[a^+_{\mathbf{k}'},\ a^+_{\mathbf{k}'}\right]_{\pm} = 0, \quad \left[a_{\mathbf{k}'},\ a^+_{\mathbf{k}'}\right] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}.$$

Anschauliche Interpretation des WW-Terms:



2. Ordnung, Störungstheorie: (2-fach Streuung von zwei Teilchen):



Fourier-Transformation der Dichte: $\hat{n}_{\mathbf{q}} = \int d\mathbf{r}\, n(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = \int d\mathbf{r}\, \psi^+(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ also mit $\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} a_{\mathbf{p}}$, $\psi^+(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} e^{-\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} a^+_{\mathbf{r}}$

$$\hat{n}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{p}} a^+_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}$$

Berücksichtigung des Spins:

$$\left.\begin{array}{rcl} \psi(\mathbf{r}) & \rightarrow & \psi_\sigma(\mathbf{r}) \\ a_{\mathbf{p}} & \rightarrow & a_{\mathbf{p},\sigma} \end{array}\right\} \quad \rightsquigarrow \quad \begin{array}{rcl} n(\mathbf{r}) & = & \sum_\sigma \psi^+_\sigma(\mathbf{r})\psi_\sigma(\mathbf{r}) \\ n_{\mathbf{q}} & = & \sum_{\mathbf{p},\sigma} a^+_{\mathbf{p},\sigma} a_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma} \end{array}$$

Für Spin-$\frac{1}{2}$ Fermionen $\sigma = \pm\frac{1}{2}$.
Spindichte-Operator:

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\mathbf{S}_i = \frac{\hbar}{2}\sum_{\sigma,\sigma'} \psi_\sigma^+(\mathbf{r})\boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'}\psi_{\sigma'}(\mathbf{r}),$$

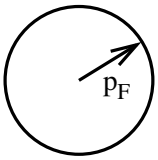
wo $\boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'}$ die Matrixelemente der Pauli-Matrizen sind.
Ansonsten alles wie gehabt mit Spin-Index σ.

2.6 Anwendung der zweiten Quantisierung

2.6.1 Spin-$\frac{1}{2}$ Fermion

Nichtwechselwirkende Fermionen; Teilchenzahl N. Im Grundzustand $|\,\phi_0\,\rangle$ sind alle Einteilchenzustände mit $|\mathbf{p}| < p_F$ besetzt. p_F ist die Fermi-Wellenzahl, $|\mathbf{p} < p_F$ die Fermi-Kugel.

$$|\phi_0\rangle = \prod_{\substack{\mathbf{p}\\ |\mathbf{p}|<p_F}} \prod_\sigma a^+_{\mathbf{p}\sigma}\,|0\rangle \qquad \sigma = \pm\frac{\hbar}{2}$$



Erwartungswert des Teilchenzahloperators im Impulsraum:

$$n_{\mathbf{p}\sigma} = \langle\phi_0|\, a^+_{\mathbf{p}\sigma}a_{\mathbf{p}\sigma}\,|\phi_0\rangle = \begin{cases} 1 & |\mathbf{p}| \le p_F \\ 0 & |\mathbf{p}| > p_F \end{cases}$$

Für $|\mathbf{p}| > p_F$ ist $a_{\mathbf{p}\sigma}\,|\phi_0\rangle = \pm\prod_{\substack{\mathbf{p}\\ |\mathbf{p}|<p_F}} \prod_\sigma a^+_{\mathbf{p}\sigma}a_{\mathbf{p}\sigma}\,|0\rangle = 0$.

Wegen

$$N = \sum_{\mathbf{p}\sigma} n_{\mathbf{p}\sigma} = 2\sum_{|\mathbf{p}|<p_F} 1 \underset{(*)}{=} 2V\int_0^{p_F}\frac{d^3p}{(2\pi)^3} = \frac{Vp_F^3}{3\pi^2}$$

$$\left((*):\ \textstyle\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta k}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} f(\mathbf{k}) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int d^3k f(\mathbf{k})\right)$$

ist

$$p_F^3 = \frac{3\pi^2 N}{V} = 3\pi^2 n \qquad \left(n = \frac{N}{V} : \text{mittlere Teilchendichte}\right)$$

$\hbar p_F$: Fermi-Impuls,
$\varepsilon_F = \frac{(\hbar p_F)^2}{2m}$: Fermi-Energie.
Erwartungswert der Teilchendichte:

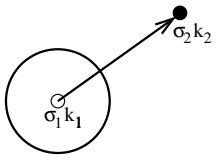
$$\begin{aligned}
\langle n(\mathbf{r})\rangle &= \sum_\sigma \langle\phi_0|\,\psi_\sigma^+(\mathbf{r})\psi_\sigma(\mathbf{r})\,|\phi_0\rangle \\
&= \sum_\sigma\sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \frac{e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}e^{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}}}{V} \underbrace{\langle\phi_0|\, a^+_{\mathbf{p}\sigma}a_{\mathbf{p}'\sigma}\,|\phi_0\rangle}_{=\delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}n_{\mathbf{p}\sigma}} \\
&= \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{p}\sigma} n_{\mathbf{p}\sigma} \\
&= n
\end{aligned}$$

Anregungen des Fermigases

$$|\phi\rangle = a^+_{\mathbf{k}_2\sigma_2} a_{\mathbf{k}_1\sigma_1} |\phi_0\rangle \equiv \text{Teilchen-Loch-Paar}$$

$$b_{\mathbf{k}\sigma} = a^+_{-\mathbf{k},-\sigma} \quad \text{Loch-Vernichter}$$

$$b^+_{\mathbf{k}\sigma} = a_{-\mathbf{k},-\sigma} \quad \text{Loch-Erzeuger}$$



Korrelationsfunktion der Feldoperatoren (im GZ).

$$\begin{aligned} G_\sigma\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right) &= \langle\phi_0|\, \psi^+_\sigma(\mathbf{r})\psi_\sigma(\mathbf{r}')\, |\phi_0\rangle \\ &\equiv \frac{n}{2} \times \text{ Wahrscheinlichkeitsamplitude für } \underbrace{\psi_\sigma(\mathbf{r}')\,|\phi_0\rangle}_{\text{Teilchen fehlt bei } \mathbf{r}'} \rightarrow \underbrace{\psi_\sigma(\mathbf{r})\,|\phi_0\rangle}_{\text{Teilchen fehlt bei } \mathbf{r}} \\ &\quad \uparrow \text{ wegen } \left(\langle\phi_0|\, \psi^+_\sigma(\mathbf{r}')\psi_\sigma(\mathbf{r}')\, |\phi_0\rangle = \frac{n}{2}\right) \end{aligned}$$

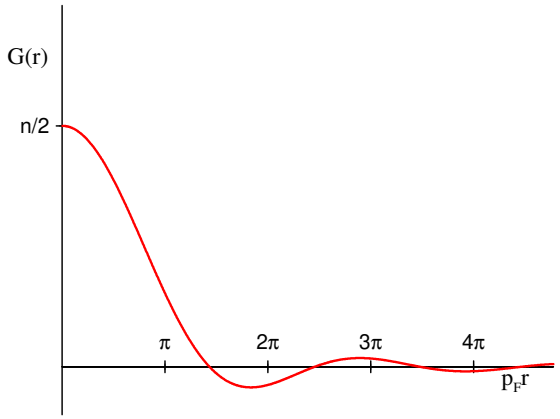
$$\begin{aligned} G_\sigma\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right) &= \langle\phi_0|\sum_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} \frac{1}{V} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}+i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}'} a^+_{\mathbf{p}\sigma} a_{\mathbf{p}'\sigma}\, |\phi_0\rangle \\ &= \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{p}} e^{-i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} n_{\mathbf{p}\sigma} \\ &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \Theta\left(p_F - p\right) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^{p_F} dp\, p^2 \underbrace{\int_{-1}^{1} d\eta\, e^{ip|r-r'|\eta}}_{=\frac{e^{ipr}-e^{-ipr}}{ipr},\ r=|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}, \quad (\eta=\cos\theta) \\ &= \frac{1}{2\pi^2 r^3} \underbrace{\int_0^{p_F} dp\, p \sin pr}_{\begin{aligned} &= -\frac{\partial}{\partial r}\int_0^{p_F} dp\, \cos pr \\ &= -\frac{\partial}{\partial r}\frac{\sin p_F r}{r} \end{aligned}} \\ &= \frac{1}{2\pi^2 r^3}\left(\sin\, p_F r - p_F r\, \cos\, p_F r\right) \end{aligned}$$

d.h.

$$G(\mathbf{r}) = \frac{3n}{2}\,\frac{\sin\, p_F r - p_F r\, \cos\, p_F r}{(p_F r)^3}$$

Paarverteilungsfunktion
Betrachte den $(N-1)$-Teilchen-Zustand $|\phi'(\mathbf{r},\sigma)\rangle = \psi_\sigma(\mathbf{r})\,|\phi_0\rangle$.
Dichteverteilung dieses Zustandes

$$\begin{aligned} &\left\langle\phi'(\mathbf{r},\sigma)\right|\, \psi^+_{\sigma'}(\mathbf{r}')\psi_{\sigma'}(\mathbf{r}')\, \left|\phi'(\mathbf{r},\sigma)\right\rangle \\ = \;& \langle\phi_0|\, \psi^+_\sigma(\mathbf{r})\psi^+_{\sigma'}(\mathbf{r}')\psi_{\sigma'}(\mathbf{r}')\psi_\sigma(\mathbf{r})\, |\phi_0\rangle \\ =: \;& \left(\frac{n}{2}\right)^2 \underbrace{g_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}_{\text{Paarverteilungsfunktion}} \end{aligned}$$

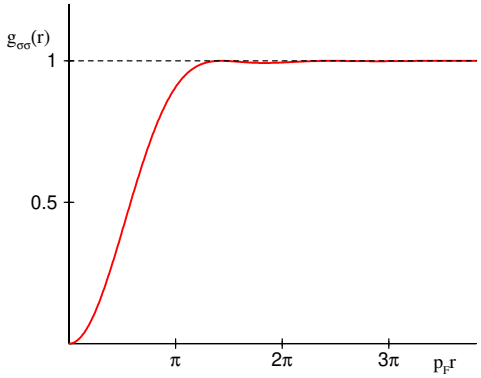


Es ist

$$\begin{aligned}\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{\sigma\sigma'}\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right) &= \langle\phi_0|\,\psi_\sigma^+(\mathbf{r})\psi_\sigma(\mathbf{r})\psi_{\sigma'}^+(\mathbf{r}')\psi_{\sigma'}(\mathbf{r}')\,|\phi_0\rangle \\ &\quad -\delta_{\sigma\sigma'}\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right)\langle\phi_0|\,\psi_\sigma^+(\mathbf{r})\psi_{\sigma'}(\mathbf{r}')\,|\phi_0\rangle \\ &= \langle\phi_0|\,n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')\,|\phi_0\rangle - \delta_{\sigma\sigma'}\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right)\langle\phi_0|\,n(\mathbf{r})\,|\phi_0\rangle\end{aligned}$$

Für $\sigma \neq \sigma'$ ist $g_{\sigma\sigma'}\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right) = 1$ (siehe Übung)
Für $\sigma = \sigma'$ ist $\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{\sigma\sigma'}\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right) = \left(\frac{n}{2}\right)^2 - \left(G_\sigma(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\right)^2$ (siehe Übung)

$$\Longrightarrow g_{\sigma\sigma'}\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right) = 1 - \frac{9}{(p_F r)^6}\left(\sin p_F r - p_F r\,\cos p_F r\right)^2, \quad r = \left|\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right|$$



Wegen

$$g(\mathbf{r}) = \frac{V}{N(N-1)}\left\langle\sum_{\alpha\neq\beta}\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}_\alpha+\mathbf{r}_\beta\right)\right\rangle$$

ist die Paarverteilungsfunktion die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, daß ein Paar von Teilchen den Abstand $\mathbf{r}$ hat!
Korrelationsloch oder Austauschloch von Antisymmetrie des N-Teilchenzustandes!

Dichte-Korrelationsfunktion:

$$\begin{aligned}\tilde{G}(\mathbf{r}) = \langle n(\mathbf{r})n(0)\rangle &= \frac{1}{V}\int d\mathbf{r}'\,\langle n(\mathbf{r}+\mathbf{r}')n(\mathbf{r}')\rangle \\ &= \frac{1}{V}\sum_{\alpha,\beta}\int d\mathbf{r}'\,\langle\delta(\mathbf{r}+\mathbf{r}'-\mathbf{r}_\alpha)\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}_\beta)\rangle \\ &= \frac{1}{V}\sum_{\alpha,\beta}\langle\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_\alpha+\mathbf{r}_\beta)\rangle \\ &= \frac{1}{V}\left(\sum_\alpha\delta(\mathbf{r}) + \frac{N(N-1)}{V}g(\mathbf{r})\right) \\ &= n\delta(\mathbf{r}) + \frac{N(N-1)}{V^2}g(\mathbf{r})\end{aligned}$$

$$\sum_{\alpha\neq\beta}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_\alpha+\mathbf{r}_\beta) \quad\to\quad \int d^3r'\,d^3r''\psi^+(\mathbf{r}')\psi^+(\mathbf{r}'')\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'+\mathbf{r}'')\psi(\mathbf{r}'')\psi(\mathbf{r}')$$
$$= \int d^3r'\psi^+(\mathbf{r}')\psi^+(\mathbf{r}'-\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}'-\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}')$$

$$\left\langle\sum_{\alpha\neq\beta}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_\alpha+\mathbf{r}_\beta)\right\rangle = V\left\langle\psi^+(\mathbf{r}')\psi^+(\mathbf{r}'-\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}'-\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}')\right\rangle$$

Statischer Strukturfaktor:

$$\begin{aligned} S(\mathbf{q}) &:= \frac{1}{N}\left\langle\sum_{\alpha,\beta}e^{-\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_\alpha-\mathbf{r}_\beta)}\right\rangle - N\delta_{\mathbf{q0}} \\ &= \frac{1}{N}\left\langle n_{\mathbf{q}}n_{-\mathbf{q}}\right\rangle - N\delta_{\mathbf{q0}} \\ &= \frac{N}{V}\int d^3r\,e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}g(\mathbf{r}) + 1 - N\delta_{\mathbf{q0}} \end{aligned}$$

d.h.

$$S(\mathbf{q}) - 1 = n\int d^3r\,e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\,(g(\mathbf{r})-1)$$

und

$$g(\mathbf{r}) - 1 = \frac{1}{n}\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\,(S(\mathbf{q})-1)$$

2.6.2 Freie Bosonen

Paarverteilungsfunktionen für freie Bosonen. Wir nehmen an, daß die Bosonen nicht wechselwirken und Spin Null haben. $\rightsquigarrow$ Einzige Quantenzahl ist der Impuls.

Betrachte den N-Teilchen-Zustand

$$|\,\phi\,\rangle = |n_{\mathbf{p}_0}n_{\mathbf{p}_1}\,\cdots\rangle \qquad n_{\mathbf{p}_i}\in\{0,1,2,\cdots\}$$

Teilchendichte:

$$\begin{aligned} \langle\phi|\,\psi^+(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})\,|\phi\rangle &= \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}+i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}\,\langle\phi|\,a^+_{\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}}\,|\phi\rangle \\ &= \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}}n_{\mathbf{k}} = \frac{N}{V} = n \end{aligned}$$

$\rightsquigarrow$ Die Dichte im Zustand $|\,\phi\,\rangle$ ist ortsunabhängig.

Paarverteilungsfunktion:

$$\begin{aligned} n^2g(\mathbf{r}-\mathbf{r}') &= \langle\phi|\,\psi^+(\mathbf{r})\psi^+(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r})\,|\phi\rangle \\ &= \frac{1}{V^2}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q},\mathbf{q}'}e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}-i\mathbf{q}\mathbf{r}'+i\mathbf{q}'\mathbf{r}'+i\mathbf{k}'\mathbf{r}}\,\langle\phi|\,a^+_{\mathbf{k}}a^+_{\mathbf{q}}a_{\mathbf{q}'}a_{\mathbf{k}'}\,|\phi\rangle \end{aligned}$$

$\langle\phi| a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{q}'} a_{\mathbf{k}'} |\phi\rangle$: nur dann verschieden von Null, wenn $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ and $\mathbf{q} = \mathbf{q}'$ oder $\mathbf{k} = \mathbf{q}'$ and $\mathbf{q} = \mathbf{k}'$. Fall $\mathbf{k} = \mathbf{q}$ gesondert betrachten.

$$\begin{aligned}
& \langle\phi| a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{q}'} a_{\mathbf{k}'} |\phi\rangle \\
= \; & (1-\delta_{\mathbf{kq}}) \left(\delta_{\mathbf{kk}'}\delta_{\mathbf{qq}'} \langle\phi| a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{k}} |\phi\rangle + \delta_{\mathbf{kq}'}\delta_{\mathbf{qk}'} \langle\phi| a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{q}} |\phi\rangle\right) \\
& + \delta_{\mathbf{kq}}\delta_{\mathbf{kk}'}\delta_{\mathbf{qq}'} \langle\phi| a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} |\phi\rangle \\
= \; & (1-\delta_{\mathbf{kq}}) \left(\delta_{\mathbf{kk}'}\delta_{\mathbf{qq}'} + \delta_{\mathbf{kq}'}\delta_{\mathbf{qk}'}\right) n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{q}} + \delta_{\mathbf{kq}}\delta_{\mathbf{kk}'}\delta_{\mathbf{qq}'} n_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}} - 1)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Longrightarrow \qquad & \langle\phi| \psi^+(\mathbf{r})\psi^+(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}) |\phi\rangle \\
= \; & \frac{1}{V^2} \left\{ \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} (1-\delta_{\mathbf{kq}}) \left(1 + e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{q})(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\right) n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}} - 1) \right\} \\
= \; & \frac{1}{V^2} \left\{ \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{q}} - \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^2 + \left| \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} n_{\mathbf{k}} \right|^2 - \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^2 + \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^2 - \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} \right\} \\
= \; & n^2 + \left| \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} n_{\mathbf{k}} \right|^2 - \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}} + 1) \qquad (*)
\end{aligned}$$

Der zweite Term ist, im Gegensatz zu Bosonen, positiv, der letzte Term ist bei Fermionen abwesend.

Betrachte zwei Beispiele:
1) Alle Bosonen im gleichen Zustand $\mathbf{p}_0$.

$$n^2 g(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = n^2 + n^2 - \frac{1}{V^2} N(N+1) = \frac{N(N-1)}{V^2}$$

d.h. die Paarverteilungsfunktion ist unabhängig vom Ort, die Amplitude, das erste Teilchen zu detektieren, ist N/V, das zweite $(N-1)/V$.

2) $n_{\mathbf{k}} = \frac{(2\pi)^3 n}{(\sqrt{(\pi)}\Delta)^3} e^{-(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)^2/\Delta^2}$ mit Normierung $\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} n_{\mathbf{p}} = n$, dann ist

$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} n_{\mathbf{k}} = n e^{-\frac{\Delta^2}{4}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2} e^{-i\mathbf{k}_0(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}$$

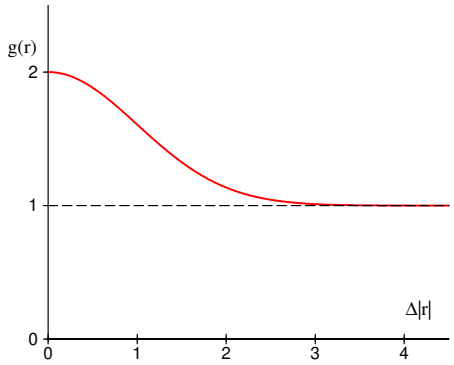
und

$$\frac{1}{V} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} n_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{V} \left[\frac{(2\pi)^3 n}{(\sqrt{\pi}\Delta)^3}\right]^2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{-2(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)^2/\Delta^2} \sim \frac{n^2\Delta^3}{V\Delta^6} \sim \frac{n^2}{V\Delta^3}$$

.

Für $n = \text{const}$ und $\Delta = \text{const}$ verschwindet daher der dritte Term in $(*)$ für $V \to \infty$.

$$n^2 g(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = n^2\left(1 + e^{-\frac{\Delta^2}{2}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2}\right)$$



Für $r < \Delta^{-1}$ ist also die Wahrscheinlichkeit, zwei Teilchen zu finden, erhöht. Bosonen haben wegen der Symmetrie der Wellenfunktion die Tendenz, sich zusammenzuballen.

2.6.3 Schwach wechselwirkende Bosonen

Hamilton-Operator:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{k^2}{2m} a^+_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{p},\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} a^+_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} a^+_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} a_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{k}}, \qquad (\hbar = 1)$$

$a_{\mathbf{k}}/a^+_{\mathbf{k}}$: Bose-Vernichter/Erzeuger

Tiefe Temperaturen: Bose-Einstein-Kondensation in $\mathbf{k} = 0$.Mode, d.h. auch bei schwacher Wechselwirkung $V(\mathbf{r})$ nehmen wir an, daß im Grundzustand $|\,0\,\rangle$ der Einteilchenzustand mit $\mathbf{k} = 0$ *makroskopisch* besetzt ist.

$$N_0 = \langle\, 0\,|a^+_0 a_0|\,0\,\rangle \lesssim N$$

d.h. auch die Zahl der angeregten Teilchen ist klein.

$$N - N_0 \ll N_0 \lesssim N.$$

Vernachlässigen wir also die Wechselwirkung der angeregten Teilchen untereinander und beschränken uns auf die Wechselwirkung der angeregten Teilchen mit den kondensierten Teilchen

$$\begin{aligned}
\rightsquigarrow \quad \hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{k^2}{2m} a^+_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \quad &+ \quad \frac{1}{2V} V_0 a^+_0 a^+_0 a_0 a_0 \qquad (\mathbf{k} = \mathbf{p} = \mathbf{q} = 0) \\
&+ \quad \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} (V_0 + V_{\mathbf{k}})\, a^+_0 a_0 a^+_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \qquad \left(\begin{array}{ccc} & \mathbf{p}=\mathbf{q}=0, & \mathbf{k}=\mathbf{q}=0 \\ \text{and} & \mathbf{p}=0, & \mathbf{k}=-\mathbf{q} \\ \text{bzw.} & \mathbf{q}=0, & \mathbf{k}=-\mathbf{p} \end{array}\right) \\
&+ \quad \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} V_{\mathbf{k}} \left(a^+_{\mathbf{k}} a^+_{-\mathbf{k}} a_0 a_0 + a^+_0 a^+_0 a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}\right) \\
&+ \quad \mathcal{O}(a^3_{\mathbf{k}})
\end{aligned}$$

Wegen

$$\begin{aligned} a_0 \,|\cdots,\, N_0,\, \cdots\rangle &= \sqrt{N_0}\,|\cdots\, N_0 - 1,\, \cdots\rangle \\ a_0^+ \,|\cdots,\, N_0,\, \cdots\rangle &= \sqrt{N_0+1}\,|\cdots,\, N_0+1,\, \cdots\rangle \\ a_0 a_0^+ - a_0^+ a_0 &= 1 \end{aligned}$$

und $N_0 \propto 10^{23} \gg 1$ vernachlässigen wir die Operator-Eigenschaft von a_0^+, a_0 und setzen

$$a_0 = a_0^+ \approx \sqrt{N_0}$$

$$\rightsquigarrow \quad \hat{H} = \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} \frac{k^2}{2m} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2V} N_0^2 V_0 + \frac{N_0}{V} \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} \left\{ (V_0 + V_{\mathbf{k}})\, a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} V_{\mathbf{k}} \left(a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}^+ + a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} \right) \right\} + \cdots$$

N_0 ist momentan noch unbekannt, es muß nur gelten:

$$N = N_0 + \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}$$

(Gesamtteilchenzahl = Zahl der kondensierten Bosonen + Anzahl der angeregten Teilchen.)

Dann ist z.B.

$$\frac{V_0}{2V} N_0^2 = \frac{V_0}{2V} N^2 - \frac{N V_0}{V} \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \frac{V_0}{2V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'(\neq 0)} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'}^+ a_{\mathbf{k}'}$$

und

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} \frac{k^2}{2m} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \underbrace{\frac{V_0}{2V} N_0^2 + \frac{N_0}{V} \sum_{\mathbf{k}} V_0 a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}}_{\approx \frac{N^2 V_0}{2V}} + \frac{N_0}{V} \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} V_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \\ &\quad + \frac{N_0}{V} \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} V_{\mathbf{k}} \left(a_{\mathbf{k}}^+ a_{-\mathbf{k}}^+ + a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} \right) \\ &\approx \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} \frac{k^2}{2m} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \frac{N^2}{2V} V_0 + \frac{N}{V} \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} V_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \\ &\quad + \frac{N}{2V} \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} V_{\mathbf{k}} \left(a_{\mathbf{k}}^+ a_{-\mathbf{k}}^+ + a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} \right) + \hat{H}' \end{aligned}$$

$\hat{H}'$ enthält Terme mit 4 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ($\mathbf{k} \neq 0$) und diese sind von der Größenordnung $n'^2 = (N - N_0)^2/V^2$. Die **Bogolivbov-Näherung** ($\hat{H}'$

zu vernachlässigen) ist dann gut, wenn $n' \ll n$, wie sich zeigen wird für das verdünnte, schwach wechselwirkende Bose-Gas.

$$\text{n.b.} \quad \frac{N}{V} = n \quad !$$

$\hat{H}$ ist eine quadratische Form (in $a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}$), die noch diagonalisiert werden muß (→ **Bogolivbov-Transformation**).

Ansatz:

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}}^+ \\ a_{\mathbf{k}}^+ &= u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^+ + v_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}} \end{aligned}$$

Wenn $u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 = 1$, sind $\alpha_{\mathbf{k}}$ und $\alpha_{\mathbf{k}}^+$ wieder Bose-Operatoren!
(Übung: Zeige $[\alpha_{\mathbf{k}},\ \alpha_{\mathbf{k}'}] = \left[\alpha_{\mathbf{k}}^+,\ \alpha_{\mathbf{k}'}^+\right] = 0, \quad \left[\alpha_{\mathbf{k}},\ \alpha_{\mathbf{k}'}^+\right] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$)

Mit der Umkehrung:

$$\begin{aligned} \alpha_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^+ \\ \alpha_{\mathbf{k}}^+ &= u_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ - v_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} \end{aligned}$$

Nach einiger Rechnung (Übung) ergibt sich

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2V} N^2 V_0 \\ &+ \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} \left(\frac{k^2}{2m} + n V_{\mathbf{k}} \right) \left\{ u_{\mathbf{k}}^2 \alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}^2 \alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^+ + \underline{u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left(\alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{-\mathbf{k}}^+ + \alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}} \right)} \right\} \\ &+ \frac{N}{2V} \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} V_{\mathbf{k}} \left\{ \underline{\left(u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 \right) \left(\alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{-\mathbf{k}}^+ + \alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}} \right)} + 2 u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left(\alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} + \alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^+ \right) \right\} \end{aligned}$$

Damit die nichtdiagonalen (unterstrichenen) Terme verschwinden, muß gelten

$$\left(\frac{k^2}{2m} + n V_{\mathbf{k}} \right) u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + \frac{n}{2} V_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 \right) = 0$$

Mit der Bedingung $u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 = 1$ ergibt sich somit

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{\omega_{\mathbf{k}} + \left(\frac{k^2}{2m} + n V_{\mathbf{k}} \right)}{2\omega_{\mathbf{k}}} \\ v_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{-\omega_{\mathbf{k}} + \left(\frac{k^2}{2m} + n V_{\mathbf{k}} \right)}{2\omega_{\mathbf{k}}} \end{aligned}$$

mit

$$\omega_{\mathbf{k}} = \left[\left(\frac{k^2}{2m} + n V_{\mathbf{k}} \right)^2 - \left(n V_{\mathbf{k}} \right)^2 \right]^{1/2} = \left[\left(\frac{k^2}{2m} \right)^2 + \frac{n k^2 V_{\mathbf{k}}}{m} \right]^{1/2}$$

Es ist dann

$$u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = \frac{\left[\left(\frac{k^2}{2m} + nV_{\mathbf{k}}\right)^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2\right]^{1/2}}{2\omega_{\mathbf{k}}} = -\frac{nV_{\mathbf{k}}}{2\omega_{\mathbf{k}}}$$

also

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{N^2 V_0}{2V} + \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} \left(\frac{k^2}{2m} + nV_{\mathbf{k}}\right) \left(u_{\mathbf{k}}^2 \alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}^2 \left(\underbrace{1 + \alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}}}_{\alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^+} \right) \right) \\
&\quad + \frac{n}{2} V_{\mathbf{k}} 2 \left(-\frac{nV_{\mathbf{k}}}{2\omega_{\mathbf{k}}} \left(\alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} + \underbrace{1 + \alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}}}_{\alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^+} \right) \right) \\
&= \frac{N^2 V_0}{2V} + \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} \left(u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2\right) \alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} + \left(\frac{k^2}{2m} + nV_{\mathbf{k}}\right) v_{\mathbf{k}}^2 - \frac{n^2 V_{\mathbf{k}}^2}{\omega_{\mathbf{k}}} \alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} - \frac{n^2 V_{\mathbf{k}}^2}{2\omega_{\mathbf{k}}} \\
&= \frac{N^2 V_0}{2V} + \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} \frac{1}{\omega_{\mathbf{k}}} \left[\underbrace{\left(\frac{k^2}{2m} + nV_{\mathbf{k}}\right)^2 - (nV_{\mathbf{k}})^2}_{=\omega_{\mathbf{k}}^2} \right] \alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} - \frac{1}{2}\left(\frac{k^2}{2m} + nV_{\mathbf{k}}\right) \\
&\quad + \frac{1}{2\omega_{\mathbf{k}}} \left[\underbrace{\left(\frac{k^2}{2m} + nV_{\mathbf{k}}\right)^2 - \frac{n^2 V_{\mathbf{k}}^2}{\omega_{\mathbf{k}}}}_{=\omega_{\mathbf{k}}^2} \right] \\
\Longrightarrow \quad \hat{H} &= \underbrace{\frac{N^2 V_0}{2V} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} \left(\frac{k^2}{2m} + nV_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}}\right)}_{\text{Grundzustandsenergie } E_0} + \underbrace{\sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} \omega_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}}}_{\text{Anregungen-“Quasiteilchen”}}
\end{aligned}$$

Grundzustand $|\,0\,\rangle$ des Systems ist durch $\alpha_{\mathbf{k}}|\,0\,\rangle = 0$ festgelegt. Zahl der Teilchen außerhalb des Kondensats:

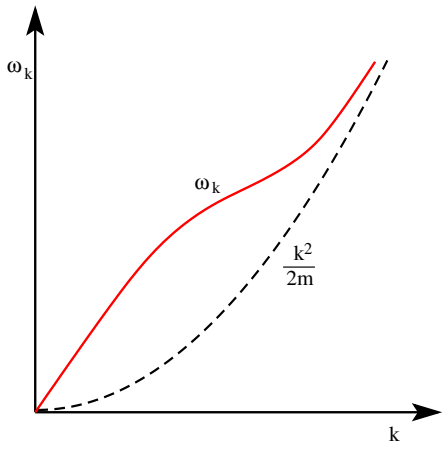
$$N' = \langle 0| \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} |0\rangle = \langle 0| \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} v_{\mathbf{k}}^2 \alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^+ |0\rangle = \sum_{\mathbf{k}(\neq 0)} v_{\mathbf{k}}^2$$

z.B. für $V(\mathbf{r}) = \xi\delta(\mathbf{r})$ folgt $n' = N'/V = \frac{m^{3/2}}{3\pi^2}(\xi n)^{3/2}$ ($\rightsquigarrow$ Übung)
$\Longrightarrow$ n' klein, wenn $\xi n \equiv$ Dicht $\times$ Wechselwirkung-Stärke klein ist! konsistent.

Beachte: n' hängt *nicht* analytisch von ξn ab, d.h. kann nicht störungstheoretisch (ausgehend von $\xi = 0$) erhalten werden.

Die Dispersionsrelation für angeregte Zustände $\alpha_{\mathbf{k}}^+|\,0\,\rangle$ des Systems ist

$$\omega_{\mathbf{k}} = \left\{ \left(\frac{k^2}{2m} \right)^2 + \frac{nk^2 V_{\mathbf{k}}}{m} \right\}^{1/2}$$
$$= \begin{cases} ck & \text{für } k \to 0 \text{ mit } c = \sqrt{\frac{nV_0}{m}} \\ \frac{k^2}{2m} + nV_{\mathbf{k}} & \text{für } k \to \infty \end{cases}$$

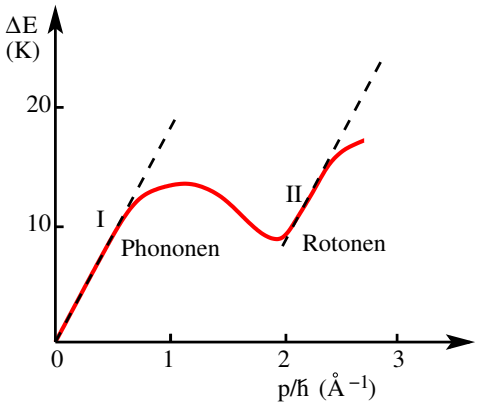


Bemerkung:
$V_{\mathbf{k}=0} = V_0$ muß positiv sein, damit GS ohne Quasiteilchen stabil ist,
d.h. *abstoßende* Wechselwirkung der Bosonen.
$V_{\mathbf{k}\to\infty} \to 0$ für *kurzreichweitiges* Wechselwirkungs-Potential der Bosonen,
d.h. für $k \to \infty$ ist $\omega_{\mathbf{k}}$ identisch mit E_{kin} der freien Bosonen.

Besonderheit: $\min \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k} =: v_{\text{kr}} \neq 0 \rightsquigarrow$ Suprafluidität!

2.6.4 Suprafluidität

Quasiteilchenanregungen in suprafluiden He^4



Bereich I:
Anregungen: Photonen

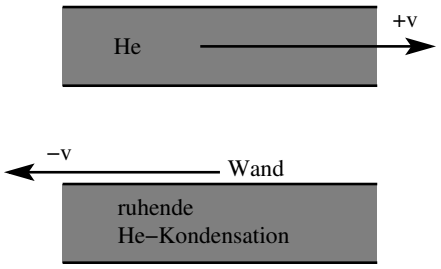
$$\varepsilon_p = cp, \quad c = 238\text{m/sec}$$

Bereich II:
Minimum bei $p_0 = 1.91^{-1}\hbar$
Anregungen: Rotonen

$$\varepsilon_p = \Delta + \frac{(|p| - p_0)^2}{2\mu}, \quad \mu = 0.16\text{m}_{\text{He}}, \ \Delta/k = 8.6\text{K}$$

Konsequenzen für das dynamische Verhalten:
Zweifluüssigkeitsmodell, Suprafluidität (Landau):

$T = 0$; Flüssigkeit im Grundzustand, Kondensat, *keine* Anregungen. Dieses Kondensat bewegt sich als Ganzes in einem Rohr mit Driftgeschwindigkeit v



Behauptung:
Es findet keine Reibung statt, wenn nur $v < v_{\text{krit}}$. Betrachte Galilei-Transformation, Kondensat in Ruhe, Wand bewegt. Wäre das Kondensat zäh, so würde das Rohr abgebremst, wobei Energie und Impuls in Form von Anregungen (Quasiteilchen) im Kondensat übertragen wird.

Angenommen, es gibt eine Anregung mit Impuls $\mathbf{p}$ und Energie $\varepsilon(\mathbf{p})$.

Ruhesystem:

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}, \quad E = \frac{P^2}{2M} + E_{\text{int}} = \frac{p^2}{2M} + E_{\text{int}} = \varepsilon(\mathbf{p})$$

Laborsystem:

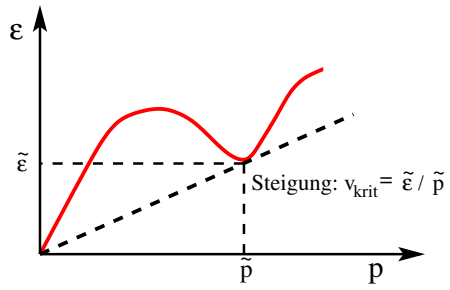
$$\begin{aligned} \mathbf{P} = M\mathbf{v} + \mathbf{p}, \quad E &= \frac{M}{2}v^2 + \mathbf{v}\cdot\mathbf{p} + \frac{p^2}{2M} + E_{\text{int}} \\ &= \frac{M}{2}v^2 + \mathbf{v}\cdot\mathbf{p} + \varepsilon(\mathbf{p}) \end{aligned}$$

$$\Longrightarrow \Delta E = \varepsilon(\mathbf{p}) + \mathbf{v}\cdot\mathbf{p}$$

Ist energetisch günstig, Quasiteilchen anzuregen? $\Delta E < 0$?
Da $\varepsilon > 0$ muß $\mathbf{p}\cdot\mathbf{v} < 0$,
$-\mathbf{p}\cdot\mathbf{v} \leq \mathbf{p}\cdot\mathbf{v} \quad \Longrightarrow$ Bedingung: $\varepsilon(p) - pv < 0$ bzw. $v > \frac{\varepsilon(p)}{p}$.

Damit also eine Anregung mit $\mathbf{p}$ und $\varepsilon(\mathbf{p})$ möglich ist, muß

$$v \geq v_{\text{krit}} = \min_p \frac{\varepsilon(p)}{p}$$



Folgerung:
Für alle $v < v_{\text{krit}}$ ist keine Anregung möglich, das Kondensat fließt also reibungsfrei
$\rightsquigarrow$ Suprafluidität.

$T > 0$: Dann sind schon Anregungen vorhanden, diese können mit der Wand stoßen, Energie und Impuls ausstauschen. $\rightsquigarrow$ Reibung des Normalanteils, aber bis herauf zu T_ξ ist ein makroskopisches Kondensat vorhanden.

Kapitel 3

Streuung und Response

3.1 Streuung und Response

Betrachte Vielteilchensystem (Festkörper, Flüssigkeit, Gas) und zeitabhängiges Feld $E\, e^{i(\mathbf{kr}-\omega t)} \rightsquigarrow$ Induzierung einer "Polarisation":

$$\underbrace{P(\mathbf{k},\omega)\, e^{(i(\mathbf{kr}-\omega t)}}_{\text{Periodizität d. streuenden Feldes}} \quad \underbrace{P(\mathbf{k},2\omega)\, e^{i(\mathbf{kr}-2\omega t)} + P(2\mathbf{k},\omega)\, e^{i(\mathbf{kr}-\omega t)} + \ldots}_{\text{nichtlineare Effekte}}$$

Lineare Suszeptibilität (Eigenschaft der ungestörten Probe):

$$\chi(\mathbf{k},\omega) := \lim_{E\to 0} \frac{P(\mathbf{k},\omega)}{E}$$

Streuexperimente (mit Teilchen!):
(Wellenlänge der Teilchen vergleichbar mit zu untersuchenden Strukturen)
Energie vergleichbar mit Anregungsenergien der Quasiteilchen.

z.B. Neutronenstreuung mit thermischen Neutronen (aus Kernreaktionen)
($\lambda \approx 0.18\, nm$ für $E = 25\, meV \approx 290\, K$).

Inelastischer Streuquerschnitt
H_0: Hamilton-Operator des Vielteilchensystems
Koordinaten der Teilchen des Vielteilchensystems $\mathbf{x}_\alpha$ (Ort und andere)
$\mathbf{r}, m_s$: Ort, Spin des streuenden Teilchens
m: Masse des streuenden Teilchens

$$\rightsquigarrow H \quad = \quad H_0 + \frac{P^2}{2m} + W(\{x_\alpha\}, \mathbf{r})$$

wobei $P^2/2m = E_{\text{kin}}$ des Streuteilchen und $+W(\{x_\alpha\}, \mathbf{r})$ Wechselwirkung zwischen Substanz und Streuteilchen.

In zweiter Quantisierung

$$\begin{aligned} H &= H_0 + \frac{P^2}{2m} + \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''\sigma'\sigma''} a^+_{\mathbf{k}'\sigma'} a_{\mathbf{k}''\sigma''} \frac{1}{V} \int d\mathbf{r}\, e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k}'')} W^{\sigma'\sigma''}(\{x_\alpha\}, \mathbf{r}) \\ &= H_0 + \frac{P^2}{2m} + \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''\sigma'\sigma''} a^+_{\mathbf{k}'\sigma'} a_{\mathbf{k}''\sigma''} W^{\sigma'\sigma''}_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}''}(\{x_\alpha\}) \end{aligned}$$

$a^+_{\mathbf{k}'\sigma'}$ erzeugt Streuteilchen mit $\mathbf{k}', \sigma'$
$a_{\mathbf{k}''\sigma''}$ vernichtet Streuteilchen mit $\mathbf{k}'', \sigma''$

Eigenzustände von H_0: $\quad H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$

Skizze fehlt !!

Inelastische Streuung
Impulsübertrag: $\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$
Energieübertrag: $\hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2m}(k_1^2 - k_2^2)$

Anfangszustand $|\mathbf{k}_1, m_{s_1}, n_1\rangle$ $\quad$ ($|n_1\rangle$ Zustand d. Prob. am Anfang)
Endzustand $|\mathbf{k}_2, m_{s_2}, n_2\rangle$ $\quad$ ($|n_2\rangle$ Zustand d. Prob. am Ende)

Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit (n. goldene Regel):

$$\begin{aligned} &\Gamma(\mathbf{k}_1, m_{s_1}, n_1 \to \mathbf{k}_2, m_{s_2}, n_2) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}_2, m_{s_2}, n_2 | W | \mathbf{k}_2, m_{s_1}, n_1 \rangle|^2 \quad \cdot \quad \delta(E_{n_1} - E_{n_2} + \hbar\omega) \end{aligned}$$

wobei gilt: $\langle \mathbf{k}_2, m_{s_2}, n_2 | W | \mathbf{k}_2, m_{s_1}, n_1 \rangle = W^{m_{s_1} m_{s_2}}_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1}(\{x_\alpha\})$
und $\hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2m}(k_1^2 - k_2^2)$.

Verteilung der Anfangszustände $|n_1\rangle$ der Probe: $p(n_1) \geq 0$ mit $\sum\limits_{n_1} p(n_1) = 1$
Verteilung der Spinzustände m_{s_1} des Streuteilchens: $p_s(m_{s_1})$ mit $\sum\limits_{m_{s_1}} p_s(m_{s1}) = 1$

Falls nur $\mathbf{k}_2$ (und nicht m_{s_1}) gemessen wird:

$$\Gamma(\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_2 = \sum_{n_2 n_1} \sum_{m_{s_1} m_{s_2}} p(n1) p_s(m_{s_1}) \Gamma(\mathbf{k}_1 m_{s_1} n_1 \to \mathbf{k}_2 m_{s_2} n_2)$$

(Doppelt) Differentieller Streuquerschnitt pro Atom:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\epsilon} \quad d\Omega d\epsilon = \frac{\text{Wahrsch. f. Übergang in} \quad d\Omega d\epsilon / s}{\text{Anzahl d. Streuer} \times \text{Fluss d. einfallenden Teilchen}}$$

Normierungsvolumen: L^3, Anzahl der Streuer = N, Raumwinkelelement i.d. gestreut wird $d\Omega$, Fluss der einfallenden Teilchen = Betrag der Stromdichte d. einfallenden Teilchen.

Zustände d. einfallenden Teilchens $\psi_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}}\, e^{i\mathbf{k}_1\mathbf{r}} \Rightarrow$ Stromdichte $j(\mathbf{r}) = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi^\star\nabla\psi - (\nabla\psi^\star|\psi) = \frac{\hbar\mathbf{k}_1}{mL^3}$ also $\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\epsilon}\, d\Omega d\epsilon = \frac{1}{N}\frac{mL^3}{\hbar k_1}\Gamma(\mathbf{k}_1 \to \mathbf{k}_2)\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\, d^3k_2$

$\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\, d^3k_2 =$ Zahl der Endzustände von $\mathbf{k}_2$ im Intervall d^3k_2

Bem. Systeme im Gleichgewicht: $p(n_1) = \frac{e^{-\beta E_{n_1}}}{Z}$ (von Dichtematrix $\rho = \frac{e^{-\beta H_0}}{Z}$).

Wegen $\delta(\omega) = \int \frac{dt}{2\pi}\, e^{i\omega t}$ enthält der Streuquerschnitt den Faktor

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\hbar}\int \frac{dt}{2\pi}\, e^{i(E_{n_1}-E_{n_2}+\hbar\omega)t/\hbar}\, \langle n_1|e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}_\alpha}|n_2\rangle \\ = \;& \frac{1}{2\pi\hbar}\int dt\, e^{i\omega t}\langle n_1|e^{iH_0t/\hbar}e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}_\alpha}e^{-iH_0t/\hbar}|n_2\rangle \\ = \;& \frac{1}{2\pi\hbar}\int dt\, e^{i\omega t}\langle n_1|e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}_\alpha(t)}|n_2\rangle \end{aligned}$$

$$\Rightarrow S_{\substack{\text{koh}\\\text{ink}}}(\mathbf{k},\omega) = \int \frac{dt}{2\pi\hbar}\, e^{i\omega t}\, \frac{1}{N}\sum_{\alpha\beta}\langle e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}_\alpha(t)}e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}_\beta(0)}\rangle \begin{pmatrix} 1 \\ \delta_{\alpha\beta}\end{pmatrix}$$

wobei koh bzw. ink $\hat{=}$ kohärente bzw. inkohärente dynamische Strukturfunktion (enth. elastischen ($\omega = 0$) und inelastischen ($\omega \neq 0$) Anteil. Hier ist $\langle .O.\rangle = \sum\limits_n \frac{e^{-\beta E_n}}{Z}\, \langle n|O|n\rangle = S_p(\rho O)$.

Mit dem Dichteoperator für das System des Streuzentrums:

$$\rho(\mathbf{x},t) = \sum_{\alpha=1}^{N}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_\alpha(t))$$

Fourier-Trafo

$$\rho_{\mathbf{k}}(t) = \frac{1}{\sqrt{V}}\int d^3x\, e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}}\rho(\mathbf{x},t) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\alpha=1}^{N} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}_\alpha(t)}$$

$$\Rightarrow S_{koh}(\mathbf{k},\omega) = \int \frac{dt}{2\pi\hbar}\, e^{i\omega t}\, \frac{V}{N}\langle \rho_{\mathbf{k}}(t)\, \rho_{-\mathbf{k}}(O)\rangle$$

wobei $\rho_{\mathbf{k}}(t) \hat{=}$ Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion, $\hbar\mathbf{k} \hat{=}$ Impulsübertrag, $\omega \hat{=}$ Energieübertrag des Neutrons an das System.

Anwendung: Streuung an Festkörpern zur Bestimmung der Gitterdynamik

Ein-Phonon-Streuung: Resonanzen bei $\pm\omega_{t_1}(\mathbf{k}), \pm\omega_{t_2}(\mathbf{k})$, beides transversale Phononen und $\pm\omega_l(\mathbf{k})$ longitudinale Phononen.

Breite der Resonanzen: Lebensdauer der Phononen
Hintergrund: Mehrphononenstreuung

Intensität der Resonanzen: Hängt über Skalarprodukt von $\mathbf{k}$ von Polarisationsvektor der Phononen und dem sog. Debye-Waller-Faktor und Streugeometrie ab.
Streuquerschnitt $\longleftrightarrow$ Korrelationsfunktion des Vielteilchensystems
I.f.: Korrelationsfunktion $\longleftrightarrow$ Response-Funktion

Mit $\epsilon = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m}$ folgt $d\epsilon = \frac{\hbar^2 k_2}{2m}\, dk_2$ oder $d^3k_2 = \frac{m}{\hbar}\, k_2\, d\epsilon d\Omega$

$$\Rightarrow \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\epsilon} = \Big(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\Big)^2 \frac{k^2}{k_1}\frac{L^6}{N} \sum_{\substack{n_1 n_2 \\ m_{s_1} m_{s_2}}} p(n_1)p(m_{s_1})|\langle \mathbf{k}_1 m_{s_1} n_1|W|\mathbf{k}_2 m_{s_2} n_2\rangle|^2\, \delta(E_{n_1} - E_{n_2} + \hbar\omega)$$

Spezialfall: **Neutronenstreuung** (ungeladene Teilchen)
$\rightsquigarrow$ Streuung nur an den Kernen
Reichweite Kernkräfte: $R \approx 10^{-12}\, cm \;\Rightarrow\; K_1 R \approx 10^{-4} \ll 1 \Rightarrow$ nur s-Wellen-Streuung

$\Rightarrow$ WW kann durch effektives Pseudopotential dargestellt werden.

$$W(x) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_{\alpha=1}^{N} a_\alpha\, \delta(x_\alpha - x)$$

mit $a_\alpha \hat{=}$ Streulänge der Kerne (Bornsche Näherung)
$\rightsquigarrow$ unabhängig vom Spin m_{s_1}!

$$\Rightarrow \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\epsilon}\, d\Omega d\epsilon = \frac{k_2}{k_1}\frac{1}{N} \sum_{n_1 n_2} p(n_1) \left| \sum_{\alpha=1}^{N} a_\alpha \langle n_2|e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}_\alpha}|n_1\rangle \right|^2 \delta(E_{n_1} - E_{n_2} + \hbar\omega)$$

Beachte

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_1|\, W\, |\mathbf{k}_2\rangle &= \frac{2\pi\hbar^2}{mL^3} \int d^3x\, e^{-i\mathbf{k}_1\mathbf{x}} \sum_\alpha a_\alpha \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_\alpha) e^{i\mathbf{k}_2\mathbf{x}} \\ &= \frac{2\pi\hbar^2}{mL^3} \sum_\alpha a_\alpha e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)\mathbf{x}_\alpha} \end{aligned}$$

Es ist

$$\left| \sum_{\alpha=1}^{N} a_\alpha \langle n_2|e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}_\alpha}|n_1\rangle \right|^2 = \sum_{\alpha,\beta} a_\alpha a_\beta \langle n_1|e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}_\alpha}|n_2\rangle \langle n_2|e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}_\beta}|n_1\rangle\; \delta(E_{n_1} - E_{n_2} + k\omega)$$

Mittelung über Isotope mit verschiedener Streulänge.
Annahme: Position der Isotope statistisch unabhängig verteilt
$\Rightarrow$

$$\text{mit} \quad \overline{a} := \frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^{N} a_\alpha\, ;\, \overline{a^2} = \frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^{N} a_\alpha^2$$

$$\overline{a_\alpha a_\beta} = \begin{cases} \overline{a}^2 & \text{für} \quad \alpha \neq \beta \\ \overline{a^2} & \text{für} \quad \alpha = \beta \end{cases}$$

$\Rightarrow$ Zerlegung des Streuquerschnitts in **kohärenten** und **inkohärenten** Teil.

$$\begin{aligned}
\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\epsilon} &= A_{\text{koh}}\, S_{\text{koh}}(\mathbf{k},\omega) + A_{\text{ink}}\, S_{\text{ink}}(\mathbf{k},\omega) \\
A_{\text{koh}} &= \overline{a}^2 \frac{k_2}{k_1}\,;\; A_{\text{ink}} = (\overline{a^2} - \overline{a}^2)\frac{k_2}{k_1} \\
S_{\text{koh}} &= \frac{1}{N}\sum_{\alpha\beta}\sum_{n_1 n_2} p(n_1) \overbrace{\langle n_1|e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}_\alpha}|n_2\rangle\langle n_2|e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}_\beta}|n_1\rangle}^{\text{Amplitude superponieren, Interferenz}} \delta(E_{n_1} - E_{n_2} + \hbar\omega) \\
S_{\text{ink}} &= \frac{1}{N}\sum_{\alpha}\sum_{n_1 n_2} p(n_1) \underbrace{|\langle n_1|e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}_\alpha}|n_2\rangle|^2}_{\text{Intensitäten superponieren, keine Interferenz}} \delta(E_{n_1} - E_{n_2} + \hbar\omega)
\end{aligned}$$

S_{koh} beschreibt Korrelationen verschiedener Atome
S_{ink} beschreibt Auto-Korrelationen

3.2 Korrelations- und Responsefunktionen

H_0 Hamiltonoperator eines Vielteilchensystems, zeitunabhängig.
Schrödingergleichung: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi,t\rangle = H_0|\psi,t\rangle$
Formale Lösung:

$$|\psi,t\rangle = \underbrace{e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar}}_{=:U(t,\omega)}|\psi,t_0\rangle$$

Heisenberg-Bild:

$$\begin{aligned}
\text{Zustand} \quad |\psi_H\rangle &= |\psi,t_0\rangle && \text{zeitunabhängig,} \\
\text{Operator} \quad A(t) &= \psi_0^+(t,t_0)\, A\, U_0(t,t_0) && \text{zeitabhängig} \\
& && \left(\frac{d}{dt}A(t) = \frac{1}{\hbar}[H_0, A(t)]\right)
\end{aligned}$$

Dichtematrix:

$$\begin{aligned}
\rho &= Z^{-1}e^{-\beta\hat{H}_0} \quad ; \quad Z = Sp\, e^{-\beta H_0} \\
\rho_{gk} &= Z_{gk}^{-1}\, e^{-\beta(H_0-\mu N)} \quad Z_{gk} = Sp\, e^{-\beta(H_0-\mu N)} \\
\text{Mittelwert :} \quad \langle O\rangle &= Sp\,(\rho O)
\end{aligned}$$

Korrelationsfunktion:

$$\begin{aligned}
C_{AB}(t,t') :&= \langle A(t)\, B(t')\rangle \\
&= Sp\,(\rho e^{iH_o t/\hbar} A e^{-iH_0 t/\hbar} e^{iH_0 t'/\hbar} B e^{-iH_0 t'/\hbar}) \\
&= Sp(\rho e^{iH_o(t-t')/\hbar} A e^{-iH_0(t-t')/\hbar} B) \\
&= C_{AB}(t-t',0) \Rightarrow \qquad \text{zeitl. Translationsinvarianz.}
\end{aligned}$$

Def.:

$$\left.\begin{aligned} G_{AB}^{>}(t) :&= \langle A(t)\, B(0)\rangle \\ G_{AB}^{<}(t) :&= \langle B(0)\, A(t)\rangle \end{aligned}\right\} \rightsquigarrow \text{Fourier-Trafo :} \quad G_{\lessgtr AB}^{>}(\omega) = \int dt\, e^{i\omega t}\, G_{\lessgtr AB}^{>}(t)$$

$$
\begin{aligned}
\rightsquigarrow G^{>}_{AB}(\omega) &= \int dt\, e^{i\omega t}\, Sp\,(\rho e^{iH_0 t/\hbar} A e^{-iH_0 t/\hbar} B) \\
&= \int dt\, e^{i\omega t} \sum_{n,m} \langle n| \frac{e^{-\beta H_0}}{Z}\, e^{iH_0 t/\hbar}\, A|m\rangle\langle m| e^{-iH_o t/\hbar} B|n\rangle \\
&= \int dt\, e^{i\omega t}\, \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} e^{iE_n t/\hbar} \langle n|A|m\rangle\, e^{-iE_m t/\hbar} \langle m|B|n\rangle \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \langle n|A|m\rangle\langle m|B|n\rangle \int dt\, e^{it(\frac{E_n - E_m}{\hbar} + \omega)}
\end{aligned}
$$

$$
\Rightarrow G^{>}_{AB}(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \langle n|A|m\rangle\langle m|B|n\rangle\; 2\pi\delta\left(\frac{E_n - E_m}{\hbar} + \omega\right) \quad (3.1)
$$

$$
\text{und} \quad G^{<}_{AB}(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \langle n|B|m\rangle\langle m|A|n\rangle\; 2\pi\delta\left(\frac{E_n - E_m}{\hbar} + \omega\right) \quad (3.2)
$$

$$
\Rightarrow G^{>}_{AB}(\omega) = G^{<}_{BA}(\omega)
$$

$$
G^{<}_{AB}(\omega) = G^{>}_{AB}(\omega)\, e^{-\beta\hbar\omega} \quad (3.3)
$$

$$
\rightarrow \underset{m \leftrightarrow n}{=} \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_m} \langle m|B|n\rangle\langle n|A|m\rangle\, 2\pi\delta\left(\frac{E_n - E_m}{\hbar} + \omega\right) \quad (3.4)
$$

$$
\Rightarrow E_m = E_n + \hbar\omega \quad (3.5)
$$

z.B.

$$
A = \rho_k, \quad B = \rho_{-k}, \quad \rho(\mathbf{r},t) = \sum_{\alpha=1}^{N} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha(r)) \quad \text{Dichteoperator}
$$

$$
\rho_{\mathbf{k}}(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \int d^3\mathbf{r}\, e^{-i\mathbf{kr}}\, \rho(\mathbf{r},t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\alpha=1}^{N} e^{-i\mathbf{kr}_\alpha(t)}
$$

Fourier-Trafo der Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion: $\langle \rho_{\mathbf{k}}(t)\rho_{-\mathbf{k}}(t)\rangle$

Streutheorie $\Rightarrow$ Kohärenter Streuquerschnitt

$$
S_{\text{koh}}(\mathbf{k},\omega) = \int \frac{dt}{2\pi\hbar}\, e^{i\omega t} \frac{V}{N} \langle \rho_{\mathbf{k}}(t)\rho_{-\mathbf{k}}(t)
$$

Wegen (3.3) also

$$
\begin{aligned}
S_{\text{koh}}(\mathbf{k},-\omega) &= e^{-\beta\omega} S_{\text{koh}}(-\mathbf{k},\omega) \\
&= S_{\text{koh}}(\mathbf{k},\omega) \quad \text{für spiegelinvariante Systeme}
\end{aligned}
$$

$\Rightarrow$ Anti-Stokes-Linien (Energieabgabe des Streuobjektes) um $e^{-\beta\hbar\omega}$ schwächer als Stokes-Linien (Energieaufnahme).

Für $T \to 0 \quad S_{\text{koh}}(\mathbf{k},\omega < 0) \to 0$
(System im GZ, kann keine Energie an das Streuteilchen abgeben).

3.3 Dynamische Suszeptibilität

Betrachte Vielteilchensystem, auf das eine äußere Kraft $F(t)$ einwirkt, die an den Operator B koppelt:

$$H = H_0 + H'(t) \quad ; \quad H'(t) = -\underbrace{F(t)}_{c-\text{Zahl}} \cdot \overline{B} \tag{3.6}$$

Für $t \leq t_0$: $F(t) = 0$, System im Gleichgewicht.

Frage: Was ist die Antwort des Systems auf die Störung (3.6)?

Mittelwert von A zur Zeit t:

$$\begin{aligned}
\underbrace{\overline{A(t)}}_{=\langle A(t)\rangle} = Sp(\rho_S(t)A) &= S_p(U(t,t_0)\,\rho_S(t_0)\,U^+(t,t_0)A) \\
&= S_p(\rho_S(t_0)\,U^+(t,t_0)\,A\,U(t,t_0)) \\
&= S_p\left(\frac{e^{-\beta H_0}}{Z}U^+(t,t_0)\,A\,U(t,t_0)\right) = \langle U^+(t,t_0)\,A\,U(t,t_0)\rangle = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}
\end{aligned}$$

Da bei t_0 Gleichgewicht, ist $\rho_S(t_0) = e^{-\beta H_0}/Z$.
$U(t,t_0)$ lässt sich störungstheoretisch in WW-Darstellung berechnen.
Es ist $i\hbar\frac{d}{dt}U(t,t_0) = H\,U(t,t_0)$.
Ansatz:

$$\begin{aligned}
U(t,t_0) &= e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar}\,U'(t,t_0) \\
\Rightarrow i\hbar\frac{d}{dt}U'(t,t_0) &= e^{iH_0(t-t_0)/\hbar}\underbrace{(-H_0+H)}_{=H'(t)}U \\
\text{Also} \quad i\hbar\frac{d}{dt}U'(t,t_0) &= H_I'(t)\,U'(t,t_0) \\
&\qquad H_I'(t) = e^{iH_0(t-t_0)/\hbar}H'\,e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar}
\end{aligned}$$

"Wechseldarstellung von H'".

$$\begin{aligned}
\Rightarrow U'(t,t_0) &= 1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\,H_I'(t')\,U'(t',t_0) \\
&= 1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\,H_I'(t') + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_{t_0}^{t} dt' + \int_{t_0}^{t'} dt''\,H_I'(t')\,H_I'(t'') + \ldots \qquad (3.7) \\
&= \mathcal{T}\exp\left\{\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\,H_I'(t')\right\}
\end{aligned}$$

mit $\mathcal{T} \hat{=}$ Zeitordnungsoperator (letzte Zeile wird im folgenden nicht gebraucht, daher keine detaillierte Herleitung des zeitgeordneten Produkts).

Für die **lineare** Antwort brauchen wir nur die ersten beiden Terme in (3.7).

$$\begin{aligned}
\rightsquigarrow \langle A(t)\rangle &= \langle U'^{+}(t,t_0)\, e^{+iH_0(t-t_0)/\hbar} A\, e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar} U'(t,t_0)\rangle_0 \\
&= \left\langle \left(1 - \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' H_I'(t')\right) e^{iH_0(t-t_0)/\hbar}\, A\, e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar} \left(1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' H_I'(t')\right)\right\rangle_0 \\
&= \underbrace{\langle e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} A\, e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar}\rangle_0}_{=S_P\left(\frac{e^{-\beta H_0}}{Z}\, e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} A\, e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar}\right)=S_P\left(\frac{e^{-\beta H_0}}{Z} A\right)=\langle A\rangle_0} \\
&\quad + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \,\langle [e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} A\, e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar}, \underbrace{H_I'(t')}_{=e^{iH_0(t-t')/\hbar} H' e^{-iH_0(t-t')/\hbar}=-B(t')\cdot F(t')}]\rangle_0
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \langle A(t)\rangle = \langle A\rangle_0 - \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \,\langle [A(t), B(t')]\rangle_0 \, F(t')$$

Anfangszeitpunkt $t_0 \to -\infty$ (u.U. $F(t')$ erst später einschalten) $\Rightarrow$

$$\begin{aligned}
\Delta\langle A(t)\rangle &:= \langle A(t)\rangle - \langle A\rangle_0 = \int_{-\infty}^{\infty} dt'\, \chi_{AB}(t-t')\, F(t') \\
\text{mit}\quad \chi_{AB}(t-t') &:= \frac{i}{\hbar}\Theta(t-t')\langle [A(t), B(t')]\rangle_0
\end{aligned}$$

χ_{AB} Suszeptibilität oder lineare Response-Funktion, $\Theta(x) = \begin{cases} 1 & x \geq 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$

$\Theta(x)$ sorgt für Kausalität.

Fourier-Trafo der dynamischen Suszeptibilität

$$\chi_{AB}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{izt} \chi_{AB}(t) \qquad z \,\text{Komplex}$$

Betrachte langsam eingeschaltete Störung ($\epsilon \to 0, \epsilon > 0$)

$$H' = -(BF_\omega e^{-i\omega t'} + B^{+} F_\omega^{\star}\, e^{i\omega t} e^{\epsilon t'}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \Delta\langle A(t)\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dt' \left(\chi_{AB}(t-t')\, F_\omega e^{-i\omega t'} + \chi_{AB^{+}}(t-t')\, F_\omega^{\star}\, e^{i\omega t'}\right) \underbrace{e^{\epsilon t'}}_{\underset{\epsilon\to 0}{\longrightarrow} 1} \\
&= \chi_{AB}(\omega)\, F_\omega\, e^{-i\omega t} + \chi_{AB^{+}}(-\omega)\, F_\omega^{\star}\, e^{-i\omega t}
\end{aligned}$$

$F_\omega \hat{=}$ Wirkung der periodischen Störung auf $\Delta\langle A(t)\rangle$ proportional zur Kraft.

Resonanzen in der Suszeptibilität: Starke Reaktion auf die Kraft bei der entsprechenden Frequenz.

3.4 Dispersionsrelation

Kausalität $\Rightarrow \quad \chi_{AB}(t) = 0$ für $t < 0$
$\Rightarrow \quad \chi_{AB}(z)$ ist analytisch in der oberen Halbebene (wg. $e^{-Imz\cdot t}$ in Fourier-Trafo)
$\Rightarrow \quad \chi_{AB}(z) = \frac{1}{2\pi i} \int\limits_c dz' \, \frac{\chi_{AB}(z')}{z'-z}$ (Cauchy)
Figur fehlt!! $\leftarrow$ Integrationsweg in der oberen komplexen Halbebene trägt nichts bei, wenn $\chi_{AB}(z')$ hinreichend schnell abfällt.

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad \chi_{AB}(z) &= \frac{1}{2\pi i} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx' \, \frac{\chi_{AB}(x')}{x'-z} \\ \underset{\text{für reelles } x}{\rightarrow} \quad \chi_{AB}(x) &= \lim_{x\to 0} \chi_{AB}(x+i\epsilon) = \lim_{\epsilon\to 0} \int \frac{dx'}{2\pi i} \, \frac{\chi_{AB}(x')}{x'-x-i\epsilon} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon\to 0} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx'}{2\pi i} \, \frac{f(x')}{x'-x-i\epsilon} &= \lim_{\epsilon\to 0} \left(\int\limits_{-\infty}^{x-\epsilon} \frac{dx'}{2\pi i} \int\limits_{x+\epsilon}^{+\infty} \frac{dx'}{2\pi i} \right) \frac{f(x')}{x'-x} + \frac{1}{2} \underbrace{\oint \frac{dz}{2\pi i} \, \frac{f(z)}{z-x}}_{=f(x)} \\ &= P \int \frac{dx'}{2\pi i} \frac{f(x')}{x'-x} + \frac{1}{2} dx' \, f(x') \, \delta(x-x') \end{aligned}$$

d.h. formal:

$$\boxed{\frac{1}{x'-x-i\epsilon} = P\left(\frac{1}{x'-x}\right) + \pi i \, \delta(x'-x)}$$

d.h.

$$\begin{aligned} \chi_{AB}(x) &= P \int \frac{dx'}{2\pi i} \, \frac{\chi_{AB}(x')}{x'-x} + \frac{1}{2} \chi_{AB}(x) \\ \Rightarrow \chi_{AB}(x) &= \frac{1}{\pi i} P \int dx' \, \frac{\chi_{AB}(x')}{x'-x} \end{aligned}$$

d.h.

$$\begin{aligned} \mathrm{Re}\, \chi_{AB}(x) &= \mathrm{Re} \left\{ \frac{1}{\pi i} P \int dx' \frac{i \, \mathrm{Im}\, \chi_{AB}(x') + \mathrm{Re}\, \chi_{AB}(x')}{x'-x} \right\} \\ &= \frac{1}{\pi} \, P \int dx' \frac{i \, \mathrm{Im}\, \chi_{AB}(x')}{x'-x} \end{aligned}$$

siehe Übung $\Rightarrow$

$$\begin{aligned} \mathrm{Re}\, \chi_{AB}(w) &= \frac{1}{\pi} \, P \int dw' \, \frac{Im\, \chi_{AB}(w')}{w'-w} \\ \mathrm{Im}\, \chi_{AB}(w) &= -\frac{1}{\pi} \, P \int dw' \, \frac{Re\, \chi_{AB}(w')}{w'-w} \end{aligned}$$

mit dem Cauchyschen Hauptwert

$$P\int dx'\,\frac{f(x')}{x'-x}=\lim_{\epsilon\to 0}\left(\int\limits_{-\infty}^{x-\epsilon}dx'+\int\limits_{x+\epsilon}^{\infty}dx'\right)\frac{f(x')}{x'-x}$$

3.5 Spektraldarstellung

Def.: Dissipative Antwort $\chi''_{AB}(t)=\frac{1}{2\hbar}\langle[A(t),B(0)]\rangle$,
Fourier-Trafo: $\chi''_{AB}(\omega)=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}d\,e^{i\omega t}\,\chi''_{AB}(t)$.
Wegen $\Theta(t)=\lim_{\epsilon\to 0}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\,e^{-i\omega t}\,\frac{i}{w+i\epsilon}$ folgt

$$\chi_{AB}(\omega) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty}dt\,e^{i\omega t}\Theta(t)2i\,\chi''_{AB}(t) \tag{3.8}$$

$$= \frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}d\omega'\,\frac{\chi''_{AB}(w')}{\omega'-\omega-i\epsilon} \tag{3.9}$$

$$= \underbrace{\frac{1}{\pi}P\int d\omega'\,\frac{\chi''_{AB}(\omega')}{\omega'-\omega}}_{=:\chi'_{AB}(\omega)}+i\chi''_{AB}(\omega) \tag{3.10}$$

d.h. $\chi_{AB}(\omega)=\chi'_{AB}(\omega)+i\chi''_{AB}(\omega)$
Zerlegung nach Real- und Imaginärteil, wenn $\chi''_{AB}(\omega)$ reell.

3.6 Fluktuations-Dissipationstheorem

$$\text{Wg.}\quad \chi''_{AB}(t) = \frac{1}{2\hbar}\left\{\langle A(t)B(0)\rangle-\langle B(0)A(t)\rangle\right\}$$

$$\text{folgt}\quad \chi''_{AB}(\omega) = \frac{1}{2\hbar}\left\{G^{>}_{AB}(\omega)-\underbrace{G^{<}_{AB}(\omega)}_{=G^{>}_{AB}(\omega)\,e^{-\beta\hbar\omega}}\right\}$$

also

$$\boxed{\chi''_{AB}(\omega)=\frac{1}{2\hbar}\,G^{>}_{AB}(\omega)(1-e^{-\beta\hbar\omega})}$$

das sog. FDT (Fluktuations-Dissipations-Theorem)

bzw. mit (3.9)

$$\chi_{AB}(\omega)=\frac{1}{2\hbar}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}d\omega'\,\frac{G^{>}_{AB}(\omega')(1-e^{-\beta\hbar\omega'})}{\omega'-\omega-i\epsilon} \tag{3.11}$$

Klassischer Grenzfall: $\beta\hbar\omega \ll 1$ ($\leftarrow$ Frequenz- und Temperaturbereich)

$$\Rightarrow \chi''_{AB}(\omega) = \frac{\beta\omega}{2} G^{>}_{AB}(\omega)$$

d.h.

$$\chi_{AB}(\omega = 0) = \beta \int \frac{d\omega'}{2\pi} G^{>}_{AB}(\omega') = \beta G^{>}_{AB}(t = 0)$$

wobei $\chi_{AB}(\omega = 0) \hat{=}$ statische Suszeptibilität und $G^{>}_{AB}(t = 0) \hat{=}$ Gleichzeitige Korrelationsfunktion von A und B.
Der Name FDT liegt nahe, da $G_{AB}(\omega)$ ein Maß für Korrelationen von Fluktuationen von A und B ist und χ''_{AB} die Dissipation ($\star\star\star$) beschreibt.

Ad ($\star\star\star$): Betrachte eine Störung der Form $H' = \Theta(t)(A^+ F e^{-i\omega t} + AF^\star e^{i\omega t})$, wobei F eine c-Zahl. Goldene Regel für die Übergangsrate pro Zeiteinheit vom Zustand n in den Zustand m:

$$\Gamma_{n\to m} = \frac{2\pi}{\hbar} \{\delta(E_m - E_n - \hbar\omega)\, |\langle m|A^+ F|n\rangle|^2 \,+\, \delta(E_m - E_n + \hbar\omega)|\langle m|AF^\star|n\rangle|^2$$

$\Rightarrow$ Leistung der äußeren Kraft (= pro Zeiteinheit absorbierte Energie)

$$\begin{aligned} W &= \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \Gamma_{n\to m}(E_m - E_n) \\ &= \frac{2\pi}{Z} \Bigg\{ \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \langle n|A|m\rangle\langle m|A^+|n\rangle |F|^2\, \delta(E_m - E_n - \hbar\omega) \cdot \overbrace{\frac{E_m - E_n}{\hbar}}^{=\omega} \\ &\quad + \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \langle n|A^+|m\rangle\langle m|A|n\rangle |F|^2\, \delta(E_m - E_n + \hbar\omega) \cdot \underbrace{\frac{E_m - E_n}{\hbar}}_{=-\omega} \\ &= \omega \left\{ G^{>}_{AA^+}(\omega) - G^{<}_{A^+A}(\omega) \right\} |F|^2 \,=\, \omega\chi''_{AA^+} + (\omega) \cdot |F|^2 \end{aligned}$$

Bsp. Harmonischer Kristall

Annahme: Bravais-Gitter mit einem Atom pro EZ (Elementarzelle), ??
Gleichgewichtslage der Gitterpunkte:

$$\mathbf{a_n} = \begin{pmatrix} n_x \cdot & a_x \\ n_y \cdot & a_y \\ n_z \cdot & a_z \end{pmatrix}$$

mit $n_{x,y,z} = 1, \ldots, N_{x,y,z}$ und $N_x \cdot N_y \cdot N_z$.

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix}$$

Indizierung der Atome bzw. Gitterplätze

Auslenkung des Atoms $\mathbf{n}$ aus Gleichgewichtslage:

$$\boxed{\mu_{\mathbf{n}} = \mathbf{x_n} - \mathbf{a_n}}$$

Hamiltonian in elastischer Approximation: (Entwicklung der pot. Energie um Gleichgewichtslage)

$$\boxed{\hat{H} = \sum_{\mathbf{n}} \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \sum_{\mathbf{n},\mathbf{n}'} \hat{\mu}_{\mathbf{n}} \mathbf{D}_{\mathbf{n},\mathbf{n}'} \hat{\mu}_{\mathbf{n}'} \quad \text{mit} \quad \hat{p}_{\mathbf{n}} = \nabla_{\mu_{\mathbf{n}}}}$$

Diagonalisiere die quadratische Form der elastischen Energie durch Einführung von **Normalkoordinate** Q.

$$\hat{\mu}_{\mathbf{n}} = \frac{1}{\sqrt{NM}} \sum_{\mathbf{k},\lambda} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a_n}} \, \epsilon(\mathbf{k},\lambda) \, \hat{Q}_{\mathbf{k},\lambda} \tag{3.12}$$

wobei $\mathbf{k}$ die Wellenzahl und $\epsilon(\mathbf{k},\lambda)$ der Polarisationsvektor mit $\lambda = 1,2,3$ ist und $k_i = n_i \frac{2\pi}{N_i a_i}$ mit periodischen Randbedingungen.
$\rightsquigarrow$

$$\boxed{\hat{H} = -\sum_{\mathbf{k},\lambda} \frac{\lambda^2}{2} \Delta_Q + \sum_{\mathbf{k},\lambda} \omega^2_{\mathbf{k},\lambda} \, Q^2_{\mathbf{k},\lambda}}$$

Def.: Erzeuger und Vernichter wie beim harmonischen Oszillator

$$\hat{Q}_{\mathbf{k},\lambda} \sqrt{\frac{\lambda}{2\omega_{\mathbf{k},\lambda}}} \, (a_{\mathbf{k},\lambda} + a^+_{\mathbf{k},\lambda}) \tag{3.13}$$

$\rightsquigarrow$

$$\boxed{\hat{H} = \sum_{\mathbf{k},\lambda} \lambda \omega_{\mathbf{k},\lambda} a^+_{\mathbf{k},\lambda} a_{\mathbf{k},\lambda} + \frac{1}{2})}$$

Dynamische Suszeptibilität der Auslenkungen

$$\chi^{ij}(\mathbf{n}-\mathbf{n}',t) = \frac{i}{\hbar}\Theta(t)\langle[u^i_{\mathbf{n}}(t), u^j_{\mathbf{n}'}(0)]\rangle \tag{3.14}$$

$$\text{bzw.} \quad \chi''^{ij}(\mathbf{n}-\mathbf{n}',t) = \frac{1}{2\hbar}\langle[u^i_{\mathbf{n}}(t), u^j_{\mathbf{n}'}(0)]\rangle \tag{3.15}$$

d.h. $\chi^{ij}(\mathbf{n}-\mathbf{n}',t) = 2i\,\chi''^{ij}(\mathbf{n}-\mathbf{n}',t)$. N.b.: $\mathbf{n}-\mathbf{n}'$ statt $\mathbf{n},\mathbf{n}'$ wegen räumlicher Translationsinvarianz.

3.7 Phasenkorrelationsfunktion

Def.: $D^{ij}(\mathbf{n}-\mathbf{n}',t) = \langle u^i_{\mathbf{n}}(t)\, u^j_{\mathbf{k}}(0)\rangle$

Einsetzen von (3.13) in (3.12), und dies ($\hat{u}$ ausgedrückt in a, a^+) in (3.15):

$$\chi''^{ij}(\mathbf{n}-\mathbf{n}',t) = \frac{1}{2\hbar}\frac{1}{NM}\sum_{\substack{\mathbf{k}-\lambda\\ \mathbf{k}'-\lambda'}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{a_n}+i\mathbf{k}'\mathbf{a}_{\mathbf{n}'}}\,\epsilon^i(\mathbf{k},\lambda)\,\epsilon^j(\mathbf{k}'\lambda') \times\frac{\lambda}{\sqrt{4\omega_{\mathbf{k},\lambda}\omega\mathbf{k}',\lambda'}}\langle a_{\mathbf{k},\lambda}(t)+\mathbf{a}^+_{\mathbf{k},\lambda^{(t)}}),\,(a_{\mathbf{k}',\lambda'^{(0)}})$$

mit $a_{\mathbf{k},\lambda}(t) = e^{-i\omega_{\mathbf{k},\lambda}t}\,a_{\mathbf{k},\lambda}$
[n.b. für $H = \hbar\omega a^+a$ ist $a(t) = e^{+i\omega t a^+a}e^{-i\omega t a^+a}$, also

$$\langle n|a(t)|m\rangle = e^{+i\omega(n-m)t}\underbrace{\langle n|a|m\rangle}_{\approx\delta_{n,m-1}} = e^{-i\omega t}\langle n|a|m\rangle\,]$$

ist

$$\begin{aligned}&[a_{\mathbf{k},\lambda}(t), a^+_{-\mathbf{k},\lambda}(t), a_{\mathbf{k}',\lambda'}(0)]\\ =\;& [a^+_{-\mathbf{k},\lambda}(t), a_{\mathbf{k}',\lambda'}(0)] + [a_{\mathbf{k},\lambda}(t), a_{\mathbf{k}',\lambda'}(0)]\\ =\;& -e^{-i\omega_{\mathbf{k},\lambda}t}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\,\delta_{\xi,\lambda'} + e^{i\omega_{\mathbf{k},\lambda}t}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{\xi,\lambda'}\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \chi''^{ij}(\mathbf{n}-\mathbf{n}',t) = \frac{1}{4NM}\sum_{\mathbf{k},\lambda} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{a_n}-a_{\mathbf{n}'})}\,\epsilon^i(\mathbf{k},\lambda)\underbrace{\epsilon^{\star j}(\mathbf{k},\lambda)}_{=\epsilon^i(-\mathbf{k},\lambda)}\frac{1}{\omega_{\mathbf{k},\lambda}}(e^{-i\omega_{\mathbf{k},\lambda}t} - e^{i\omega_{\mathbf{k},\lambda}})$$

im Bravais-Gitter sind Polarisationsvektoren reell

$$\rightsquigarrow \chi''^{ij}(\mathbf{n}-\mathbf{n}',t) = \frac{-i}{2NM}\sum_{\mathbf{k},\lambda} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{a_n}-\mathbf{a}_{\mathbf{n}'})}\frac{\epsilon^{i(\mathbf{k},\lambda)}\epsilon^j(\mathbf{k},\lambda)}{\omega_{\mathbf{k},\lambda}}\,\sin(\omega_{\mathbf{k},\lambda}t)$$

Es ist $\chi''^{ij(\mathbf{n}-\mathbf{n}',t)} = 2i\,\Theta(t)\,\chi''^{\mathbf{n}-\mathbf{n}',t)} = 2i\,\Theta(t)\,\chi''^{ij(\mathbf{n}-\mathbf{n}',t)}$,

$$\rightsquigarrow \chi''^{ij}(\mathbf{n}-\mathbf{n}',t) = \frac{1}{NM}\sum_{\mathbf{k},\lambda} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{a_n}-\mathbf{a}_{\mathbf{n}'})}\frac{\epsilon^i(\mathbf{k},\lambda)\epsilon^j(\mathbf{k},\lambda)}{\omega_{\mathbf{k},\lambda}}\,\sin(\omega_{\mathbf{k},\lambda}t)\,\Theta(t)$$

bzw. $$\chi''^{ij}(\mathbf{n}-\mathbf{n}',t) = \frac{1}{NM}\sum_{\mathbf{k},\lambda} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{a_n}-\mathbf{a}_{\mathbf{n}'})}\frac{\epsilon^i(\mathbf{k},\lambda)\epsilon^j(\mathbf{k},\lambda)}{\omega_{\mathbf{k},\lambda}}\underbrace{\int_0^\infty dt\, e^{i\omega t}\,\sin(\omega_{\mathbf{k},\lambda}t)}_{=\lim_{\epsilon\to0}\frac{1}{2}\left\{\frac{1}{\omega+\omega_{\mathbf{k},\lambda}+i\epsilon}-\frac{1}{\omega-\omega_{\mathbf{k},\lambda}+i\epsilon}\right\}}$$

n.b.

$$\frac{1}{i}\int_0^\infty dt\, e^{i\tilde{\omega}t} = \lim_{\epsilon\to0}\frac{1}{i}\int_0^\infty dt\, e^{i\tilde{\omega}t}e^{-\epsilon t} = \lim_{\epsilon\to0} -\frac{1}{i}\,\frac{1}{i\tilde{\omega}-\epsilon t} = \lim_{\epsilon\to0}\,\frac{1}{i\tilde{\omega}+\epsilon t}$$

räumliche Fourier-Trafo:

$$\begin{aligned}
\chi^{ij}(\mathbf{q},\omega) &= \sum_{\mathbf{n}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{a_n}}\chi^{ij}(\mathbf{n},\omega) \\
&= \frac{1}{2NM}\sum_{\mathbf{k},\lambda}\underbrace{\sum_{\mathbf{n}} e^{-i\mathbf{a_n}(\mathbf{k}-\mathbf{q})}}_{=N\,\delta_{\mathbf{k},\lambda}}\frac{\epsilon^{i(\mathbf{k}\lambda)}-\epsilon^{j(\mathbf{k}\lambda)}}{\omega_{\mathbf{k},\lambda}}\left\{\frac{1}{\omega+\omega_{\mathbf{k},\lambda}+i\epsilon}-\frac{1}{\omega-\omega_{\mathbf{k},\lambda}+i\epsilon}\right\} \\
&= \frac{1}{2NM}\sum_{\lambda}\frac{\epsilon^{i}(\mathbf{q},\lambda)\epsilon^{j}(\mathbf{q},\lambda)}{\omega_{\mathbf{k},\lambda}}\left\{\frac{1}{\omega+\omega_{\mathbf{k},\lambda}+i\epsilon}-\frac{1}{\omega-\omega_{\mathbf{k},\lambda}+i\epsilon}\right\}
\end{aligned}$$

Für die Zerlegung

$$\chi^{ij}(\mathbf{n}-\mathbf{n}',\omega) = \chi'^{ij}(\mathbf{n}-\mathbf{n}',\omega) + i\omega\,\chi''^{ij}(\mathbf{n}-\mathbf{n}',\omega)$$

folgt

$$\begin{aligned}
\chi'^{ij}(\mathbf{n}-\mathbf{n}',\omega) &= \frac{1}{2NM}\sum_{\mathbf{k},\lambda} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{a_n}-\mathbf{a_{n'}})}\frac{\epsilon^{i(\mathbf{k}\lambda)}-\epsilon^{j(\mathbf{k}\lambda)}}{\omega_{\mathbf{k},\lambda}}\times\left\{P\left(\frac{1}{\omega+\omega_{\mathbf{k},\lambda}}\right)-\left(\frac{1}{\omega-\omega_{\mathbf{k},\lambda}}\right)\right\} \\
\chi''^{ij}(\mathbf{n}-\mathbf{n}',\omega) &= \frac{1}{2NM}\sum_{\mathbf{k},\lambda} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{a_n}-\mathbf{a_{n'}})}\frac{\epsilon^{i(\mathbf{k}\lambda)}-\epsilon^{j(\mathbf{k}\lambda)}}{\omega_{\mathbf{k},\lambda}}\times\pi\left\{\delta(\omega-\omega_{\mathbf{k}\lambda})-\delta(\omega+\omega_{\mathbf{k}\lambda})\right\}
\end{aligned}$$

bzw.

$$\begin{aligned}
\chi'^{ij}(\mathbf{q},\omega) &= \frac{1}{2NM}\sum_{\lambda}\frac{\epsilon^{i}(\mathbf{q},\lambda)\epsilon^{j}(\mathbf{q},\lambda)}{\omega_{\mathbf{k},\lambda}}\times\left\{P\left(\frac{1}{\omega+\omega_{\mathbf{k},\lambda}}\right)-\left(\frac{1}{\omega-\omega_{\mathbf{k},\lambda}}\right)\right\} \\
\chi''^{ij}(\mathbf{q},\omega) &= \frac{1}{2NM}\sum_{\lambda}\frac{\epsilon^{i}(\mathbf{q},\lambda)\epsilon^{j}(\mathbf{q},\lambda)}{\omega_{\mathbf{k},\lambda}}\times\pi\left\{\delta(\omega-\omega_{\mathbf{k}\lambda})-\delta(\omega+\omega_{\mathbf{k}\lambda})\right\}
\end{aligned}$$

Phonon-Korrelationsfunktion kann man entweder direkt berechnen oder mittels FDT aus χ.

$$\begin{aligned}
D^{ij}(\mathbf{n}-\mathbf{n}',\omega) &= 2\hbar\,\frac{e^{\beta\lambda\omega}}{e^{\beta\lambda\omega}-1}\,\chi''^{ij}(\mathbf{n}-\mathbf{n}',\omega) \\
&= 2\hbar\,(1+n(\omega))\chi''^{ij}(\mathbf{n}-\mathbf{n}',\omega) \\
&= \frac{\pi\hbar}{NM}\sum_{\mathbf{k},\lambda} e^{i(\mathbf{k}(\mathbf{a_n}-\mathbf{a_{n'}})}\frac{\epsilon^{i}(\mathbf{q},\lambda)\epsilon^{j}(\mathbf{q},\lambda)}{\omega_{\mathbf{k},\lambda}} \\
&\quad \{(1+n_{\mathbf{k},\lambda})\delta(\omega-\omega_{\mathbf{k},\lambda})-n_{\mathbf{k},\lambda}\delta(\omega+\omega_{\mathbf{k},\lambda})\}
\end{aligned}$$

bzw.

$$\begin{aligned}
D^{ij}(\mathbf{q},\omega) &= 2\hbar(1+n(\omega))\,\chi''^{ij}(\mathbf{q},\omega) \\
&= \frac{\pi\lambda}{NM}\sum_{\lambda}\frac{\epsilon^{i}(\mathbf{q},\lambda)\epsilon^{j}(\mathbf{q},\lambda)}{\omega_{\mathbf{q},\lambda}}\left\{(1+n_{\mathbf{q},\lambda})\delta(\omega-\omega_{\mathbf{q},\lambda})-n_{\mathbf{q},\lambda}\delta(\omega+\omega_{\mathbf{q},\lambda})\right\}
\end{aligned}$$

Def.: $n_{q,\lambda} = \langle a^+_{q,\lambda} a_{q,\lambda} \rangle = \frac{1}{e^{\beta\lambda\omega_q} - 1}$ mittlere thermische Besetzungszahl für Phononen q, λ.

Die Phonon-Resonanzen in $D^{ij}(q, \omega)$ sind scharfe, δ-artige Spitzen für ein q an den Stellen $\pm\omega_{q,\lambda}$.

Entwicklung der Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion ($\leftarrow$ Neutronenstreuquerschnitt) enthält Phononen-Korrelationsfunktion D^{ij}.
$\rightsquigarrow$ Anregungen des Vielteilchensystems (hier Phononen) äußern sich als Resonanzen im Streuquerschnitt.

WW der Phononen miteinander und mit anderen Anregungen im System (z.B. Elektronen im Metall)
$\rightarrow$ Dämpfung der Phononen
$\hat{=}$ Ersetzung von ϵ durch endliche Dämpfungskonst. $\gamma(q, \lambda)$
$\Rightarrow$ Phononenresonanzen bekommen endl. Breite.

Kapitel 4

Quantisierung des klassischen Strahlungsfeldes

4.1 Quantisierung des klassischen Strahlungsfeldes

inhomogene Maxwellgleichungen:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{E} &= 4\pi\rho \\ \nabla \times \mathbf{B} - \frac{1}{c}\dot{\mathbf{E}} &= \frac{4\pi}{c}\mathbf{j} \end{aligned} \qquad (*)$$

Viererstromdichte: $j_\mu = (j, -c\rho) \quad \mu = 1,2,3,4$
antisymmetrische Feldstärketensor: $(F_{\mu\nu} = -F_{\mu\nu})$

$$F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & B_3 & -B_2 & -E_1 \\ -B_3 & 0 & B_1 & -E_2 \\ B_2 & -B_1 & 0 & -E_3 \\ E_1 & E_2 & E_3 & 0 \end{pmatrix}$$

$\rightsquigarrow (*)$ läßt sich kovariant schreiben als

$$\boxed{\partial_\mu F_{\mu\nu} = -\frac{4\pi}{c} j_\nu \qquad \text{inhom. Maxwell-Gl.}} \qquad \text{(Summenkonv.!)}$$

Wegen Antisymmetrie von $F_{\mu\nu}$ folgt $\partial_\nu \partial_\mu F_{\mu\nu} = 0$

$$\boxed{\partial_\nu j_\nu = 0 \quad \text{Kontinuitätsgleichung für elektrischen Strom}}$$

Die homogenen Maxwellgleichungen $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ und $\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c}\dot{\mathbf{B}} = 0$ haben die Existenz eines Viererpotentials $A_\mu = (\mathbf{A}, \phi)$ zur Folge, so daß

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$$

In Lorentz-Eichung $\partial_\mu A_\mu = 0$ gilt die inhomogene Wellenfunktion für A :

$$\partial_\mu \partial_\nu A_\mu = -\frac{4\pi}{c} j_\nu$$

Die inhomogenen Maxwellgleichungen folgen als Euler-Lagrange-Gleichungen aus der **Lagrange-Dichte** des elektromagnetischen Feldes

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{16\pi} \underbrace{F_{\mu\nu}F_{\mu\nu}}_{=2(B^2-E^2)} + \underbrace{\frac{1}{c} A_\mu j_\mu}_{\substack{\text{Kopplung des Feldes} \\ \text{an die Quellen (Ströme)}}}$$

Die Euler-Lagrange-Gleichungen lauten:

$$0 = \partial_\mu \underbrace{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu A_\nu)}}_{-\frac{1}{4\pi}F_{\mu\nu}} - \underbrace{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_\nu}}_{\frac{1}{c}j_\nu} = -\frac{1}{4\pi}\partial_\mu F_{\mu\nu} - \frac{1}{c} j_\nu \quad \Leftrightarrow \quad \text{inhom. Maxwell-Gl.}$$

Übergang von der Lagrangedichte $\mathcal{L}_{\text{em}} = -\frac{1}{16\pi} F_{\mu\nu}F_{\mu\nu}$ zur **Hamiltondichte** $\mathcal{H}_{\text{em}}$:
Kanonisch Konj. Impulse:

$$\Pi_\mu = \frac{\partial \mathcal{L}_{\text{em}}}{\partial(\dot{A}_\mu)} = \frac{\partial \mathcal{L}_{\text{em}}}{\partial\left(\partial_4 A_\mu\right)} = -\frac{1}{4\pi} F_{4\mu}$$

und

$$\dot{A}_\mu = \partial_4 A_\mu = F_{4\mu} + \partial_\mu A_4$$

$$\begin{aligned} \Longrightarrow \mathcal{H}_{\text{em}} &= \Pi_\mu \dot{A}_\mu - \mathcal{L}_{\text{em}} \\ &= -\frac{1}{4\pi} F_{4\mu}F_{4\mu} - \frac{1}{4\pi} \underbrace{F_{4\mu}\cdot\partial_\mu A_4}_{=\partial_\mu(F_{4\mu}A_4) - A_4\partial_\mu F_{4\mu}} - \mathcal{L}_{\text{em}} \\ &= \frac{1}{8\pi}\left(E^2 + B^2\right) - \rho\phi + \underbrace{\nabla\cdot(\phi\mathbf{E})}_{\substack{\text{ergibt 0 bei Integration} \\ \text{über Volumen (wg. Div.)}}} \end{aligned}$$

Wir werden die Quantisierung des elektromagnetischen Feldes kanonisch, d.h. anhand der Hamiltonfunktion durchführen. Gegenüber der alternativen Quantisierung im Lagrangeformalismus hat das den Vorteil größerer Transparenz und Anschaulichkeit, jedoch den Nachteil, daß die Lorentzkovarianz nicht erkennbar ist.

Freiheitsgrade des Strahlungsfeldes: Strahlungseichung bzw. Coulombeichung

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$$

[Erreichbar durch Umeichung eines beliebigen Vektorpotentials A^{alt} mit $A^{\text{neu}} = A^{\text{alt}} + \nabla\chi$, $\chi = \frac{1}{4\pi}\int \frac{d^3r'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\nabla'\cdot\mathbf{A}^{\text{alt}}(\mathbf{r}',t) \rightarrow$ Lsg. von $\Delta\chi = -\nabla A^{\text{alt}}$]

Das heißt $\mathbf{A}$ besitzt nur einen transversalen, d.h. divergenzfreien, Anteil $\mathbf{A} = A_\perp$, der longitudinale, d.h. rotationsfreie, Anteil $A_\parallel$ verschwindet.
$A_4 = \phi$ erfüllt $\Delta\phi = -4\pi\rho$.

Die Hamiltondichte in der Strahlungseichung ist

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \mathcal{H}_{\text{em}} + \mathcal{H}_{\text{int}} + \mathcal{H}_{\text{mat}}, \qquad H = \int d^3r\, \mathcal{H} \\
\mathcal{H}_{\text{em}} &= \frac{1}{8\pi}\left(E^2 + B^2\right) - \rho\phi + \nabla\cdot(\phi\mathbf{E}) \\
\mathcal{H}_{\text{int}} &= -\frac{1}{c} j_\mu A_\mu = -\frac{1}{c}\left(\mathbf{j}\cdot\mathbf{A} - c\rho\phi\right)
\end{aligned}$$

Es ist $\mathbf{B} = \nabla\times\mathbf{A}$ und $\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}}$.

$$\begin{aligned}
\rightsquigarrow \int d\mathbf{r}\, E^2 &= \underbrace{\int d\mathbf{r}\, \nabla\phi\cdot\nabla\phi}_{\substack{= \int d\mathbf{r}\nabla\cdot(\phi\nabla\phi) - \phi\underbrace{\Delta\phi}_{=-4\pi\rho} \\ = 4\pi\int d\mathbf{r}\phi\rho}} + \underbrace{\frac{2}{c}\int d\mathbf{r}\,\nabla\phi\cdot\dot{\mathbf{A}}}_{\substack{= \frac{2}{c}\int d\mathbf{r}\,\nabla\cdot\left(\phi\dot{\mathbf{A}}\right) - \phi\nabla\cdot\dot{\mathbf{A}} \\ = 0}} + \frac{1}{c^2}\int d\mathbf{r}\,\dot{\mathbf{A}}^2 \\
&= \int d\mathbf{r}\left(\frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}}\right)^2 + 4\pi\int d\mathbf{r}\,\phi\rho
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{\text{em}} + H_{\text{int}} &= \frac{1}{8\pi}\int d\mathbf{r}\,\left(E^2 + B^2\right) - \frac{1}{c}\int d\mathbf{r}\,\mathbf{j}\cdot\mathbf{A} \\
&= \frac{1}{8\pi}\int d\mathbf{r}\,\left(\frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}}\right)^2 + \frac{1}{2}\int d\mathbf{r}\,\phi\rho + \frac{1}{8\pi}\int d\mathbf{r}\,(\nabla\times\mathbf{A})^2 - \frac{1}{c}\int d\mathbf{r}\,\mathbf{j}\cdot\mathbf{A} \\
&= \underbrace{\frac{1}{8\pi}\int d\mathbf{r}\left\{\left(\frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}}\right)^2 + (\nabla\times\mathbf{A})^2\right\}}_{H_{\text{str}}=\text{Hamiltonfunktion des Strahlungsfeldes}} \qquad \underbrace{-\frac{1}{c}\int d\mathbf{r}\,\mathbf{j}\cdot\mathbf{A}}_{\substack{H_{\text{ww}} = \text{Kopplung} \\ \text{Strahlung/Ströme in der Materie}}} \\
&\quad + \underbrace{\frac{1}{2}\int d\mathbf{r}\int d\mathbf{r}'\,\frac{\rho(\mathbf{r},t)\rho(\mathbf{r}',t)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}_{\text{Netto-Ww. der Ladungsdichten}}
\end{aligned}$$

N.B. In der Strahlungseichung ist sowohl der longitudinale Anteil des Vektorpotentials sowie das skalare Potential vollständig aus der Beschreibung eliminiert.

Fügen wir nun noch $H_{\rm mat}$, die kinetische Energie nichtrelativistischer Teilchen mit Masse m_j und Ladungen e_j hinzu, so erhalten wir die Hamiltonfunktion

$$\begin{aligned} H &= \sum_j \frac{p_j^2}{2m_j} + H_{\rm ww} + H_{\rm str} + \frac{1}{2}\int d\mathbf{r}d\mathbf{r}'\,\frac{\rho(\mathbf{r},t)\rho(\mathbf{r}',t)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \\ &\quad \rho(\mathbf{r},t) = \sum_j e_j\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j) \\ &\quad j(\mathbf{r},t) = \sum_j \frac{p_j}{m_j} e_j\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j) \\ &= \sum_j \frac{1}{2m_j}\left(\mathbf{p}_j - \frac{e_j}{c}\mathbf{A}\left(\mathbf{r},t\right)\right)^2 + H_{\rm str} + \sum_{i<j}\frac{e_i\,e_j}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\ \text{(+Selbstenergie)} \end{aligned}$$

Vor etwa 100 Jahren erkannten Physiker wie Rayleigh und Jeans, daß das freie Strahlungsfeld einer Schar von unabhängigen Oszillatoren ähnelt.

Wegen $\nabla\cdot\mathbf{A}=0$ (in der von uns gewählten Eichung) und $\phi=0$ für $\rho=0$ gilt auch $\partial_\mu A_\mu = 0$ und damit erfüllt $\mathbf{A}$ die homogene Wellengleichung:

$$\begin{aligned} \Box\mathbf{A} &= 0 \qquad\qquad (**) \\ \mathbf{A}_j(\mathbf{r},t) &= \mathbf{u}_j(\mathbf{r})q_j(t) \qquad (\nabla\cdot\mathbf{u}_j = 0!) \\ \underset{(**)}{\Longrightarrow} &\qquad \Delta\mathbf{u}_j \underbrace{-\frac{1}{c^2}\frac{\ddot{q}_j}{q_j}}_{=\omega_j^2}\mathbf{u}_j = 0 \\ \rightsquigarrow &\qquad \ddot{q}_j = -\omega_j^2 q_j \\ &\qquad \Delta\mathbf{u}_j + \frac{\omega_j}{c^2}\mathbf{u}_j = 0 \end{aligned}$$

In einem Volumen V seien die transversalen Eigenmoden, die zu verschiedenen Frequenzen wegen der Hermitizität des Operators Δ orthogonal sind, orthonormiert

$$\int_V d\mathbf{r}\ \mathbf{u}_j(\mathbf{r})\cdot\mathbf{u}_l(\mathbf{r}) = \delta_{jl}$$

Allgemeine Lösungen von $(**)$:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \sum_j \mathbf{u}_j(\mathbf{r})q_j(t)$$

Nun ist

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{r}\,(\nabla\times\mathbf{A}_j)\cdot(\nabla\times\mathbf{A}_l) &= q_jq_l\int d\mathbf{r}\,(\nabla\times\mathbf{u}_j)\cdot(\nabla\times\mathbf{u}_l) \\ &= q_jq_l\int d\mathbf{r}\left[\nabla\cdot(\mathbf{u}_j\times(\nabla\times\mathbf{u}_l)) + \mathbf{u}_j\cdot\left(\underbrace{\nabla\times(\nabla\times\mathbf{u}_l)}_{\begin{array}{c}=\ -\Delta\mathbf{u}_l\\ =\ \frac{\omega_l^2}{c^2}\mathbf{u}_l\end{array}}\right)\right] \\ &= \frac{\omega_l^2}{c^2}q_l^2\delta_{jl} \end{aligned}$$

und

$$\int d\mathbf{r}\ \left(\frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}}_j\right)\cdot\left(\frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}}_l\right) = \frac{1}{c^2}\dot{q}_l^2\delta_{jl}$$

$$\Longrightarrow \qquad \boxed{H_{\mathrm{Str}} = \frac{1}{8\pi c^2}\sum_l \left(\dot{q}_l^2 + \omega_l^2 q_l\right)}$$

Wegen der Bewegungsgleichung für q_l sind die einzelnen Summanden zeitunabhängig.

Kanonische Variablen: $Q_l := \frac{q_l}{\sqrt{4\pi}c}$; $\quad P_l := \frac{\dot{q}_l}{\sqrt{4\pi}c}$

$$\Longrightarrow \qquad \boxed{H_{\mathrm{Str}} = \frac{1}{2}\sum_l \left(P_l^2 + \omega_l^2 Q_l\right)} \qquad (***)$$

Kanonische Bewegungsgleichungen:

$$\dot{P}_l = -\frac{\partial H_{\mathrm{Str}}}{\partial Q_l}, \quad \dot{Q}_l = \frac{\partial H_{\mathrm{Str}}}{\partial P_l} = P_l$$

$$\left(\Longleftrightarrow \qquad \ddot{q}_l - \omega_l^2 q_l = 0\right)$$

Betrachtet man diese Oszillatoren im thermischen Gleichgewicht (Temp. T), dann trägt jeder nach Gleichverteilungs- und Virialsatz eine mittlere Energie bei. $\Rightarrow$ Rayleigh-Jeans Strahlungsgesetz für spektrale Verteilung der Energie $\propto \omega^2 k_B T$ (von Zustandsdichte in 3d für Eigenmoden).

Für kleine Frequenzen entspricht dies der beobachteten Verteilung in der Hohlraumstrahlung, für große jedoch nicht.
$\rightarrow$ PLANCK's Vorschlag 1901: Oszillatoren *quantisiert*, möglichst Energien $\hbar\omega(n+\frac{1}{2})$

$$\rightsquigarrow \qquad u(\omega) \propto \frac{\hbar\omega^3}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \qquad \text{(Planck'sches Strahlungsgesetz)}$$

Wir führen also die Quantisierung von $(***)$ durch, Q_l und P_l werden zu Operatoren mit den kanonischen Vertauschungsrelationen

$$[Q_l,\, P_l] = i\hbar\delta_{jl}$$

Definition: Auf- und Absteigeoperatoren:

$$\left.\begin{array}{rcl} a_l & = & \left(\omega_l Q_l + i P_l\right)/\sqrt{2\hbar\omega_l} \\ a_l^+ & = & \left(\omega_l Q_l - i P_l\right)/\sqrt{2\hbar\omega_l} \end{array}\right\} \rightarrow \quad \left[a_j,\, a_l^+\right] = \delta_{jl}$$

Bed.: **Photonen-Erzeuger und Vernichter**

$$\Longrightarrow \qquad \boxed{H_{\mathrm{Str}} = \sum_l \hbar\omega_l \left(a_l^+ a_l + \frac{1}{2}\right)}$$

Hilbertraum des quantisierten Strahlungsfeldes:
Vakuum $|\,0\,\rangle$:

$$a_l|\,0\,\rangle = 0$$

$$|n_1 n_2 \cdots\rangle = |\{n_l\}\rangle = \prod_l \frac{(a_l^+)^{n_l}}{\sqrt{n_l!}}\,|0\rangle$$

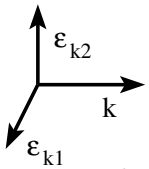
Wegen $Q_l = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_l}}(a_l + a_l^+)$ und $q_l = \sqrt{4\pi}cQ_l$ ist der Operator des (transversalen) Vektorpotentials (im Heisenbergbild)

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r},t) = \sum_l \mathbf{u}_l(\mathbf{r})\sqrt{4\pi}c\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_l}}\left(a_l e^{-i\omega_l t} + a_l^+ e^{i\omega_l t}\right)$$

z.B. Kasten als Quantisierungsvolumen: $\mathbf{u}_l(\mathbf{r})$ Impulseigenzustände $l \to (\mathbf{k},\alpha)$, $\alpha = 1,2$

$$\mathbf{u}_{\mathbf{k}\alpha}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\,e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\alpha}$$

$\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\alpha}$ Polarisationsvektoren, Rechtsdreibein mit $\mathbf{k}$, garantiert Transversalität (deshalb nur 2 Polarisationen möglich).



$$\omega_{\mathbf{k}\alpha} = c|\mathbf{k}| =: \omega_{\mathbf{k}}$$

Eigenmoden komplexwertig $\rightsquigarrow$ Polarisationsvektoren auch komplexwertig

$\rightsquigarrow$

$$\boxed{\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{k},\alpha}\sqrt{4\pi}c\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}}}}\left\{\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\alpha}a_{\mathbf{k}}e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}}t)} + \boldsymbol{\varepsilon}^*_{\mathbf{k}\alpha}a^+_{\mathbf{k}}e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}}t)}\right\}}$$

$\Rightarrow$ **Operatoren der Feldstärken**: $(\mathbf{E}_\parallel = -\nabla\phi)$

$$\hat{\mathbf{E}}_\perp(\mathbf{r},t) := -\frac{1}{c}\dot{\hat{\mathbf{A}}} = \frac{i}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{k}\alpha}\sqrt{2\pi\hbar\omega_{\mathbf{k}}}\left\{\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\alpha}a_{\mathbf{k}}e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}}t)} - \boldsymbol{\varepsilon}^*_{\mathbf{k}\alpha}a^+_{\mathbf{k}}e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}}t)}\right\}$$

$$\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r},t) := \nabla\times\mathbf{A} = \frac{i}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{k}\alpha}\sqrt{2\pi\hbar\omega_{\mathbf{k}}}\frac{\mathbf{k}}{k}\left\{\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\alpha}a_{\mathbf{k}}e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}}t)} - \boldsymbol{\varepsilon}^*_{\mathbf{k}\alpha}a^+_{\mathbf{k}}e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega_{\mathbf{k}}t)}\right\}$$

Impuls des Strahlungsfeldes

$$\mathbf{P} := \frac{1}{4\pi c}\int d\mathbf{r}\,(\mathbf{E}_\perp\times\mathbf{B}) \underset{(*)}{=} \sum_{\mathbf{k}\alpha}\hbar\mathbf{k}a^+_{\mathbf{k}\alpha}a_{\mathbf{k}\alpha}$$

($(*)$: Terme proportional zu $a_{\mathbf{k}\alpha}a_{-\mathbf{k}\alpha}$ und $a_{-\mathbf{k}\alpha}a_{\mathbf{k}\alpha}$ heben sich einander auf, $\sum_{\mathbf{k}_\alpha}\mathbf{k}/2 = 0$.)

Drehimpuls des Strahlungsfeldes:

$$\boldsymbol{\mathcal{J}} := \frac{1}{4\pi c}\int d\mathbf{r}\,(\mathbf{r}\times(\mathbf{E}_\perp\times\mathbf{B})) = \boldsymbol{\mathcal{J}}_{\text{Bahn}} + \boldsymbol{\mathcal{J}}_{\text{Spin}}$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\mathcal{J}}_{\text{Bahn}} &= \frac{1}{4\pi c}\int d\mathbf{r}\sum_{\nu=1,2} E_{\perp\nu}\,(\mathbf{r}\times\nabla)\,A_\nu \\
\boldsymbol{\mathcal{J}}_{\text{Spin}} &= \frac{1}{4\pi c}\int d\mathbf{r}\;(\mathbf{E}_\perp\times\mathbf{A}) \\
&= \sum_{\mathbf{k}}\hbar\frac{\mathbf{k}}{k}\left\{a^+_{\mathbf{k}+}a_{\mathbf{k}+} - a^+_{\mathbf{k}-}a_{\mathbf{k}-}\right\} \\
&\qquad \text{mit } a_{\mathbf{k}+} = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}\left(a_{\mathbf{k}1} \pm i a_{\mathbf{k}2}\right)
\end{aligned}$$

$\rightsquigarrow$ Eigendrehimpuls der Photonen hat nur nichtverschwindende Komponenten in Richtung $\mathbf{k}$ mit den beiden möglichen Eigenwerten $\pm\hbar$.
Die Eigenmoden $\pm(\boldsymbol{\varepsilon}^\pm = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{\varepsilon}_1 \pm i\boldsymbol{\varepsilon}_2))$ entsprechen zirkular polarisierten Photonen.

$\rightsquigarrow$ Spin des Photons ist $\hbar$!
Im Unterschied zu einem gewöhnlichen Teilchen mit Spin 1 ist der Zustandsraum nicht drei- sondern zweidimensional – span $\{|\mathcal{J}_S = +\hbar\rangle, |\mathcal{J}_S = -\hbar\rangle\}$. Wegen Transversalität fehlt Zustand mit $\mathcal{J}^z_S = 0$.

$\leftrightarrow$ Verknüpft mit Verschwinden der Ruhemasse des Photons. (Bei Teilchen mit positiver Ruhemass Trafo ins Ruhesystem des Teilchens möglich und Spin dann in jede Richtung drehbar.)

Bemerkung:
Nach Einführung der Erzeuger und Vernichter a_l^+ und a_l für Photonen als Bosonen liegt die Einführung von ähnlichen Operatoren, die die Fermionen (die Materie) erzeugen und vernichten nahe. Geschieht später (z.B. Quantenelektrodynamik).

4.2 Emission und Absorption von Photonen durch Atome

Ungestörter Hamiltonian: $H_0 = H_{\text{Atom}} + H_{\text{Str}}$
Kopplung zwischen Strahlungsfeld und Elektronen im Wechselwirkungs-Bild:

$$H_{\text{ww}} = \sum_{n=1}^{N}\left\{-\frac{e}{mc}\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_n,t)\cdot\mathbf{p}_n(t) + \frac{e^2}{2mc^2}\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_n,t)\cdot\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_n,t)\right\} - \underbrace{\sum_{n=1}^{N}\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\left[\nabla\times\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_n,t)\right]}_{\substack{\text{Zeemann-Wechselwirkung des Magnetfeldes}\\ \text{mit dem magnetischen Moment des}\\ \text{Elektrons (relativistische Korrektur)}}}$$

Wegen $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ gilt $\mathbf{p}_n \cdot \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_n, t) = \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_n, t) \cdot \mathbf{p}_n$.

Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit zwischen verschiedenen Zuständen eines Atoms brauchen wir die "goldene Regel" von Fermi aus der zeitabhängigen quantenmechanischen Störungsrechnung.
$\rightsquigarrow$ Übergangsrate γ (Übergangsrate pro Zeiteinheit) von einem Anfangszustand i in einen Endzustand f:

$$\gamma_{i\to f} = \frac{\hbar}{2\pi} |\langle f | H_{\mathrm{ww}} | i \rangle|^2 \, \delta(E_f - E_i)$$

Anfangs- und Endzustände werden durch den Zustand des Atoms (A, B) und Photonenzahlen $\{n_{\mathbf{k}\alpha}\}$ charakterisiert.

Absorption eines Photons $\mathbf{k}\alpha$:

$$\begin{aligned} |\, i \,\rangle &= |A; n_{\mathbf{k}\alpha}\rangle \\ |\, f \,\rangle &= |B; n_{\mathbf{k}\alpha} - 1\rangle \end{aligned}$$

(die anderen Photonenmoden ändern sich nicht.)
$\rightsquigarrow$ Übergangsmatrixelement (nur orbitaler Term)

$$\langle B; n_{\mathbf{k}\alpha} - 1 | \, H_{\mathrm{ww}} \, | A; n_{\mathbf{k}\alpha} \rangle = -\frac{e}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_{\mathbf{k}}}} \underbrace{\langle n_{\mathbf{k}\alpha} - 1 | \, a_{\mathbf{k}\alpha} \, | n_{\mathbf{k}\alpha} \rangle}_{=\sqrt{n_{\mathbf{k}\alpha}}} \langle B | \sum_n e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n} \mathbf{p}_n \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\alpha} \, | A \rangle$$

Definition: Quasiklassisches **Absorptionspotential**

$$\boxed{\mathbf{A}^{(\mathrm{abs})}_{\mathbf{k}\alpha}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar n_{\mathbf{k}\alpha}}{V\omega_{\mathbf{k}}}} c \, \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\alpha} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}$$

Dann ist (in Analogie zum klassischen Ausdruck)

$$\langle B; n_{\mathbf{k}\alpha} - 1 | \, H_{\mathrm{ww}} \, | A; n_{\mathbf{k}\alpha} \rangle = -\frac{e}{mc} \langle B | \sum_n \mathbf{A}^{(\mathrm{abs})}_{\mathbf{k}\alpha}(\mathbf{r}_n) \cdot \mathbf{p}_n \, | A \rangle$$

Emission eines Photons $\mathbf{k}\alpha$:

$$\begin{aligned} |\, i \,\rangle &= |A; n_{\mathbf{k}\alpha}\rangle \\ |\, f \,\rangle &= |B; n_{\mathbf{k}\alpha} + 1\rangle \end{aligned}$$

Analoge Rechnung wie bei Absorption liefert ein quasiklassisches **Emissionspotential**

$$\boxed{\mathbf{A}^{(\mathrm{emi})}_{\mathbf{k}\alpha}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar(n_{\mathbf{k}\alpha} + 1)}{V\omega_{\mathbf{k}}}} c \, \boldsymbol{\varepsilon}^*_{\mathbf{k}\alpha} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}$$

mit dem sich das Matrixelement für die Emission schreiben läßt als

$$\langle B; n_{\mathbf{k}\alpha}+1|\, H_{\rm ww}\, |A; n_{\mathbf{k}\alpha}\rangle = -\frac{e}{mc}\,\langle B|\sum_n \mathbf{A}^{(\rm emi)}_{\mathbf{k}\alpha}(\mathbf{r}_n)\cdot\mathbf{p}_n\,|A\rangle$$

Energieerhaltungsbedingungen, ausgedrückt durch $\delta(E_f - E_i)$ in der goldenen Regel lautet für Absorption $E_B = E_A + \hbar\omega_k$ und Emission $E_B = E_A - \hbar\omega_k$.

Aufgrund obiger Matrixelemente ist Absorptionsrate proportional zu $n_{\mathbf{k}\alpha}$, d.h. zur Intensität der Strahlung $\rightsquigarrow$ entspricht klassischer Erwartung.
Emissionsrate ist jedoch proportional zu $n_{\mathbf{k}\alpha}+1$, d.h. Emission findet auch ohne Anwesenheit von Photonen statt $\rightsquigarrow$ spontane Emission ($n_{\mathbf{k}\alpha}=0$) und stimulierte Emission ($n_{\mathbf{k}\alpha}>0$), wieder proportional zu $n_{\mathbf{k}\alpha}$. Spontane Emission klassisch nicht zu erwarten, weil der photonenfreie Zustand ein feldfreier Zustand ist. Spontane Emission erklärt, warum isoliert angeregte Atome unter Emission von Photonen in tiefere Zustände übergehen.

Wir betrachten nun die spontane Emission eines Atoms genauer. Dies führt zu einer endlichen Lebensdauer τ angeregter atomarer Zustände. Das angeregte Atom kann alle Photonen $\mathbf{k}\alpha$ mit $\hbar\omega_{\mathbf{k}} = E_A - E_B$ emittieren.
$\Rightarrow$ Übergangsrate $\gamma_{A\to B} = 1/\tau_{A\to B}$ gegeben durch

$$\gamma_{A\to B} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{\mathbf{k}\alpha}\left(\frac{e}{mc}\right)^2 |\,\langle B|\sum_n \underbrace{\mathbf{A}^{(\rm emi)}_{(n_{\mathbf{k}\alpha}=\mathbf{0})}(\mathbf{r}_n)}_{\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_{\mathbf{k}}}}c\,\boldsymbol{\varepsilon}^*_{\mathbf{k}\alpha}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}\cdot\mathbf{p}_n\,|A\rangle\,|^2\delta\left(E_B - E_A + \hbar\omega_{\mathbf{k}}\right)$$

$$\underset{\sum_{\mathbf{k}}\to\frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3k}{=} \frac{e^2}{2\pi m^2}\int d^3k\sum_\alpha\left|\langle B|\sum_n e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n}\boldsymbol{\varepsilon}^*_{\mathbf{k}\alpha}\cdot\mathbf{p}_n\,|A\rangle\right|^2\delta\left(\omega_{\mathbf{k}}-\omega\right)/\omega$$

$$(\omega = (E_A - E_B)/\hbar)$$

Wegen $\xi_{\rm Photon} \gg r_{\rm Atom}$ ist $|\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n| \ll 1$ (genauer $r_{\rm Atom}/\xi_{\rm Photon} = \mathcal{O}(\alpha),\ \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$). Entwicklung der ebenen Welle $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n} = 1 - i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n - (\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n)^2/2 + \cdots$ in γ führt auf Multipolentwicklung der emittierten Strahlung und der führende Term gibt elektrische Dipolstr.

Auswertung des Matrixelementes $\langle B|\mathbf{p}_n|A\rangle$.
Für $H_{\rm Atom} = T + V_{\rm Coulomb}$ gilt $\sum_n \mathbf{p}_n = \frac{im}{\hbar}[H_{\rm Atom},\, \sum_n \mathbf{r}_n]$.

$$\Longrightarrow\quad \langle B|\sum_n \mathbf{p}_n\,|A\rangle = \frac{im}{\hbar}\,\langle B|\left[H_{\rm Atom}\,, \sum_n \mathbf{r}_n\right]|A\rangle = -im\omega\mathbf{r}_{BA}$$

mit dem Dipol-Matrixelement

$$\mathbf{r}_{BA} = \langle B|\sum_n \mathbf{r}_n\,|A\rangle$$

Damit ist

$$\begin{aligned}\gamma_{A\to B} &= \frac{e^2}{2\pi m^2}\cdot 2\int dk\, 4\pi k^2 m^2\omega^2\,|\mathbf{r}_{AB}|^2\,\delta\left(\omega_k-\omega\right)/\omega;\quad \omega_k = ck\\ &= \frac{4e^2\omega^3}{c^2}\,|\mathbf{r}_{AB}|^2\end{aligned}$$

Das Matrixelement $\mathbf{r}_{AB}$ beinhaltet Auswahlregeln für elektrische Dipolübergänge → vgl. Stark-Effekt.
H-Atom: $\tau(2p \to 1s) = 1.6 \cdot 10^{-9}$ sec, Lebensdauer für magnetische Dipolübergänge oder elektrische Quadrupolübergänge 4 Größenordnungen länger. Interessant $2s \to 1s$: in jeder Multipolentwicklung verboten ⇒ lange Lebensdauer von $\frac{1}{7}$ sec, Multiphotonenprozess.

4.3 Streuung von Licht an Atomen

Hier bleibt Photonenzahl erhalten

$$\begin{aligned} |\, i \,\rangle &= |\, \underbrace{(\mathbf{k}, \boldsymbol{\varepsilon}, \omega)}_{1\text{ Photon}}, \quad \underbrace{A}_{\text{Atomzustand}} \quad \rangle \\ |\, f \,\rangle &= \left|\left(\mathbf{k}', \boldsymbol{\varepsilon}', \omega'\right),\, B\right\rangle \end{aligned}$$

Term $\hat{\mathbf{A}}^2$ in H_{ww} bewirkt solche Prozesse in 1. Ordnung Störungstheorie
Term $\hat{\mathbf{A}} \cdot \mathbf{p}$ in H_{ww} bewirkt solche Prozesse in 2. Ordnung Störungstheorie
Beide Prozesse sind i.a. wichtig.

Ohne Rechnung: Differentieller Wirkungsquerschnitt
Kramer-Heisenberg-Formel ($\xi \gg a_0$)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r_0^2 \left(\frac{\omega'}{\omega}\right) \left| \left(\boldsymbol{\varepsilon}^* \cdot \boldsymbol{\varepsilon}'\right) \delta_{AB} - \frac{1}{m} \sum_I \left\{ \frac{\left(\boldsymbol{\varepsilon}'^* \cdot \mathbf{p}_{BI}\right)\left(\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{p}_{IA}\right)}{E_I - E_A - \hbar\omega} + \frac{\left(\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{p}_{BI}\right)\left(\boldsymbol{\varepsilon}'^* \cdot \mathbf{p}_{IA}\right)}{E_I - E_A + \hbar\omega} \right\} \right|^2$$

$r_0 = 2.8 \cdot 10^{-13}$cm: Klassischer Elektronenradius
$\mathbf{p}_{BI} = \langle B \,|\, P \,|\, I \rangle$ etc.
$\sum_I$: Summe über atomare Zwischenzustände I

4.3.1 Elastische Streuung

$\omega' = \omega;\ B = A$
Grenzfall $\omega \ll \omega_{IA} \equiv (E_I - E_A)/\hbar$: **Rayleigh-Streuung**
Entwicklung nach Potenzen von ω/ω_{IA}:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Rayl}} = \left(\frac{r_0 m}{\hbar}\right)^2 \omega^4 \left| \sum_I \frac{1}{\omega_{IA}} \left[\left(\boldsymbol{\varepsilon}'^* \cdot \mathbf{r}_{AI}\right)\left(\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{r}_{IA}\right) + \left(\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{r}_{AI}\right)\left(\boldsymbol{\varepsilon}'^* \cdot \mathbf{r}_{IA}\right) \right] \right|^2$$

Grenzfall $\omega \gg \omega_{IA}$: **Thomson-Streuung**

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Thom}} = r_0^2 \left| \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}'^* \right|$$

gilt auch für $\omega_{IA} = 0$, d.h. für freie Elektronen, die **Compton-Streuung**

4.3.2 Inelastische Streuung

Raman-Streuung
$E_A + \hbar\omega = E_B + \hbar\omega'$, nur der Prozess 2. Ordnung trägt bei, allgemein: $(\frac{d\sigma}{d\Omega})_{\text{Raman}} \approx r_0^2$.
Besondere Situation: $E_I = E_A + \hbar\omega \;\Rightarrow$ resonante Ramanstreuung, KH-Formel versagt.
Energie-Unschärfe berücksichtigen.

Kapitel 5

Relativistische Quantenmechanik

5.1 Lorentz-Transformationen

Erinnerungen an spezielle Relativitätstheorie:
Ereignis $\leftrightarrow$ Vierervektor $x = (x^\mu) = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (t, \mathbf{r})$ oder $(t, \mathbf{x})$.
Ab jetzt sind griechische Buchstaben $(\mu, \nu, \cdots)$ immer Indizes für die Komponenten von Vierervektoren und Vierertensoren.

Minkowski-Raum: $\{x\}$
Lichtgeschwindigkeit: $c = 1$, Lichtkegel zum Punkt y: $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| = x^0 - y^0$
$\rightsquigarrow$ $(x^0 - y^0)^2 - (\mathbf{x} - \mathbf{y})^2 = 0$
Vorwärtslichtkegel: $x^0 > y^0$
Rückwärtslichtkegel: $x^0 < y^0$

(Pseudo)-Metrik im Minkowski-Raum: Skalarprodukt

$$(x, y) = y^0 y^0 - \mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$$

$$(x, x) = x^2 = (x^0)^2 - (\mathbf{x})^2$$

Metrischer Tensor

$$g = g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow \quad \boxed{(x, y) = g_{\mu\nu} x^\mu x^\nu} \quad \text{Summenkonvention}$$

$$g^{-1} = g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}$$

"Herunterziehen von Indizes":

$$x_\mu = g_{\mu\nu} x^\nu = \begin{cases} x^0, & \mu = 0 \\ -x^\mu, & \mu = 1, 2, 3 \end{cases}$$

$$\rightsquigarrow \quad (x, y) = g_{\mu\nu} x^\mu y^\nu = x^\mu y_\mu = x_\mu y^\mu$$

Transformationen zwischen Inertialsystemen: $x \to x'$ mit $x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu + a^\mu$
Invarianz der Lichtgeschwindigkeit: $(x-y)^2 \implies (x'-y')^2 = 0$
homogene Lorentzgruppe:

$$a^\mu = 0,\ \det\Lambda = \pm 1 \quad \rightsquigarrow \quad \Lambda^T g \Lambda = g$$

eigentliche oder orthochrone Lorentzgruppe:

$$\det\Lambda = +1 \text{ und } \Lambda^0_0 > 0$$

Quadrat eines Vierervektors bleibt erhalten unter L-Trafo!

$$\boxed{x^\mu y_\mu = x'^\mu y'_\mu}$$

Speziell:
Gewöhnliche Drehungen im Raum:

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \mathbf{R} \end{pmatrix}; \qquad \mathbf{R} \in \mathrm{SU}(3)$$

Lorentz-Boost (beachte hier $c=1$, $\gamma = 1/\sqrt{1-v^2}$):

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \gamma & v\gamma & 0 & 0 \\ v\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

5.2 Klein-Gordon-Gleichung

In den folgenden Manipulationen schreiben wir zu Demonstrationszwecken c aus.
Viererimpuls eines Punktteilchens:

$$p^\mu = \left(\frac{E}{c},\, \mathbf{p}\right) \qquad \mathbf{p} = (p_x,\, p_y,\, p_z)$$
$$p_\mu = \left(\frac{E}{c},\, -\mathbf{p}\right)$$

Lorentz-invariantes Skalarprodukt

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

$$\implies \quad E = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$$

Korrespondenzprinzip für Wellengleichung

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t},\ \mathbf{p} \to \frac{\hbar}{i}\nabla \quad \implies \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \sqrt{-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4}\,\psi$$

Wurzelausdruck problematisch, daher $E^2 = \mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4$

$$\Longrightarrow \quad -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi = \left(-\hbar^2c^2\Delta + m^2c^4\right)\psi$$

Kompakt in kovarianter Form

$$\boxed{\left(\partial_\mu\partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right)\psi = 0, \quad \partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu}} \qquad (*)$$

bzw. mit $\Box = \partial_\mu\partial^\mu,\ c = 1,\ \hbar = 1$

$$\boxed{\left(\Box + m^2\right)\psi = 0}$$

Klein-Gordon-Gleichung

Mutliplikation von $(*)$ von links mit ψ^*, minus komplexen Konj.

$$\Longrightarrow \quad \psi^*\partial_\mu\partial^\mu\psi - \psi\partial_\mu\partial^\mu\psi^* = 0$$

$$\partial_\mu\left(\psi^*\partial^\mu\psi - \psi\partial^\mu\psi^*\right) = 0$$

Definition

$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2}\left(\psi^*\dot{\psi} - \psi\dot{\psi}^*\right) \quad \text{und} \quad \mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right)$$

ρ nicht positiv definiert $\rightsquigarrow$ keine Wahrscheinlichkeitsdichte! (Ladungsdichte)

$$\Longrightarrow \quad \dot{\rho} + \nabla\cdot\mathbf{j}$$

Freie Lösungen von $(*)$

$$\psi(\mathbf{x}, t) = e^{i(Et - \mathbf{p}\cdot\mathbf{x})/\hbar}$$

mit $E = \pm\sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4}$ $\rightsquigarrow$ positive und *negative* Energien!

Die Klein-Gordon-Gleichung beschreibt (als quantische Feldtheorie) Mesonen. Ist das Klein-Gordon Feld $\psi(x)$ reell ($\psi(x) = \psi^*(x)$), dann beschreibt es neutrale Mesonen mit Spin 0 (π-Mesonen, neutrales K-Meson K_1^0 oder K_2^0). Ist $\psi(x)$ komplex $\rightsquigarrow$ geladene Mesonen und ihre Antiteilchen.

Betrachten wir das skalare hermitesche KG-Feld – von der Instabilität der Teilchen wollen wir absehen. Mit neutralen K-Mesonen hat man Brechungs- und Bewegungsphänonmene ganz analog wie bei Lichtwellen beobachtet.

Klassische Observable einer neutralen Mesonenwelle ist eine skalare reelle Feldfunktion

$$\psi(x) = \psi^*(x)$$

genügt $(\Box + m^2)\psi(x) = 0$
Lösungen $\psi(x) = e^{i(k^0 t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{x})}$ mit $k^0 = \pm\sqrt{m^2 + \mathbf{k}^2}$
Zwei Typen von Lösungen: $\omega := \sqrt{m^2 + \mathbf{k}^2}$

$$\begin{aligned} \psi_+(x) &= e^{i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{x})} \\ \psi_-(x) &= e^{-(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{x})} \end{aligned}$$

Ansatz für allgemeine Lösungen:

$$\psi(x) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\omega}\left(e^{ikx}\alpha^*(\mathbf{k}) + e^{-ikx}\alpha(\mathbf{k})\right) \qquad (**)$$

wobei

$$k = (\omega,\, \mathbf{k}), \quad kx = k^\mu x_\mu = \omega t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{x}$$

Quantisierung: Dem Mesonenfeld wird ein Feldoperator $\Phi(x)$ zugeordnet.

Annahme I:

$$\begin{aligned} \Phi(x) &= \Phi^+(x) \qquad \text{(hermitesch)} \\ \left(\Box + m^2\right)\Phi(x) &= 0 \end{aligned}$$

Impuls und Energie beobachtbar $\rightsquigarrow$ hermitescher Operator. Wegen relativistischer Invarianz zusammengefaßt im Vierervektor-Operator

$$\hat{p} = (\hat{p}^\mu) = (\hat{H}, \hat{\mathbf{p}})$$

($\hat{p}^0$ = Energieoperator = Hamiltonoperator $\hat{H}$)
Wegen Energie-Impulserhaltung $\hat{p}^\mu$ zeitunabhängig.
Im Heisenbergbild gilt für beliebigen Operator $\hat{A}(t, \mathbf{x})$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\hat{A}(t,\mathbf{x}) &= i\left[\hat{H},\, \hat{A}(t,\mathbf{x})\right] \\ \frac{\partial}{\partial x^j}\hat{A}(t,\mathbf{x}) &= -i\left[\hat{p}^j,\, \hat{A}(t,\mathbf{x})\right], \quad j = 1,2,3 \end{aligned}$$

Annahme II:

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu}\Phi(x) = i\left[\hat{p}_\mu,\, \Phi(x)\right] \qquad (***)$$

Annahme I und II liefern Teilcheninterpretationen des Mesonenfeldes.
Analog zu $(**)$

$$\Phi(x) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\omega}\left(e^{ikx}\hat{a}^+(\mathbf{k}) + e^{-ikx}\hat{a}(\mathbf{k})\right)$$

Operatoren $\hat{a}^+(\mathbf{k})$ und $\hat{a}(\mathbf{k})$ zueinander hermitesch Konj.
Wegen $(***)$ folgt

$$\begin{aligned} &\textstyle\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \quad \frac{1}{2\omega}\left(e^{ikx} ik_\mu \hat{a}^+(\mathbf{k}) + e^{-ikx}(-ik_\mu)\hat{a}(\mathbf{k})\right) \\ = \; &i\textstyle\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \quad \frac{1}{2\omega}\left(e^{ikx}\left[\hat{p}_\mu,\, \hat{a}^+(\mathbf{k})\right] + e^{-ikx}\left[\hat{p}_\mu,\, \hat{a}(\mathbf{k})\right]\right) \end{aligned}$$

also $[\hat{p}_\mu,\, \hat{a}^+(\mathbf{k})] = k_\mu \hat{a}(\mathbf{k})$ und $[\hat{p}_\mu,\, \hat{a}(\mathbf{k})] = -k_\mu \hat{a}(\mathbf{k})$ (#)

Definition: $\boxed{|\,0\,\rangle = \text{Vakuum}}$ (kein Teilchen vorhanden), $\langle\, 0\,|\,0\,\rangle = 1$
Es ist $\hat{p}_\mu|\,0\,\rangle = 0$ also

$$\left[\hat{p}^\mu,\, \hat{a}^+(\mathbf{k})\right]|\,0\,\rangle = k^\mu \hat{a}^+(\mathbf{k})\,|\,0\,\rangle \quad \Longrightarrow \quad \hat{p}^\mu \hat{a}^+(\mathbf{k})\,|\,0\,\rangle = k^\mu \hat{a}^+(\mathbf{k})\,|\,0\,\rangle$$

$\Longrightarrow$ $\boxed{|\,\mathbf{k}\,\rangle = \hat{a}^+(\mathbf{k})\,0\,\rangle}$ ist Eigenzustand des Energie- und Impulsoperators mit Eigenwert $k^\mu = (\omega,\, \mathbf{k})$. Wir identifizieren diesen Zustand als **Ein-Mesonen-Zustand** mit scharfer Energie ω und scharfem Impuls $\mathbf{k}$.

Wegen $\hat{p}^\mu \hat{a}(\mathbf{k})\,|\,0\,\rangle = -k^\mu \hat{a}(\mathbf{k})\,|\,0\,\rangle$ wäre $\hat{a}(\mathbf{k})|\,0\,\rangle$ ein Zustand mit negativer Energie.
$\Longrightarrow$ Wir fordern $\boxed{\hat{a}(\mathbf{k})|\,0\,\rangle = 0}$ $\quad \forall \mathbf{k}$

Analog für Zustand $|\,p\,\rangle$ mit $\hat{p}^\mu|\,p\,\rangle = p^\mu|\,p\,\rangle$, d.h. Eigenzustand des Vierer-Impulses folgt mit (#)

$$\begin{aligned} \hat{p}^\mu \hat{a}^+(\mathbf{k})\,|\,p\,\rangle &= (p^\mu + k^\mu)\,\hat{a}^+(\mathbf{k})\,|\,p\,\rangle \\ \hat{p}^\mu \hat{a}\,(\mathbf{k})\,|\,p\,\rangle &= (p^\mu - k^\mu)\,\hat{a}\,(\mathbf{k})\,|\,p\,\rangle \end{aligned}$$

$$\hat{p}^\mu \hat{a}^+(\mathbf{k}_1)\hat{a}^+(\mathbf{k}_2)\,|\,0\,\rangle = (k_1^\mu + k_2^\mu)\,\underbrace{\hat{a}^+(\mathbf{k}_1)\hat{a}^+(\mathbf{k}_2)}_{\substack{\text{Interpret. Zustand} \\ \text{mit zwei Mesonen}}}\,|\,0\,\rangle$$

Analog n-Mesonenzustände.
$\hat{a}^+$ heißen Erzeuger, $\hat{a}$ Vernichter.

Wir wissen noch nichts über die Norm von Zuständen mit einem oder mehreren Mesonen. Wir brauchen eine weitere physikalische Annahme.
Betrachte Messung des Mesonenfeldes an zwei verschiedenen Raum-Zeit-Punkten x, y.
Für $(x-y)^2 < 0$ liegt x außerhalb des Vorwärtslichtkegels von y und umgekehrt.
$\Longrightarrow$ Kein Signal von der Messung an Punkt x kann y erreichen und umgekehrt.

Annahme III:

$$[\Phi(x),\, \Phi(y)] = 0 \text{ für } (x-y)^2 < 0 \qquad (\textit{Mikrokausalität})$$

Sei $x = (t, \mathbf{x}),\ y = (t', \mathbf{y})$ für $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$

$$\Longrightarrow \quad \left[\Phi(t,\mathbf{x}),\, \Phi(t',\mathbf{y})\right] = 0 \text{ für } |t'-t| < |\mathbf{x}-\mathbf{y}| \neq 0$$

Insbesondere $[\Phi(t,\mathbf{x}),\, \Phi(t,\mathbf{y})] = 0$ und $\left[\Phi(t,\mathbf{x}),\, \frac{\partial}{\partial t}\Phi(t,\mathbf{y})\right] = 0$ für $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$.

Folgerung: Aus dieser Mikrokausalität folgt der *Bose-Charakter* der Mesonen!

$$\begin{aligned} \Phi(t,\mathbf{x}) &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{2\omega} e^{-\mathbf{kx}} \left(e^{-\mathbf{kx}}\hat{a}^+(\mathbf{k}) + e^{-i\omega t}\hat{a}(-\mathbf{k})\right) \\ \dot{\Phi}(t,\mathbf{x}) &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{i}{2} e^{-\mathbf{kx}} \left(e^{-\mathbf{kx}}\hat{a}^+(\mathbf{k}) - e^{-i\omega t}\hat{a}(-\mathbf{k})\right) \end{aligned}$$

Umkehrung der Fourier-Trafo liefert

$$\left.\begin{aligned} e^{i\omega t}\hat{a}^+(\mathbf{k}) + e^{-i\omega t}\hat{a}(-\mathbf{k}) &= 2\omega \int d^3x\, e^{i\mathbf{kx}}\Phi(t,\mathbf{x}) \\ e^{i\omega t}\hat{a}^+(\mathbf{k}) - e^{-i\omega t}\hat{a}(-\mathbf{k}) &= -2i \int d^3x\, e^{i\mathbf{kx}}\dot{\Phi}(t,\mathbf{x}) \end{aligned}\right\} \quad (\times)$$

$$\begin{aligned} \Longrightarrow \qquad & \left[e^{i\omega_1 t}\hat{a}^+(\mathbf{k}_1) + e^{-i\omega_1 t}(-\mathbf{k}_1),\ e^{i\omega_2 t}\hat{a}^+(\mathbf{k}_2) + e^{-i\omega_1 t}(-\mathbf{k}_2)\right] \\ & = 2\omega_1\omega_2 \int d^3x d^3y\, e^{i\mathbf{k}_1\mathbf{x}} e^{i\mathbf{k}_2\mathbf{y}} \underbrace{\left[\Phi(t,\mathbf{x}),\ \Phi(t,\mathbf{y})\right]}_{=0 \quad \text{wg. Mikrokausalität}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Longrightarrow \qquad & e^{i(\omega_1+\omega_2)t}\left[\hat{a}^+(\mathbf{k}_1),\ \hat{a}^+(\mathbf{k}_2)\right] - e^{i(\omega_1-\omega_2)t}\left[\hat{a}(-\mathbf{k}_2),\ \hat{a}^+(\mathbf{k}_1)\right] \\ & + e^{i(\omega_1-\omega_2)t}\left[\hat{a}(\mathbf{k}_1),\ \hat{a}^+(\mathbf{k}_2)\right] - e^{i(\omega_1+\omega_2)t}\left[\hat{a}(-\mathbf{k}_1),\ \hat{a}(\mathbf{k}_2)\right] = 0 \end{aligned}$$

Damit dies für alle Zeiten gilt, folgt

$$\boxed{\begin{aligned} \left[\hat{a}^+(\mathbf{k}_1),\ \hat{a}^+(\mathbf{k}_2)\right] &= 0 \\ \left[\hat{a}(\mathbf{k}_1),\ \hat{a}(\mathbf{k}_2)\right] &= 0 \end{aligned}} \qquad \forall\, \mathbf{k}_1,\ \mathbf{k}_2$$

Dies bedeutet bereits, daß Mesonen Bose-Charakter haben.

Der Zusammenhang zwischen Mikrokausalität und dem Bose-Charakter der Mesonen gilt nicht nur für freie Felder, die wir hier betrachtet haben. Man kann ganz allgemein zeigen, daß die Mikrokausalität den Bose-Charakter aller Teilchen mit ganzzahligem Spin bedingt (Pauli 1936, 1940).

Betrachten wir nun den Kommutator von $\hat{a}$ und $\hat{a}^+$:
Wir lösen $(\times)$ nach $\hat{a}^+$ und $\hat{a}$ auf

$$\begin{aligned} \Longrightarrow \quad \left[\hat{a}(\mathbf{k}_1),\, \hat{a}^+(\mathbf{k}_2)\right] &= e^{i(\omega_1-\omega_2)t} \int d^3x d^3y\, e^{-i\mathbf{k}_1\mathbf{x}}\, e^{-i\mathbf{k}_2\mathbf{y}} \\ & \quad \cdot \left\{ i\omega_2 \left[\dot{\Phi}(t,\mathbf{x}),\, \Phi(t,\mathbf{y})\right] - i\omega_1 \left[\Phi(t,\mathbf{x}),\, \dot{\Phi}(t,\mathbf{y})\right] \right\} \end{aligned}$$

Der Integrant verschwindet für $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$, muß also einen δ-Funktions-Beitrag für $\mathbf{x} = \mathbf{y}$ haben, da ansonsten alle Erzeuger mit allen Vernichtern kommutieren und daher alle Zustände, die man durch Anwendung von Erzeugungsoperatoren auf das Vakuum erhält, gleich dem Nullvektor wären.

$\rightsquigarrow$ Setzen

$$\left[\Phi(t,\mathbf{x}),\, \dot{\Phi}(t,\, \mathbf{y})\right] = i\delta^3(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \qquad \text{Kanonische Vertauschungsregel}$$

$$\Longrightarrow \qquad \boxed{\left[\hat{a}(\mathbf{k}_1),\, \hat{a}^+(\mathbf{k}_2)\right] = (2\pi)^3 2\omega_1 \delta^3(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)}$$

5.3 Lagrange-Formalismus, Kanonische Quantisierungsregeln

Betrachte klassisches Skalarfeld $\varphi(x)$.
Lagrangedichte:

$$\mathcal{L}_0(\varphi,\, \partial_\mu\varphi) = \frac{1}{2}\left\{\partial_\mu\varphi(x)\partial^\mu\varphi(x) - m^2\varphi^2(x)\right\} \qquad (*)$$

Wirkungsfunktional

$$\mathcal{S}[\varphi] = \int dx\, \mathcal{L}_0(\varphi,\, \partial_\mu\varphi)$$

Prinzip der stationären Wirkung:

$$\delta\mathcal{S}[\varphi] = 0$$

für die wirklich vorkommenden Felder (führt auf die Feldgleichung).

$$\delta\mathcal{S}[\varphi] = \int dx\, \left\{\frac{\partial\mathcal{L}_0(\varphi,\partial_\mu\varphi)}{\partial\left(\partial_\nu\varphi(x)\right)}\partial_\nu\delta\varphi(x) + \frac{\partial\mathcal{L}_0\left(\varphi,\, \partial_\mu\varphi\right)}{\partial\varphi(x)}\delta\varphi(x)\right\}$$

Partielle Integration im ersten Term, Randterme weglassen, da nach Voraussetzung $\partial\varphi(x)$ im Unendlichen verschwindet.

$$\delta\mathcal{S}[\varphi] = \int dx\, \left\{-\partial_\nu\frac{\partial\mathcal{L}_0\left(\varphi,\, \partial_\mu\varphi\right)}{\partial\left(\partial_\nu\varphi(x)\right)} + \frac{\partial\mathcal{L}_0\left(\varphi,\, \partial_\mu\varphi\right)}{\partial\varphi(x)}\right\}\delta\varphi(x) = 0$$

Da für endliche x die Variation des Feldes $\delta\varphi(x)$ ganz beliebig war, folgt **Euler-Lagrange Gleichung**

$$\partial_\nu\frac{\partial\mathcal{L}_0(\varphi,\, \partial_\mu\varphi)}{\partial\left(\partial_\nu\varphi(x)\right)} - \frac{\partial\mathcal{L}_0(\varphi,\, \partial_\mu\varphi)}{\partial\varphi(x)} = 0$$

bzw.

$$\boxed{\partial_\nu\partial^\nu\varphi(x) + m^2\varphi(x) = 0}$$

Zur *Quantisierung* einer Theorie (wie oben) mit Skalarfeldern $\varphi_j (j = 1, \cdots, N)$ und Ladungsdichte $\mathcal{L}(x, \varphi_j, \partial_\mu\varphi_j)$ als Integral der Lagrange-Dichte über $t = \text{const.}$

$$L[t, \varphi_j, \dot{\varphi}_j] = \int_{t=\text{const.}} d^3x\, \mathcal{L}(x, \varphi_j, \partial_\mu\varphi_j)$$

L betrachten wir als Funktion bzw. Funktional von t, $\varphi_j(\mathbf{x}, t)$ und $\dot{\varphi}_j(\mathbf{x}, t)$.

Kanonisch Konjugierte Impulse:

$$\Pi_k(\mathbf{x}, t) = \frac{L[t, \varphi_j, \dot{\varphi}_j]}{\delta\dot{\varphi}_k(\mathbf{x}, t)} \qquad (k = 1, \cdots, N)$$

Nun muß man wie in der Mechanik voraussetzen, daß diese Beziehungen nach $\dot{\varphi}_j$ auflösbar sind, d.h. daß es Umkehrfunktionale F_j gibt:

$$\dot{\varphi}_j = F_j[t, \varphi, \Pi]$$

Es bilden dann $\varphi_j(\mathbf{x}, t)$ und $\Pi_k(\mathbf{x}, t)$ zu jeder Zeit t ein vollständiges System dynamischer Variablen.

Hamilton-Funktion:

$$H[t, \varphi, \Pi] = \int d^3x \, \Pi_j \dot{\varphi}_j - L$$

Übergang zur Quantentheorie: Betrachten φ_j und Π_k als Feldoperatoren, für die wir die kanonischen Vertauschungsregeln postulieren, die für alle Zeiten gelten sollen:

$$\begin{aligned} [\varphi_j(\mathbf{x}, t),\, \varphi_k(\mathbf{y}, t)] &= 0 \\ [\Pi_j(\mathbf{x}, t),\, \Pi_k(\mathbf{y}, t)] &= 0 \qquad\qquad (j, k = 1, \cdots, k) \\ [\varphi_j(\mathbf{x}, t),\, \Pi_k(\mathbf{y}, t)] &= i\delta_{jk}\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \end{aligned}$$

Für das freie Skalarfeld mit Lagrange-Dichte wie in $(*)$ liefert die kanonische Quantisierung genau das quantisierte Feld wie im vorigen Abschnitt besprochen, und die Hamiltonfunktion ist $H = \frac{1}{2} \int d^3x \, \left[\dot{\phi}^2 + (\nabla\phi)^2 + m^2\phi^2\right]$.

Bemerkung:
Für die Eichtheorien, die heute die Teilchenphysik beherrschen, ist die kanonische Quantisierung nur in speziellen Eichungen durchführbar (vgl. Quantisierung des elektromagnetischen Feldes).

Kapitel 6

Die Dirac-Gleichung

6.1 Die Dirac-Gleichung

Die Dirac-Gleichung, im Gegensatz zur Klein-Gordon-Gleichung, ist erster Ordnung und ist nur für Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen gültig. Da die Klein-Gordon-Gleichung (KGG) nichts weiter als die relativistische Relation zwischen Energie, Impuls und Masse ausdrückt, muß sie für Teilchen mit beliebigem Spin gelten.

Die Dirac-Gleichung hat einen ganz anderen Ursprung und kann von den Transformationseigenschaften eines Spinors unter der Lorentzgruppe hergeleitet werden. Hiermit befassen wir uns später – zunächst wollen wir Dirac's ursprünglichen Gedankengang nachvollziehen.

Die KGG leidet an zwei Defekten: Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist nicht positiv definiert und Zustände mit negativer Energie treten auf. Aus diesem Grunde wurde die KGG (historisch) zunächst verworfen und Dirac suchte nach einer Gleichung diese zu ersetzen, und zwar durch eine relativistische invariante Gleichung für eine Feldfunkion $\psi(x)$, die freie Elektronen beschreiben sollte.

Für *nicht*relativistische Elektronen hat PAULI (1927) die richtige Beschreibung gefunden: Im Rahmen des Schrödinger-Bildes wird ein nicht-relativistisches Elektron durch eine zweikomponentige Wellenfunktion beschrieben:

$$\psi(\mathbf{x},t) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{x},t) \\ \psi_2(\mathbf{x},t) \end{pmatrix}$$

Dabei sind $|\psi_i(\mathbf{x},t)|^2\, d^3x,\ (i=1,2)$ die Wahrscheinlichkeiten, das Elektron mit Spin in positiver $(i=1)$ oder negativer $(i=2)$ 2-Richtung im Volumenelement d^3x um $\mathbf{x}$ anzutreffen.

Gesamtdrehimpulsoperator:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$$

wobei

$$\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \frac{\hbar}{i}\nabla$$

$$\underbrace{\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\ \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}_{\text{Pauli-Spinmatrizen}}$$

$\psi(\mathbf{x},t)$ (bzw. jede einzelne Komponente) soll der Schrödinger-Gleichung genügen

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x},t) = -\frac{\hbar^2\Delta}{2m}\psi(\mathbf{x},t)$$

Diese Gleichung ist sicher nicht relativistisch invariant, da nur eine zeitliche aber zwei räumliche Ableitungen vorkommen.

Aus Gründen, die uns heute nicht mehr sehr zwingend erscheinen, suchte DIRAC nach einer in zeitlichen und räumlichen Ableitungen linearen Feldgleichung. Wir wollen dies als heuristisches Prinzip betrachten und machen den allgemeinen linearen Ansatz

$$\boxed{(i\gamma^\mu\partial_\mu - a)\,\psi(x) = 0} \qquad (*)$$

wobei die Anzahl der Komponenten von ψ, die Natur der Koeffizienten γ^μ und die Konstante a noch völlig offen ist.

Nochmalige Anwendung des Operators $i\gamma^\mu\partial_\mu$ auf $(*)$ liefert

$$\begin{aligned}[-(\gamma^\mu\partial_\mu)(\gamma^\gamma\partial_\gamma) - i(\gamma^\mu\partial_\mu)\,a]\,\psi &= 0\\ \text{bzw.} \qquad \left(\gamma^\mu\gamma^\nu\partial_\mu\partial_\nu + a^2\right)\psi &= 0\end{aligned}$$

Wegen $\partial_\mu\partial_\nu = \partial_\nu\partial_\mu$ kann man $\gamma^\mu\gamma^\nu$ durch die symmetrische Kombination

$$\frac{1}{2}(\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu) =: \frac{1}{2}\{\gamma^\mu,\,\gamma^\nu\}$$

ersetzen und erhalten

$$\frac{1}{2}\{\gamma^\mu,\,\gamma^\nu\}\,\partial_\mu\partial_\nu + a^2\psi = 0 \qquad (**)$$

Auf der anderen Seite erfordert das Prinzip der Relativität, daß die Energie-Impuls-Masse-Beziehung erfüllt ist, d.h., daß jede Komponente von die KGG erfüllt

$$\left(\Box + m^2\right)\psi(x) = 0$$

Daher folgt, daß $a = m$ und der Koeffizient von $\partial_\mu\partial_\nu$ in $(**)$ $g^{\mu\nu}$ sein muß

$$\boxed{a = m \quad \text{und} \quad \{\gamma^\mu,\,\gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}} \qquad (***)$$

Diese Relation muß für die Koeffizienten erfüllt sein.
Für $\mu = \nu = 0$, $\mu = \nu = i$ und $\mu \neq \nu$ folgt nacheinander

$$(\gamma^0)^2 = 1, \quad (\gamma^i)^2 = -1, \quad \gamma^\mu\gamma^\nu = -\gamma^\nu\gamma^\mu \qquad (\mu \neq \nu)$$

Diese Bedingungen können weder mit komplexen Zahlen noch mit 2×2-Matrizen für γ^μ erfüllt werden. Aber mit 4×4-Matrizen ist es möglich, z.B.:

$$\gamma^0 = \left(\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 0 & -1 \end{array}\right); \quad \gamma^j = \left(\begin{array}{c|c} 0 & \sigma^j \\ \hline -\sigma^j & 0 \end{array}\right), \quad j = 1, 2, 3$$

Natürlich ist diese Wahl nicht die einzig mögliche: $\gamma'^\mu = S\gamma^\mu S^{-1}$ mit einer beliebigen unitären 4×4-Matrix S erfüllt ebenfalls $(***)$. Die Dirac-Gleichung ist dann mit $\psi' = S\psi$ erfüllt.

Die Gleichung, die Dirac 1928 postulierte, war also

$$\boxed{(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\,\psi(x) = 0}$$

mit

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \\ \psi_3(x) \\ \psi_4(x) \end{pmatrix}$$

wobei $\psi(x)$ eine vierkomponentige Feldfunktion, ein Dirac-Spinor ist.

Wir wollen nun einen (Wahrscheinlichkeits-)Strom j^μ konstruieren (wie bei KGG) und prüfen, ob die Dichte positiv ist.
Ausgehend von der Dirac-Gleichung

$$\left(i\gamma^0 \partial_0 + i\gamma^j \partial_j - m\right)\psi = 0$$

betrachten wir die hermitesch-konjugierte Gleichung ($\gamma^{0+} = \gamma^0$; $\gamma^{j+} = \gamma^j$)

$$\psi^+ \left(-i\gamma^0 \overleftarrow{\partial}_0 + i\gamma^j \overleftarrow{\partial}_j - m\right) = 0$$

wobei $\psi^+ \overleftarrow{\partial}_\mu = \partial_\mu \psi^+$, $\psi^+ = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*)$.
Multiplikation von rechts mit γ_0 (und $\gamma^j \gamma^0_\mu = -\gamma^0 \gamma^j$) gibt

$$\bar{\psi}\left(i\gamma^\mu \overleftarrow{\partial}_\mu + m\right) = 0 \qquad (+)$$

mit $\boxed{\bar{\psi} := \psi^+ \gamma^0}$ der zu ψ **adjungierte Spinor**

Mit $(+)$ und der Dirac-Gleichung zeigt man nun, daß der **Strom**

$$\boxed{j^\mu := \bar{\psi}\gamma^\mu \psi}$$

erhalten ist:

$$\begin{aligned}\partial_\mu j^\mu &= \left(\partial_\mu \bar{\psi}\right)\gamma^\mu\psi + \bar{\psi}\gamma^\mu\left(\partial_\mu\psi\right)\\ &= \left(im\bar{\psi}\right)\psi + \bar{\psi}\left(-im\psi\right)\\ &= 0\end{aligned}$$

Die Dichte j^0 ist daher

$$j^0 = \bar{\psi}\gamma^0\psi = \psi^+\psi = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + |\psi_3|^2 + |\psi_4|^2$$

und diese ist *positiv* j^0 kann also als eine Wahrscheinlichkeitsdichte für die durch die Dirac-Gleichung beschriebenen Teilchen dienen.

Die Schwierigkeit mit der KGG betraf Zustände mit negativer Energie. Ein Dirac-Teilchen in Ruhe gehorcht ($\psi \propto e^{ip_0 t},\ p_j = 0$)

$$\gamma^0 p_0\psi = m\psi \quad \text{bzw.} \quad p_0\psi = m\gamma^0\psi$$

Die Eigenwerte von γ^0 sind $+1$ (2-fach) und -1 (2-fach), also gibt es zwei Lösungen mit positiver Energie $+m$ und zwei mit negativer Energie $-m$. Tatsächlich sieht man leicht (durch Ausschreiben aller 4 Komponenten der Dirac-Gleichung), daß die Eigenwerte E gegeben sind durch

$$\begin{aligned}E &= +\left(m^2+p^2\right)^{1/2} && \text{(2-fach)}\\ E &= -\left(m^2+p^2\right)^{1/2} && \text{(2-fach)}\end{aligned}$$

Zu jedem p gibt es 2 Lösungen mit $E > 0$, entsprechend den 2 Zuständen eines Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchens, und 2 Lösungen mit $E < 0$.
Ein Elektron in einem Zustand mit $E > 0$ kann daher (in WW mit anderen Teilchen oder Feldern) in einen Zustand mit $E < 0$ springen und dann kaskadenförmig hinunter nach $E = -\infty$ und dabei unendlich viel Strahlung abgeben.

Dirac's Lösung zu diesem Problem: Die Elektronen haben Spin-$\frac{1}{2}$, sie genügen daher Pauli's Ausschließungsprinzip. Dirac nahm an, daß die Zustände mit negativer Energie bereits komplett besetzt sind
$\Rightarrow$ Pauli-Prinzip verhindert, daß weitere Elektronen in die See mit $E < 0$ fallen.

Bemerkung:
engl. "Sea" $\hat{=}$ *die* See, im Gegensatz dazu ist der See = "lake". Diese "Dirac-See" ist das **Vakuum**. (Vakuum ist also mitnichten "leer"). Wichtige Voraussage dieser Theorie: **Antiteilchen**

Angenommen es existiert eine Vakanz (Leerstelle) in der Elektron-See: ein "Loch" mit Energie $-|E|$.
Dann kann ein Elektron mit Energie E dieses Loch füllen, dabei eine Energie $2E$ emittieren und so nur Vakuum hinterlassen:

$$\mathrm{e}^- + \text{hole} \rightarrow \text{energy}$$

Auf diese Weise hat das "Loch" effektiv eine Ladung $+e$ und positive Energie. Diese Theorie von Dirac sagte so die Existenz von **Antiteilchen** zu allen Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen

voraus, und im Laufe der Zeit wurden $e^+, \bar{p}, \bar{n}, \bar{\gamma}$ etc. alle gefunden. Es stellt sich heraus, daß auch Bosonen Antiteilchen haben (siehe quantisiertes, komplexes Klein-Gordon-Feld).

Bemerkung: Trotz der erfolgreichen Lösung des Problems mit negativen Energien ist die Dirac-Gleichung *nicht länger eine Ein-Teilchen-Gleichung*! Sie beschreibt Teilchen und Antiteilchen. Die einzig konsistente Philosophie ist, den Spinor ψ als **Feld** anzusehen und $|\psi|^2$ als Maß für die Anzahl von Teilchen an einem bestimmten Punkt. Diese Feld ist natürlicherweise ein Quantenfeld.

6.2 Lösungen der Dirac-Gleichung

Ansatz: ebene Wellen $\psi(x) \propto e^{-ipx} = e^{-i(p^0 t - \mathbf{p}\cdot\mathbf{x})}$
$\psi(x)$ muß auch der KGG genügen $\Rightarrow \quad p^0 = \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$

$$\boxed{\psi(x) = e^{-ipx} u(p)}$$

wobei $u(p)$ ein zu bestimmender Spinor ist.

Einsetzen in Dirac-Gleichung:

$$\boxed{(\not{p} - m)\, u(p) = 0}$$

wobei $\not{p} := p^\mu \gamma_\mu$ eine 4×4-Matrix.
Betrachte zunächst $\mathbf{p} = 0$, bzw.

$$p = p_{\mathrm{R}} \equiv \begin{pmatrix} m \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Wie wir sehen werden, entspricht dies einem Elektron in Ruhe (Index "R").

$$\begin{aligned} p^0\gamma_0 - m &= \begin{pmatrix} p^0 - m & & & \\ & p^0 - m & & \\ & & -p^0 - m & \\ & & & -p^0 - m \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & 0 & & \\ & & -2m & \\ & & & -2m \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$(p^0\gamma_0 - m)u(p_{\rm R}) = 0$ hat zwei linear unabhängige Lösungen.

$$u_s(p_{\rm R}) = \sqrt{2m}\begin{pmatrix}\chi_s\\0\end{pmatrix}$$

mit $s = \pm\frac{1}{2}$ und

$$\chi_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix};\quad \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

Zweierspinoren.
Wir fassen die beiden oberen und die beiden unteren Komponenten des Dirac-Spinors u jeweils zu einem Zweierspinor zusammen.

Für einen allgemeinen Vierervektor p machen wir den Ansatz

$$u(p) = \begin{pmatrix}\xi\\\eta\end{pmatrix}$$

wobei ξ, η zweikomponentige Spinoren sind.
Wg.

$$\left(p^0\gamma^0 - \mathbf{p}\boldsymbol{\gamma} - m\right)u(p) = 0$$

folgt

$$\begin{pmatrix}p^0 - m & -\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}\\ \mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma} & -p^0 - m\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\xi\\\eta\end{pmatrix} = 0$$

d.h.

$$\left(\begin{array}{cc|cc} p^0 - m & 0 & -p^3 & -p^1 + ip^2\\ 0 & p^0 - m & -p^1 - ip^2 & p^3\\ \hline p^3 & p^1 - ip^2 & -p^0 - m & 0\\ p^1 + ip^2 & -p^3 & 0 & -p^0 - m\end{array}\right)\begin{pmatrix}\xi_1\\\xi_2\\\eta_1\\\eta_2\end{pmatrix} = 0$$

also

$$\begin{aligned}\left(p^0 - m\right)\xi - \left(\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}\right)\eta &= 0 \qquad \text{(a)}\\ \left(\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}\right)\xi - \left(p^0 + m\right)\eta &= 0 \qquad \text{(b)}\end{aligned}$$

$$\underset{\text{(b)}}{\Longrightarrow} \qquad \eta = \frac{\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{p^0 + m}$$

Prüfe (a):

$$\begin{aligned}\left(p^0 - m - \frac{\left(\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}\right)^2}{p^0 + m}\right)\xi &= \left(p^0 - m - \frac{\mathbf{p}^2}{p^0 + m}\right)\xi\\ &= \frac{(p^0)^2 - m^2 - \mathbf{p}^2}{p^0 + m}\,\xi \;=\; 0\end{aligned}$$

Der zweikomponentige Spinor ξ ist also völlig beliebig. Wir erhalten auch für einen allgemeinen Viererimpuls p zwei linear unabhängige Lösungen negativer Frequenz, die wir folgendermaßen normieren wollen:

$$\boxed{u_s(p) = \sqrt{p^0 + m} \begin{pmatrix} \chi_s \\ \dfrac{\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{p^0+m}\chi_s \end{pmatrix}} \qquad s = \pm\frac{1}{2}$$

Ganz analog sind die Lösungen positiver Frequenz:

Ansatz: $\psi(x) = e^{ipx}v(p)$, $v(p)$ der zu bestimmende Dirac-Spinor.
Einsetzen in Dirac-Gleichung:

$$(\not{p} + m)\, v(p) = 0$$

wieder für alle p zwei linear unabhängige Lösungen wählen

$$\boxed{v_s(p) = -\sqrt{p^0 + m} \begin{pmatrix} \dfrac{\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{p^0+m}\epsilon\chi_s \\ \epsilon\chi_s \end{pmatrix}} \qquad s = \pm\frac{1}{2},\ \epsilon = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Da Dirac-Gleichung linear ist, erhält man allgemeine Lösungen durch Superposition in Form des Fourierintegrals

$$\boxed{\psi(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{2p^0}\sum_{s=\pm\frac{1}{2}}\left\{e^{ipx}v_s(p)\beta_s^*(\mathbf{p}) + e^{-ipx}u_s(p)\alpha_s(\mathbf{p})\right\}}$$

Dabei sind $\alpha_s(\mathbf{p})$ und $\beta_s^*(\mathbf{p})$ beliebige komplexwertige Funktionen.

6.3 Quantisierung des Dirac-Feldes

Wir betrachten nun den Dirac-Spinor als Feldoperator. Wie beim Mesonenfeld entwickeln wir den Feldoperator nach ebenen Wellen, wobei die Entwicklungskoeffizienten Operatoren sein werden, d.h. wir ersetzen in der Fourierentwicklung $\alpha_s(\mathbf{p}) \to \hat{a}_s(\mathbf{p})$, $\beta_s^*(\mathbf{p}) \to \hat{b}_s^+(\mathbf{p})$.

$$\rightsquigarrow \qquad \boxed{\psi(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{1}{2p^0}\sum_{s=\pm\frac{1}{2}}\left\{e^{ipx}v_s(p)\hat{b}_s^+(\mathbf{p}) + e^{-ipx}u_s(p)\hat{a}_s(\mathbf{p})\right\}}$$

Die Natur der Operatoren $\hat{a}$ und $\hat{b}^+$ ist zu klären.

Wir fordern wieder die Gültigkeit der Heisenberg-Gleichung:

$$\frac{\partial\psi(x)}{\partial x^\mu} = i\,[\hat{p}_\mu,\, \psi(x)]$$

Wie beim Mesonenfeld folgt

$$\begin{aligned}
\left[\hat{p}_\mu,\, \hat{a}_s^+(\mathbf{p})\right] &= p_\mu \hat{a}_s^+(\mathbf{p}) \\
\left[\hat{p}_\mu,\, \hat{b}_s^+(\mathbf{p})\right] &= p_\mu \hat{b}_s^+(\mathbf{p}) \\
\left[\hat{p}_\mu,\, \hat{a}_s(\mathbf{p})\right] &= -p_\mu \hat{a}_s(\mathbf{p}) \\
\left[\hat{p}_\mu,\, \hat{b}_s(\mathbf{p})\right] &= -p_\mu \hat{b}_s(\mathbf{p}) \\
\left(s = \pm\frac{1}{2}\right)
\end{aligned}$$

Auch für die Operatoren $\hat{a}$ und $\hat{b}$ müssen wir fordern:

$$\begin{aligned}
\hat{a}_s(\mathbf{p})|\,0\,\rangle = 0 \\
\hat{b}_s(\mathbf{p})|\,0\,\rangle = 0
\end{aligned}$$

An Stelle eines Satzes von Erzeugungsoperatoren haben wir vier. Entsprechend können wir zu jedem festen Impuls $\mathbf{p}$ vier Ein-Teilchen-Zustände aufbauen:

$$\begin{aligned}
&\text{(a)} \qquad \hat{a}_s^+(\mathbf{p})|\,0\,\rangle, \\
&\text{(b)} \qquad \hat{b}_s^+(\mathbf{p})|\,0\,\rangle, \qquad s = \pm\frac{1}{2}
\end{aligned}$$

Die Zustände (a) entsprechen einem Elektron mit festem Impuls $\mathbf{p}$ und den zwei linear unabhängigen Spinzuständen. Nehmen wir die Theorie ernst, dann müssen wir fordern, daß es ein weiteres Teilchen mit exakt gleicher Masse gibt (Dirac 1930, Oppenheim 1930). Dies wurde durch die Entdeckung des Positrons (Andersson 1932, 1933) bestätigt. (b) identifizieren wir mit Positronen, und wir werden sehen, daß in der Dirac-Theorie Elektronen und Positronen automatisch umgekehrte Ladung haben.
Zur Algebra der Erzeugungs- und Vernichtungsfelder:

Falls wir dieselben Vertauschungsregeln wie beim Mesonen-Feld fordern

$$\begin{aligned}
\left[\hat{a}_r(\mathbf{p}),\, \hat{a}_s^+(\mathbf{p}')\right] &= \delta_{rs}(2\pi)^3 2p^0 \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \\
\left[\hat{b}_r(\mathbf{p}),\, \hat{b}_s^+(\mathbf{p}')\right] &= \delta_{rs}(2\pi)^3 2p^0 \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')
\end{aligned}$$

und alle anderen Kommutatoren $= 0$ sind, finden wir *nichtverschwindende Kommutatoren für raumartige Abstände*: z.B.

$$\left[\psi(\mathbf{x},t),\, \bar{\psi}(\mathbf{y},t)\right] \neq 0 \quad \text{für } \mathbf{x} \neq \mathbf{y} \qquad\qquad (+)$$

im Widerspruch zur Mikrokausalität.
Man könnte argumentieren, daß der Dirac-Spinor sowieso nicht direkt beobachtbar ist. Aber aus (+) folgt auch eine Verletzung der Mikrokausalität für die bilinearen Ausdrücke im Dirac-Feldoperator, die wir mit beobachtbaren Feldern identifizieren wollen.
$\Rightarrow$ Elektronen können keine Bosonen sein (experimentell bestätigt, da sie dem Pauli-Prinzip genügen).

Die richtigen algebraischen Vertauschungsrelationen für die Erzeuger und Vernichter des Dirac-Feldes sind (JORDAN und WIGNER 1927, 1928) Antikommutatoren:

$$\begin{aligned}
\left\{\hat{a}_r(\mathbf{p}),\, \hat{a}_s^+(\mathbf{p}')\right\} &= \delta_{rs}(2\pi)^3 2p^0\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \\
\left\{\hat{b}_r(\mathbf{p}),\, \hat{b}_s^+(\mathbf{p}')\right\} &= \delta_{rs}(2\pi)^3 2p^0\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \\
\left\{\hat{a}_r^+(\mathbf{p}),\, \hat{a}_s^+(\mathbf{p}')\right\} &= \left\{\hat{a}_r(\mathbf{p}),\, \hat{a}_s(\mathbf{p}')\right\} \\
&= \left\{\hat{b}_r^+(\mathbf{p}),\, \hat{b}_s^+(\mathbf{p}')\right\} = \left\{\hat{b}_r(\mathbf{p}),\, \hat{b}_s(\mathbf{p}')\right\} \\
&= \left\{\hat{a}_r^+(\mathbf{p}),\, \hat{b}_s(\mathbf{p}')\right\} = \left\{\hat{a}_r^+(\mathbf{p}),\, \hat{b}_s^+(\mathbf{p}')\right\} \;=\; 0
\end{aligned}$$

Damit erhalten wir

$$\begin{aligned}
&\{\psi(\mathbf{x},t),\, \psi(\mathbf{y},t)\} = \left\{\bar{\psi}(\mathbf{x},t),\, \bar{\psi}(\mathbf{y},t)\right\} = 0 && (*) \\
&\left\{\psi(\mathbf{x},t),\, \bar{\psi}(\mathbf{y},t)\right\} = \gamma^0\delta(\mathbf{x}-\mathbf{y}) && (**)
\end{aligned}$$

Ad $(**)$:

$$\begin{aligned}
\left\{\psi(\mathbf{x},t),\, \bar{\psi}(\mathbf{y},t)\right\} &= \int \frac{d^3p\, d^3p'}{(2\pi)^6}\,\frac{1}{2p^0 2p^{0'}} \sum_{r,s} e^{ipx}e^{-ip'y}\, v_r(p)\bar{v}_s(p') \left\{\hat{b}_r^+(\mathbf{p}),\, \hat{b}_s(\mathbf{p}')\right\} \\
&\quad + \sum_{r,s} e^{ipx}e^{-ip'y}\, u_r(p)\bar{u}_s(p') \left\{\hat{a}_r(\mathbf{p}),\, \hat{a}_s^+(\mathbf{p}')\right\} \\
&= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\,\frac{1}{2p^0}\Big(e^{-i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})} \underbrace{\sum_s v_s(\mathbf{p})\bar{v}_s(\mathbf{p})}_{=p^0\gamma^0-\mathbf{p}\boldsymbol{\gamma}-m} + e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})} \underbrace{\sum_s u_s(\mathbf{p})\bar{u}_s(\mathbf{p})}_{=p^0\gamma^0-\mathbf{p}\boldsymbol{\gamma}+m}\Big) \\
&= \gamma_0 \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\, e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})} \\
&= \gamma_0\, \delta^3(\mathbf{x}-\mathbf{y})
\end{aligned}$$

Für beobachtbare Felder $A(x) = \bar{\psi}(x)u\psi(x),\ u = \bar{u}$ 4×4 - Matrix ergeben sich damit Vertauschungsregeln, die mit der Mikrokausalität im Einklang sind. Z.B. für beliebige 4×4 - Matrizen u_1, u_2:

$$\left[\bar{\psi}(\mathbf{x},t)u_1\psi(\mathbf{x},t)),\, \bar{\psi}(\mathbf{y},t)u_2\psi(\mathbf{y},t)\right] = 0 \quad \text{für } \mathbf{x}\neq\mathbf{y}$$

Folgt sofort aus $(*)$ und $(**)$ mit der Identität (für beliebige Operatoren $\hat{A},\hat{B},\hat{C},\hat{D}$).

$$\begin{aligned}
\left[\hat{A}\hat{B},\, \hat{C}\hat{D}\right] &= \hat{A}\left\{\hat{B},\, \hat{C}\right\}\hat{D} - \hat{A}\hat{C}\left\{\hat{B},\, \hat{D}\right\} \\
&\quad -\hat{C}\left\{\hat{A},\, \hat{D}\right\}\hat{B} + \left\{\hat{C},\, \hat{A}\right\}\hat{D}\hat{B} \qquad \text{(Übung)}
\end{aligned}$$

Ein-Elektron (Positron)-Zustände mit scharfem Impuls:

$$\begin{aligned}
\left|\mathrm{e}^-(\mathbf{p},s)\right\rangle &= \hat{a}_s^+(\mathbf{p})\,|\,0\,\rangle \\
\left|\mathrm{e}^+(\mathbf{p},s)\right\rangle &= \hat{b}_s^+(\mathbf{p})\,|\,0\,\rangle
\end{aligned}$$

Normierung:

$$\left\langle \mathrm{e}^-(\mathbf{p},s)\middle|\mathrm{e}^-(\mathbf{p},s)\right\rangle = \langle\, 0\,|\,\{\hat{a}_r(\mathbf{p}'),\,\hat{a}_s^+(\mathbf{p})\}\,|\,0\,\rangle = \delta_{rs}(2\pi)^3 2p^0\delta^3(\mathbf{p}'-\mathbf{p})$$
$$\left\langle \mathrm{e}^+(\mathbf{p},s)\middle|\mathrm{e}^+(\mathbf{p},s)\right\rangle = \langle\, 0\,|\,\left\{\hat{b}_r(\mathbf{p}'),\,\hat{b}_s^+(\mathbf{p})\right\}\,|\,0\,\rangle = \delta_{rs}(2\pi)^3 2p^0\delta^3(\mathbf{p}'-\mathbf{p})$$

Zwei-Elektronen-Zustand:

$$\begin{aligned}\left|\mathrm{e}^-(\mathbf{p}_1,s),\,\mathrm{e}^-(\mathbf{p}_2,s)\right\rangle &= \hat{a}_r^+(\mathbf{p}_1)\hat{a}_s^+(\mathbf{p}_2)\,|\,0\,\rangle \\ &= -\hat{a}_s^+(\mathbf{p}_2)\hat{a}_r^+(\mathbf{p}_1)\,|\,0\,\rangle = -\left|\mathrm{e}^-(\mathbf{p}_2,s),\,\mathrm{e}^-(\mathbf{p}_1,s)\right\rangle\end{aligned}$$

6.4 Herleitung der Dirac-Gleichung durch Transformationsverhalten von Spinoren

Drehung im R^3: $\mathbf{r}' = \mathcal{R}\mathbf{r}$ mit $\mathcal{R}\mathcal{T}\mathcal{R} = 1$, d.h. $\mathcal{R} \in \mathrm{O}(3)$

Beispiel:
Drehungen um x, y, z-Achse:

$$\mathcal{R}_z(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$
$$\mathcal{R}_x(\phi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\phi & \sin\phi \\ 0 & -\sin\phi & \cos\phi \end{pmatrix}$$
$$\mathcal{R}_y(\psi) = \begin{pmatrix} \cos\psi & 0 & -\sin\psi \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\psi & 0 & \cos\psi \end{pmatrix}$$

O(3) ist **nicht-abelsche-Gruppe**, d.h. Elemente kommutieren i.a. nicht
O(3) ist eine **Lie-Gruppe**, d.h. eine kontinuierliche Gruppe mit einer nicht-endlichen Anzahl von Elementen

Allgemeine Drehung hat drei Parameter, z.B. Euler-Winkel.
$\Rightarrow$ Es existieren drei **Generatoren**

$$J_z = \frac{1}{i}\frac{d\mathcal{R}_z(\theta)}{d\theta}\,|_{\theta=0} = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
$$J_x = \frac{1}{i}\frac{d\mathcal{R}_x(\phi)}{d\phi}\,|_{\phi=0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$
$$J_y = \frac{1}{i}\frac{d\mathcal{R}_y(\psi)}{d\psi}\,|_{\psi=0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(sind hermitesch).

Infinitesimale Rotationen: z.B. $\mathcal{R}_z(\delta\theta) \approx 1 + iJ_z\delta\theta,\ \mathcal{R}_x(\delta\phi) \approx 1 + iJ_x\delta\phi$
So ist z.B. der Kommutator:

$$\begin{aligned} & \mathcal{R}_z(\delta\theta)\mathcal{R}_x(\delta\phi)\mathcal{R}_z^{-1}(\delta\theta)\mathcal{R}_x^{-1}(\delta\phi) \\ = \ & 1 - \left(\delta\theta^2 + \delta\phi^2\right) - 2\underbrace{[J_z,\, J_x]}_{iJ_y}\delta\theta\,\delta\phi + \mathcal{O}(\delta^3) \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ **J** Drehimpuls-Operator, d.h. $\boxed{[J_x,\, J_y] = iJ_z}$ und zyklisch.

Rotationen um endlichen Winkel:
z.B. $\theta = N \cdot \delta\theta\ (N \to \infty),\ \delta\theta = \theta/N$

$$\begin{aligned} \rightsquigarrow \quad \mathcal{R}_z(\theta) &= [\mathcal{R}_z(\delta\theta)]^N \\ &= (1 + iJ_z\delta\theta)^N \\ &= \left(1 + iJ_z\frac{\theta}{N}\right)^N \underset{N\to\infty}{\to} \exp(iJ_z\theta) \end{aligned}$$

Allgemein: Rotation um Achse **n**, Winkel θ:

$$\boxed{\mathcal{R}_{\mathbf{n}}(\theta) = \exp(i\mathbf{J}\cdot\boldsymbol{\theta}) = \exp(i\mathbf{J}\cdot\mathbf{n}\theta)}$$

Betrachte nun **SU(2)**: (2×2 unitäre Matrizen mit Determinante 1, $\mathcal{U}\mathcal{U}^+ = 1,\ \det\mathcal{U} = 1$)
Jedes Element aus SU(2) läßt sich schreiben als

$$\boxed{\mathcal{U} = \exp\left(i\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\theta}}{2}\right), \quad \boldsymbol{\theta} = (\theta_x, \theta_y, \theta_z) = |\theta|\cdot\mathbf{n}} \qquad (*)$$

mit

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

die Pauli-Spin-Matrizen.
$\mathbf{J} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\theta}$ ist Drehimpulsoperator ($\hbar = 1$)

$$\boxed{\left[\frac{\sigma_x}{2}, \frac{\sigma_y}{2}\right] = i\frac{\sigma_z}{2} \quad \text{und zyklisch}}$$

m.a.W.: SU(2)ist 2-dimensionale Darstellung der Drehgruppe und wirkt im Raum der Zweier- (oder Pauli-) Spinoren $\begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix}$.
SU(2) und O(3) haben ähnliche Struktur, allerdings entsprechen wegen des Faktors 1/2 im Exponenten von $(*)$ jeweils 2 Elemente aus SU(2) einem Element aus O(3).

6.4.1 SL(2,C)und die Lorentzgruppe

SL(2,C)= $\{\mathcal{U} \mid \mathcal{U}$: Komplexe 2×2 - Matrix mit $\det \mathcal{U} = 1\}$
Analog der Korrespondenz zwischen SU(2) und der Rotationsgruppe gibt es eine Korrespondenz zwischen SL(2,C) und der Lorentzgruppe.

Reine Lorentz-Boosts: z.B. Bewegung mit v entlang der x-Achse:

$$x' = \frac{x + vt}{\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{1/2}},\ y' = y,\ z' = z,\ t' = \frac{t + vt}{\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{1/2}}$$

Definition:

$$\gamma = \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2},\ \beta = \frac{v}{c},\ x^0 = ct,\ x^1 = x \quad \text{etc.}$$

$$\rightsquigarrow \quad x^{0\prime} = \gamma(x^0 + \beta x^1),\ x^{1\prime} = \gamma(\beta x^0 + x^1),\ x^{2\prime} = x^2,\ x^{3\prime} = x^3$$

wegen $\gamma^2 - \beta^2\gamma = 1$ können wir setzen

$$\boxed{\gamma = \cosh\phi,\ \gamma\beta = \sinh\phi,\ \tanh\phi = \frac{v}{c}}$$

$$\Longrightarrow \quad \begin{pmatrix} x^{0\prime} \\ x^{1\prime} \\ x^{2\prime} \\ x^{3\prime} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \cosh\phi & \sinh\phi & 0 & 0 \\ \sinh\phi & \cosh\phi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{=: \mathcal{B},\ \textbf{Boost-Matrix}} \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix}$$

Generator dieser Boost-Trafo ist

$$K_x = \frac{1}{i}\frac{\partial \mathcal{B}}{\partial \phi}\,|_{\phi=0} = -i \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Analog:

$$K_y = -i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad K_z = -i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

In dieser 4×4 - Matrix-Notation sind die Generatoren der Rotationen:

$$J_x = -i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = -i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_z = -i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Allgemeine Lorentz-Transformation: Zusammengesetzt aus Boost in 3 Richtungen und um 3 Achsen. 6 Generatoren, s.o.

Kommutatorrelation:
$[K_x,\, K_y] = -iJ_z$ und zyklisch
$[J_x,\, K_x] = 0$ etc.
$[J_x,\, J_y] = iJ_z$ (zyklisch) und $[J_x,\, K_y] = iK_z$ (zyklisch)

n.b.: Reine Lorentz-Transformationen bilden keine Gruppe, da $\mathbf{K}$ keine geschlossene Algebra unter Kommutation bilden. Z.B. für 2 infinetesimale Boosts:

$$e^{iK_x\delta\phi}e^{iK_y\delta\psi}e^{-iK_x\delta\phi}e^{-iK_y\delta\psi} = 1 - [K_x,\, K_y]\delta\phi\,\delta\psi + K_x^2(\delta\phi)^2K_y^2(\delta\psi)^2 + \cdots$$

enthält wg. $[K_x,\, K_y] = -iJ_z$ eine Rotation um z-Achse ($\rightsquigarrow$ Thomas-Präzession).

6.4.2 Transformationsverhalten von Pauli-Spinoren unter Lorentz-Transformationen

Bemerkung:
$\mathbf{K} = \pm i\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}$ erfüllt obige Kommutationsrelationen $\rightsquigarrow$ 2 Typen von Spinoren zu + bzw. -

Definition: die Generatoren

$$\left.\begin{array}{rcl}\mathbf{A} &:=& \frac{1}{2}(\mathbf{J} + i\mathbf{K}) \\ \mathbf{B} &:=& \frac{1}{2}(\mathbf{J} - i\mathbf{K})\end{array}\right\} \quad\Longrightarrow\quad \begin{array}{rcll}[A_x,\, A_y] &=& iA_z & \text{zykl.} \\ [B_x,\, B_y] &=& iB_z & \text{zykl.} \\ [A_i,\, B_j] &=& 0 & (i,j = x,y,z)\end{array}$$

$\rightsquigarrow$ $\mathbf{A}$ und $\mathbf{B}$ generieren jeder eine Gruppe SU(2), und beide Gruppen kommutieren, d.h. Lorentzgruppe ist i.w. äquiv. SU(2) $\otimes$ SU(2) und Zustände, die in einer wohldefinierten Weise transformieren, werden mit 2 Drehimpulsen gekennzeichnet: $(j,\, j')$, j entspricht A, j' entspricht B.

Spez.:

$$\begin{array}{rcl}(j,\,0) &\rightarrow& \mathbf{J}^{(j)} = i\mathbf{K}^{(j)} \quad (\mathbf{B} = 0) \\ (0,\,j) &\rightarrow& \mathbf{J}^{(j)} = -i\mathbf{K}^{(j)} \quad (\mathbf{A} = 0)\end{array}$$

Definition: 2 Typen von Spinoren:

- Typ I: $(\frac{1}{2},\,0):\ \mathbf{J}^{(1/2)} = \boldsymbol{\sigma}/2,\ \mathbf{K}^{(1/2)} = -i\boldsymbol{\sigma}/2,$ Spinor ξ.
  Seien $(\boldsymbol{\theta},\,\boldsymbol{\phi})$ die Parameter einer Rotation und einer reinen Lorentz-Transformation. Dann transformiert ξ wie

$$\xi \;\rightarrow\; \exp\left(i\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}\cdot\boldsymbol{\theta} + \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}\cdot\boldsymbol{\phi}\right)\xi = \underbrace{\exp\left(i\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}\cdot(\boldsymbol{\theta} - i\boldsymbol{\phi})\right)}_{=:\mathcal{U}}\xi$$

- Typ II: $(0,\,\frac{1}{2}):\ \mathbf{J}^{(1/2)} = \boldsymbol{\sigma}/2,\ \mathbf{K}^{(1/2)} = i\boldsymbol{\sigma}/2,$ Spinor η.

$$\eta \;\rightarrow\; \underbrace{\exp\left(i\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}\cdot(\boldsymbol{\theta} + i\boldsymbol{\phi})\right)}_{=:\mathcal{N}}\eta$$

n.b.: Dies sind nicht-äquivalente Darstellungen der Lorentz-Gruppe, d.h. es existiert keine Matrix $\mathcal{S}$, so daß $\mathcal{N} = \mathcal{S}\mathcal{U}\mathcal{S}^{-1}$. Sie sind stattdessen durch $\mathcal{N} = \zeta\mathcal{U}^*\zeta^{-1}$ mit $\zeta = -i\sigma_2$ verknüpft.

Es ist $\det\mathcal{U} = \det\mathcal{N} = 1$

$\rightsquigarrow$ $\mathcal{U}, \mathcal{N}$ formen Gruppe SL(2,C). 6 Parameter: $\mathcal{U} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$, $ad - bc = 1$

Es gibt also zwei *verschiedene* Typen von 2-komponentigen Spinoren, die unterschiedlich unter Lorentz-Transformationen transformieren, ξ und η. Diese entsprechen den Darstellungen $(1/2, 0)$ und $(0, 1/2)$ der Lorentz-Gruppe.
Im Wesentlichen ist die **Dirac-Gleichung** eine Relation zwischen diesen Spinoren.

Paritäts-Operation: $\mathbf{r} \to \mathbf{r}'$

$\Rightarrow$ Geschwindigkeit im Lorentz-Boost $\mathbf{v} \to -\mathbf{v}$.

$\Rightarrow$ Generator $\mathbf{K} \to -\mathbf{K}$ ($\hat{=}$ Vektor), aber $\mathbf{J} \to +\mathbf{J}$ (Drehimpuls ist axialer oder Pseudo-Vektor).

$\Rightarrow$ Darstellungen $(j, 0)$ und $(0, j)$ werden unter Parität ausgetauscht $(j, 0) \to (o, j)$ und daher $\xi \to \eta$.

Betrachten wir also die Parität, so genügt es nicht länger ξ und η separat zu betrachten, sondern den **4-Spinor**

$$\psi = \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix}$$

Unter Lorentz-Trafos:

$$\begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \exp\left(\frac{i}{2}\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{\theta} - i\boldsymbol{\phi})\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(\frac{i}{2}\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{\theta} + i\boldsymbol{\phi})\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D(\Lambda) & 0 \\ 0 & \bar{D}(\Lambda) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix}$$

mit $\bar{D}(\Lambda) = \zeta D^*(\Lambda)\zeta^{-1}$ und Λ die Lorentz-Transformation: $x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu$.

Unter Paritäts-Trafo:

$$\begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix}$$

4-Spinor ψ ist eine **irreduzible** Darstellung der Lorentz-Gruppe *erweitert* um Parität (ist *nicht* unitär wg. $\exp(\boldsymbol{\theta} \cdot \boldsymbol{\phi}) \leftrightarrow$ L-Gruppe nicht kompakt).

Betrachte nun speziell L-Boost ($\theta = 0$) und definiere $\xi = \phi_{\mathrm{R}}$, $\eta = \phi_{\mathrm{L}}$ (R: right, L: left)

$\rightsquigarrow$ $\phi_{\mathrm{R}} \to e^{\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\phi}}\phi_{\mathrm{R}}$

$$= \left\{\cosh\left(\frac{\phi}{2}\right) + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \sinh\left(\frac{\phi}{2}\right)\right\}\phi_{\mathrm{R}} \qquad (\mathbf{n} : \text{Richtung des L-Boosts})$$

Sei $\phi_{\mathrm{R}}(0)$ Spinor für Teilchen in Ruhe, $\phi_{\mathrm{R}}(\mathbf{p})$ Spinor für Teilchen mit Impuls $\mathbf{p}$.
Wg. $\cos(\phi/2) = [(r+1)/2]^{1/2}$, $\sinh(\phi/2) = [(r-1)/2]^{1/2}$, $r = \frac{1}{\sqrt{1-v^2}}$, $c = 1$, folgt

$$\phi_{\mathrm{R}}(\mathbf{p}) = \left\{ \left(\frac{r+1}{2} \right)^{1/2} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \left(\frac{r-1}{2} \right)^{1/2} \right\} \phi_{\mathrm{R}}(0)$$

Da für ein Teilchen mit (totaler) Energie E, Masse m und Impuls $\mathbf{p}$: $E = \gamma m$ $(c = 1)$ folgt

$$\phi_{\mathrm{R}}(\mathbf{p}) = \frac{E + m + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{[2m\,(E+m)]^{1/2}}\, \phi_{\mathrm{R}}(0)$$

analog

$$\phi_{\mathrm{L}}(\mathbf{p}) = \frac{E + m - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{[2m\,(E+m)]^{1/2}}\, \phi_{\mathrm{L}}(0) \quad \Rightarrow \quad \phi_{\mathrm{L}}(0) = \frac{E + m + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{[2m\,(E+m)]^{1/2}}\, \phi_{\mathrm{L}}(\mathbf{p})$$

Für ein Teilchen in Ruhe kann man seinen Spin nicht als links- oder rechtshändig definieren $\rightsquigarrow$ $\phi_{\mathrm{R}}(0) = \phi_{\mathrm{L}}(0)$.

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad \phi_{\mathrm{R}}(\mathbf{p}) &= \frac{E + m + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{[2m\,(E+m)]^{1/2}} \cdot \frac{E + m + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{[2m\,(E+m)]^{1/2}}\, \phi_{\mathrm{R}}(\mathbf{p}) \\ &= \frac{(E+m)^2 + 2\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}(E+m) + p^2}{2m(E+m)}\, \phi_{\mathrm{L}}(\mathbf{p}) \\ &= \frac{E + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{m}\, \phi_{\mathrm{L}}(\mathbf{p}) \end{aligned}$$

bzw.

$$\phi_{\mathrm{L}}(\mathbf{p}) = \frac{E - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{m}\, \phi_{\mathrm{L}}(\mathbf{p})$$

Also in Matrix-Form:

$$\begin{pmatrix} -m & p_0 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ p_0 - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{\mathrm{R}}(\mathbf{p}) \\ \phi_{\mathrm{L}}(\mathbf{p}) \end{pmatrix} = 0 \qquad (*)$$

Definition:
Der 4-Spinor

$$\psi(p) := \begin{pmatrix} \phi_{\mathrm{R}}(\mathbf{p}) \\ \phi_{\mathrm{L}}(\mathbf{p}) \end{pmatrix}$$

und die 4×4-Matrizen

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix}$$

dann ist $(*)$:

$$\left(\gamma^0 p_0 + \gamma^i p_i - m\right) \psi(p) = 0$$

bzw.

$$(\gamma^\mu p_\mu - m)\,\psi(p) = 0$$

die **Dirac-Gleichung**

n.b. ψ und γ^μ sind hier in der sog. **chiralen** Darstellung gegeben (da $\phi_{\rm R}$ und $\phi_{\rm L}$ Eigenzustände des Chiralitätsoperators sind, wie wir sehen werden), die **Standard**-Darstellung, die wir schon kennengelernt haben, ergibt sich durch die Ähnlichkeitstrafo:

$$\psi_{\rm SR} = \mathcal{S}\psi_{\rm CR};\quad \gamma^\mu = \mathcal{S}\gamma^\mu_{\rm CR}\mathcal{S}^{-1} \text{ mit } \mathcal{S} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \mathcal{S}^{-1}$$

$$\psi_{\rm SR} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \phi_{\rm R} + \phi_{\rm L} \\ \phi_{\rm R} - \phi_{\rm L} \end{pmatrix}$$

$$\gamma^0_{\rm SR} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix};\quad \gamma^i_{\rm SR} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}$$

Für *Teilchen in Ruhe* ist dies sicher die geschicktere Darstellung:

$$\begin{aligned} \psi_{\rm SR} &= u(0)e^{-imt} \qquad \text{positive Energie} \\ \psi_{\rm SR} &= v(0)e^{imt} \qquad \text{negative Energie} \end{aligned}$$

mit den uns schon bekannten 4-Spinoren:

$$u^{(1)}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},\ u^{(2)}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix};\quad v^{(1)}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},\ v^{(2)}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Lorentz-Boost in bewegtes Ko-System ($\boldsymbol{\theta} = 0$) in chiraler Darstellung.

$$\begin{pmatrix} \phi_{\rm R} \\ \phi_{\rm L} \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \phi'_{\rm R} \\ \phi'_{\rm L} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} e^{\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\phi}} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\phi}} \end{pmatrix}}_{u_{\rm CR}} \begin{pmatrix} \phi_{\rm R} \\ \phi_{\rm L} \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow$ Boost-Matrix in Standarddarstellung

$$u_{\rm SR} = \mathcal{S}u_{\rm CR}\mathcal{S}^{-1} = \begin{pmatrix} \cosh\frac{\phi}{2} & \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n}\sinh\frac{\phi}{2} \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n}\sinh\frac{\phi}{2} & \cosh\frac{\phi}{2} \end{pmatrix}$$

und wegen

$$\cos\frac{\phi}{2} = \left(\frac{E+m}{2m}\right)^{1/2},\quad \sin\frac{\phi}{2} = \left(\frac{E-m}{2m}\right)^{1/2},\quad \tanh\frac{\phi}{2} = \frac{p}{E+m} \quad \text{mit } p = \sqrt{E^2 - m^2}$$

folgt

$$u_{\mathrm{SR}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{p_z}{E+m} & \frac{p_x - ip_y}{E+m} \\ 0 & 1 & \frac{p_x + ip_y}{E+m} & \frac{-p_z}{E+m} \\ \frac{p_z}{E+m} & \frac{p_x - ip_y}{E+m} & 1 & 0 \\ \frac{p_x + ip_y}{E+m} & \frac{-p_z}{E+m} & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

und die entsprechenden Spinoren ψ (identisch mit denen, die wir aus der expliziten Lösung der Dirac-Gleichung gewonnen haben):

$$\begin{array}{rll} \psi^{(\alpha)}(x) = u^{(\alpha)}(p) e^{-ipx}; & \alpha = 1,2 & u^{(\alpha)}(p) = u_{\mathrm{SR}}(p) u^{(\alpha)}(0) \\ \psi^{(\alpha)}(x) = v^{(\alpha)}(p) e^{ipx} & & v^{(\alpha)}(p) = u_{\mathrm{SR}}(p) v^{(\alpha)}(0) \end{array}$$

$$u^{(1)} = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p_z}{E+m} \\ \frac{p_+}{E+m} \end{pmatrix}, \quad u^{(2)} = N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{p_-}{E+m} \\ \frac{-p_z}{E+m} \end{pmatrix}, \quad v^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{p_z}{E+m} \\ \frac{p_+}{E+m} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad v^{(2)} = \begin{pmatrix} \frac{p_-}{E+m} \\ \frac{-p_z}{E+m} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

wobei $p_\pm = p_x \pm i p_z$ und die Normierung $N = \sqrt{\frac{E+m}{2m}}$, so daß $\bar{u}^{(1)} u^{(1)} = 1$, ebenso für $u^{(2)}$.

Es gilt:

$$\begin{aligned} \bar{u}^{(\alpha)}(p)\, u^{(\alpha')}(p) &= \delta_{\alpha\alpha'} \\ \bar{v}^{(\alpha)}(p)\, v^{(\alpha')}(p) &= -\delta_{\alpha\alpha'} \\ \bar{u}^{(\alpha)}(p)\, v^{(\alpha')}(p) &= 0 \\ u^{(\alpha)+}(p) u^{(\alpha')}(p) &= v^{(\alpha)+}(p) v^{(\alpha')}(p) = \frac{E}{m} \delta_{\alpha\alpha'} \end{aligned}$$

Außerdem genügen u und v (Einsetzen in Dirac-Gleichung)

$$\begin{aligned} (\gamma \cdot p - m) u(p) &= 0 \\ (\gamma \cdot p + m) v(p) &= 0 \end{aligned}$$

Die adjungierten Spinoren genügen

$$\begin{aligned} \bar{u}(p)(\gamma \cdot p - m) &= 0 \\ \bar{v}(p)(\gamma \cdot p + m) &= 0 \end{aligned}$$

Der Operator

$$P_+ := \sum_\alpha u^{(\alpha)}(p) \bar{u}^{(\alpha)}(p)$$

ist Projektionsoperator wg.

$$P_+^2 = \sum_{\alpha,\beta} u^{(\alpha)}(p) \underbrace{\bar{u}^{(\alpha)}(p) u^{(\beta)}(p)}_{=\delta^{\alpha\beta}} \bar{u}^{(\beta)}(p) = \sum_{\alpha} u^{(\alpha)}(p)\bar{u}^{(\alpha)}(p) = P_+$$

und projiziert auf Zustände mit positiver Energie.

Wir zeigen in der Übung: $P_+ = \frac{\gamma\cdot p+m}{2m}$
Analog

$$\boxed{P_- := -\sum_{\alpha} v^{(\alpha)}(p)\bar{v}^{(\alpha)}(p)}$$

und $P_- = \frac{-\gamma\cdot p+m}{2m}$. Offenbar: $P_+ + P_- = 1$.

Bemerkung:
Bei der Quantisierung des Dirac-Feldes hatten wir die Lösungen

$$\psi(x) = u_s(p)e^{-ipx},\ \psi(x) = v_s(p)e^{ipx} \quad (s = \pm\frac{1}{2})$$

benutzt, mit

$$\frac{1}{\sqrt{2m}}u_{\frac{1}{2}} = u^{(1)},\ \frac{1}{\sqrt{2m}}u_{-\frac{1}{2}} = u^{(2)},\ \frac{1}{\sqrt{2m}}v_{\frac{1}{2}} = -v^{(1)},\ \frac{1}{\sqrt{2m}}v_{-\frac{1}{2}} = v^{(2)}$$

Das hat zur Folge dass

$$P_+ = \sum_{\alpha} u^{(\alpha)}(p)\bar{u}^{(\alpha)}(p) = \gamma\cdot p + m$$

und

$$P_- = -\sum_{\alpha} v^{(\alpha)}(p)\bar{v}^{(\alpha)}(p) = \gamma\cdot p - m.$$

Wir werde in der QED diese Notation beibehalten.

6.4.3 Lorentz-Kovarianz der Dirac-Gleichung

Bei einer Lorentz-Transformation von einem Inertialsystem I in ein Inertialsystem I' transformieren sich die Koordinaten gemäß

$$x' = \Lambda x \quad \text{d.h. } x = \Lambda x'$$

und der Dirac-Spinor gemäß

$$\psi'(x') = \mathcal{S}(\Lambda)\psi(\Lambda^{-1}x')$$

$\mathcal{S}(\Lambda) = \begin{pmatrix} D(\Lambda) & 0 \\ 0 & \bar{D}(\Lambda) \end{pmatrix}$ in der chiralen Darstellung.

Die Dirac-Gleichung sollte *forminvariant* unter dieser Lorentz-Transformation sein:

$$(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\,\psi(x) = 0 \quad (I) \quad \Longleftrightarrow \quad \left(i\gamma^\mu\partial'_\mu - m\right)\psi'(x') = 0 \quad (I')$$

Hier ist $\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\mu}\frac{\partial}{\partial x'^\nu} = \Lambda^\nu{}_\mu \frac{\partial}{\partial x'^\nu} = \Lambda^\nu{}_\mu \partial'_\nu$
Wg. $\mathcal{S}^{-1}\psi'(x') = \psi(x)$ folgt aus (I)

$$\left(i\gamma^\mu \Lambda^\nu{}_\mu \partial'_\mu - m\right)\mathcal{S}^{-1}(\Lambda)\psi'(x') = 0$$

Durch Multiplikation von links mit $\mathcal{S}(\Lambda)$ erhält man

$$\left(i\mathcal{S}(\Lambda)\gamma^\mu\mathcal{S}^{-1}(\Lambda)\Lambda^\nu{}_\mu\partial'_\nu - m\right)\psi' = 0$$

Wenn also $\mathcal{S}(\Lambda)\gamma^\mu\mathcal{S}^{-1}(\Lambda) = (\Lambda^{-1})^\mu_\tau\gamma^\tau$
folgt aus $\mathcal{S}(\Lambda)\gamma^\mu\mathcal{S}^{-1}(\Lambda)\Lambda^\nu{}_\mu = (\Lambda^{-1})^\mu_\tau\Lambda^\nu{}_\mu\gamma^\tau = \gamma^\nu$ und damit (I').

Bleibt also zu zeigen $\forall\Lambda$ LT:

$$\mathcal{S}^{-1}(\Lambda)\gamma^\mu\mathcal{S}(\Lambda) = \Lambda^\mu_\nu\gamma^\nu$$

(Beachte $\mathcal{S}^{-1}(\Lambda) = \mathcal{S}(\Lambda^{-1})$)
Erinnerung:

$$\mathcal{S}(\Lambda) = \begin{pmatrix} \exp\left(\frac{i}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{\theta} - i\boldsymbol{\phi})\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(\frac{i}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{\theta} + i\boldsymbol{\phi})\right) \end{pmatrix}$$

Da jede Lorentz-Transformation aus den 3 Lorentz-Boosts entlang der Achsen x, y, z und 3 Rotationen um die 3 Achsen zusammengesetzt werden kann, betrachten wir diese Fälle separat.

(A) Λ Lorentz-Boost, d.h. $\boldsymbol{\theta} = 0$. O.B.d.A $\boldsymbol{\phi} = (\phi, 0, 0)$ (Boost entlang der x-Achse)

$$\rightsquigarrow \qquad \mathcal{S}(\Lambda) = \begin{pmatrix} e^{+\frac{1}{2}\phi\sigma^x} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{1}{2}\phi\sigma^x} \end{pmatrix}$$

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \cosh\phi & \sinh\phi & 0 & 0 \\ \sinh\phi & \cosh\phi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Nun ist

$$\begin{aligned} \mathcal{S}^{-1}\gamma^0\mathcal{S} = \mathcal{S}^{-1}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\mathcal{S} &= \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}\phi\sigma^x} & 0 \\ 0 & e^{+\frac{1}{2}\phi\sigma^x} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^{+\frac{1}{2}\phi\sigma^x} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{1}{2}\phi\sigma^x} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & e^{-\phi\sigma^x} \\ e^{\phi\sigma^x} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \cosh\phi - \sigma^x\sinh\phi \\ \cosh\phi + \sigma^x\sinh\phi & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\mathcal{S}^{-1}\gamma^1\mathcal{S} = \mathcal{S}^{-1}\begin{pmatrix} 0 & -\sigma^x \\ \sigma^x & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma^x e^{\phi\sigma^x} \\ \sigma^x e^{\phi\sigma^x} & 0 \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} 0 & -\sigma^x\left(\cosh\phi - \sigma^x \sinh\phi\right) \\ \sigma^x\left(\cosh\phi + \sigma^x\sinh\phi\right) & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{S}^{-1}\gamma^{2,3}\mathcal{S} = \mathcal{S}^{-1}\begin{pmatrix} 0 & -\sigma^{y,z} \\ \sigma^{y,z} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -e^{-\frac{1}{2}\phi\sigma^x}\sigma^{y,z}e^{-\frac{1}{2}\phi\sigma^x} \\ e^{\frac{1}{2}\phi\sigma^x}\sigma^{y,z}e^{\frac{1}{2}\phi\sigma^x} & 0 \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} 0 & -\sigma^{y,z} \\ \sigma^{y,z} & 0 \end{pmatrix} = \gamma^{2,3}$$

und

$$\Lambda^0{}_\nu\gamma^\nu = \cosh\phi\gamma^0 + \sinh\phi\gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & \cosh\phi - \sigma^x\sinh\phi \\ \cosh\phi + \sigma^x\sinh\phi & 0 \end{pmatrix}$$
$$\Lambda^1{}_\nu\gamma^\nu = \sinh\phi\gamma^0 + \cosh\phi\gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & \sinh\phi - \sigma^x\cosh\phi \\ \sinh\phi + \sigma^x\cosh\phi & 0 \end{pmatrix}$$
$$\Lambda^{2,3}_\nu\gamma^\nu = \gamma^{2,3}$$

Durch Vergleich von links mit rechts sieht man die Identität.

(B) Λ Drehung, d.h. $\boldsymbol{\phi} = 0$, o.B.d.A. $\boldsymbol{\theta} = (\theta, 0, 0)$ geht analog zu (A) mit

$$\mathcal{S}(\Lambda) = \begin{pmatrix} e^{\frac{1}{2}\theta\sigma^x} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i}{2}\theta\sigma^x} \end{pmatrix}$$

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\theta & \sin\theta \\ 0 & 0 & -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

6.4.4 Transformationsverhalten bilinearer Ausdrücke wie $\bar\psi\psi$, $\bar\psi\gamma^\mu\psi$ etc.

Wir benutzen wieder die chirale Darstellung

$$\psi = \begin{pmatrix} \phi_{\mathrm{R}} \\ \phi_{\mathrm{L}} \end{pmatrix}$$

Erinnerung: Unter Lorentz-Transformation:

$$\phi_{\mathrm{R}} \to \exp\left[\frac{i}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{\theta} - i\boldsymbol{\phi})\right]\phi_{\mathrm{R}}; \qquad \phi_{\mathrm{L}} \to \exp\left[\frac{i}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{\theta} + i\boldsymbol{\phi})\right]\phi_{\mathrm{L}}$$

$$\rightsquigarrow \qquad \phi^+_{\mathrm{R}} \to \phi^+_{\mathrm{R}}\exp\left[-\frac{i}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{\theta} + i\boldsymbol{\phi})\right]; \qquad \phi^+_{\mathrm{L}} \to \phi^+_{\mathrm{L}}\exp\left[-\frac{i}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{\theta} - i\boldsymbol{\phi})\right]$$

Es ist sofort klar, daß $\psi^+\psi = \phi^+_{\mathrm{R}}\phi_{\mathrm{R}} + \phi^+_{\mathrm{L}}\phi_{\mathrm{L}}$ *nicht* invariant ist. Jedoch der **adjungierte** Spinor hat die Komponenten

$$\bar\psi = \psi^+\gamma^0 = \begin{pmatrix} \phi^+_{\mathrm{R}} & \phi^+_{\mathrm{L}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi^+_{\mathrm{L}} & \phi^+_{\mathrm{R}} \end{pmatrix}$$

und damit ist

$$\boxed{\bar{\psi}\,\psi = \phi_{\mathrm{L}}^{+}\phi_{\mathrm{R}} + \phi_{\mathrm{R}}^{+}\phi_{\mathrm{L}}}$$

invariant unter Lorentz-Transformation (d.h. ist "**skalar**")

Außerdem ist unter Paritäts-Transformation $\phi_{\mathrm{R}} \leftrightarrow \phi_{\mathrm{L}}$, so daß $\bar{\psi}\,\psi \to \bar{\psi}\,\psi$, d.h. $\bar{\psi}\,\psi$ ist echter Skalar, da er bei Raumspiegelung nicht das Vorzeichen wechselt.

Wir definieren nun die 4×4- Matrix

$$\boxed{\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \underset{\text{(in chiraler Darst.)}}{=} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}$$

Dann ist

$$\bar{\psi}\gamma^5\psi = \begin{pmatrix} \phi_{\mathrm{R}}^{+} & \phi_{\mathrm{L}}^{+} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{\mathrm{R}} \\ \phi_{\mathrm{L}} \end{pmatrix} = \phi_{\mathrm{L}}^{+}\phi_{\mathrm{R}} - \phi_{\mathrm{R}}^{+}\phi_{\mathrm{L}}$$

invariant unter Lorentz-Transformationen, wechselt aber bei Paritäts-Transformation das Vorzeichen $\rightsquigarrow$ $\boxed{\bar{\psi}\gamma^5\psi \text{ ist } \textbf{Pseudoskalar}}$

Betrachte nun die Größe $\boxed{\bar{\psi}\gamma^\mu\psi}$, wir zeigen, daß sie wie ein 4-Vektor unter Lorentz-Transformationen transformiert.

$$\begin{aligned} \bar{\psi}\gamma^0\psi &= \phi_{\mathrm{R}}^{+}\phi_{\mathrm{R}} + \phi_{\mathrm{L}}^{+}\phi_{\mathrm{L}} \\ \bar{\psi}\,\gamma\,\psi &= \begin{pmatrix} \phi_{\mathrm{R}}^{+} & \phi_{\mathrm{L}}^{+} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -\boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{\mathrm{R}} \\ \phi_{\mathrm{L}} \end{pmatrix} = -\phi_{\mathrm{L}}^{+}\boldsymbol{\sigma}\phi_{\mathrm{L}} + \phi_{\mathrm{R}}^{+}\boldsymbol{\sigma}\phi_{\mathrm{R}} \end{aligned}$$

Unter räumlichen Drehungen ($\boldsymbol{\theta} \neq 0,\ \boldsymbol{\phi} = 0$) haben wir

$$\bar{\psi}\gamma^0\psi \to \bar{\psi}\gamma^0\psi \qquad (**)$$

und für $\boldsymbol{\theta}$ infinitesimal

$$\begin{aligned} \bar{\psi}\gamma\psi \;\to\; & -\phi_{\mathrm{L}}^{+} e^{-\frac{i}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\theta}}\boldsymbol{\sigma}e^{\frac{i}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\theta}} + \phi_{\mathrm{R}}^{+} e^{-\frac{i}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\theta}}\boldsymbol{\sigma}e^{\frac{i}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\theta}} \\ = & -\phi_{\mathrm{L}}^{+}\left(1 - \frac{i}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\theta}\right)\boldsymbol{\sigma}\left(1 + \frac{i}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\theta}\right)\phi_{\mathrm{L}} + \phi_{\mathrm{R}}^{+}\left(1 - \frac{i}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\theta}\right)\boldsymbol{\sigma}\left(1 + \frac{i}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\theta}\right)\phi_{\mathrm{R}} \\ = & -\phi_{\mathrm{L}}^{+}\left(\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\theta}\times\boldsymbol{\sigma}\right)\phi_{\mathrm{L}} + \phi_{\mathrm{R}}^{+}\left(\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\theta}\times\boldsymbol{\sigma}\right)\phi_{\mathrm{R}} \\ = & \bar{\psi}\,\gamma\,\psi - \boldsymbol{\theta}\times\left(\bar{\psi}\,\gamma\,\psi\right) \qquad (*) \end{aligned}$$

$(*)$ beschreibt das Verhalten eines Vektors unter Rotationen.

Da die Zeitkomponente wg. $(**)$ invariant unter Rotationen ist, verhält sich $\bar{\psi}\gamma^\mu\psi$ tatsächlich wie ein 4-Vektor unter Rotationen.

Übung: Überprüfe, daß $\bar{\psi}\gamma^\mu\psi$ sich wie ein 4-Vektor auch unter L-Boosts verhält.
Unter Parität: $\bar{\psi}\gamma^0\psi \to \bar{\psi}\gamma^0\psi,\ \bar{\psi}\gamma\psi \to -\bar{\psi}\gamma\psi$, d.h. $\bar{\psi}\gamma^\mu\psi$ **polarer** Vektor. i.e. $\bar{\psi}'(x')\gamma^\mu\psi'(x') = \Lambda^\mu_{\ \nu}\bar{\psi}(x)\gamma^\nu\psi(x)$.

Analog: $\bar{\psi}\gamma^\mu\gamma^5\psi$ verhält sich wie **axialer** Vektor, d.h. wie Vektor unter L-Trafos, aber unter Parität $\bar{\psi}\gamma\psi \to \bar{\psi}\gamma\psi$. i.e. $\bar{\psi}'(x')\gamma^\mu\gamma^5\psi'(x') = \Lambda^\mu_{\ \nu}\bar{\psi}\gamma^\nu\gamma^5\psi(x)\cdot\det(\Lambda)$

Zusammenfassend:

- $\bar{\psi}\psi$ Skalar
- $\bar{\psi}\gamma^5\psi$ Pseudoskalar
- $\bar{\psi}\gamma^\mu\psi$ Vektor (polar)
- $\bar{\psi}\gamma^\mu\gamma^5\psi$ axialer Vektor
- $\bar{\psi}(\gamma^\mu\gamma^\nu - \gamma^\nu\gamma^\mu)\psi$ antisymmetrischer Tensor

6.5 Nicht-relativistischer Grenzfall und das magnetische Moment des Elektrons

Teilchen mit Spin besitzen ein "inneres" magnetisches Moment. Eine Ladung e, die sich auf einer geschlossenen Kreisbahn bewegt, wechselwirkt mit einem magnetischen Feld und besitzt ein effektives magnetisches Moment

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{2m}\mathbf{L}$$

Wäre die Natur einfach, dann wäre die Proportionalitätskontrolle zwischen Elektronen-Spin $\mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar\sigma$ und seinem magnetischen Moment $e/2m$, so daß das innere magnetische Moment $(e/2m)\cdot|\mathbf{S}| = e\hbar/4m$ sein würde.

Der resultierende Shift in den Frequenzen der Spektrallinien wäre der des "normalen" Zeemann-Effekts. Experimente zeigen jedoch einen "anormalen" Zeemann-Effekt – die Proportionalitätskonstante ist *2 mal* die für die Kreisbahn-Bewegung, d.h. das magnetische Moment des Elektrons ist $-\boldsymbol{\mu}$ mit

$$\boldsymbol{\mu} = 2\frac{e}{2m}\mathbf{S} = \frac{e}{m}\mathbf{S} = \frac{e\hbar}{2m}\boldsymbol{\sigma}$$

Der Faktor 2 wird oft Landé-Faktor g genannt, $g_s = 2$. Dieser Faktor ergibt sich unmittelbar aus der Dirac-Gleichung. Um dies abzuleiten müssen wir die Gleichung für ein Elektron in Gegenwart eines elektromagnetischen Feldes betrachten.

Schema: "**minimale Ankopplung**" (Grund wird später bei Eichtheorien klar, ist aber in diesem Fall auch analog zur klassischen Mechanik)

$$p^\mu \to p^\mu - eA^\mu$$

mit $p^\mu = (E, \mathbf{p})$, $A^\mu = (\phi, \mathbf{A})$, $\mathbf{A}$ das Vektorpotential, ϕ das elektrische Potential, d.h.

$$E \to E - e\phi, \quad \mathbf{p} \to \mathbf{p} - e\mathbf{A}$$

Die Dirac-Gleichung lautet dann

$$\gamma^0(E - e\phi)\psi - \boldsymbol{\gamma}\cdot(\mathbf{p} - e\mathbf{A})\psi = m\psi$$

In Standard-Darstellung

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ -\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \psi = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

Also:

$$\begin{aligned} (E - e\phi) - \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) &= mu \qquad (*) \\ -(E - e\phi) + \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) &= mv \qquad (**) \end{aligned}$$

Die zweite Gleichung gibt: $v = (E+m-e\phi)^{-1}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{p}-e\mathbf{A})\,u$ (beachte, daß die Reihenfolge der Faktoren wichtig ist, da $\mathbf{p}$ und ϕ nicht kommutieren).

Im nicht-relativistischen Grenzfall ist $E+m-e\phi \approx 2m,\ p \approx mV$ (V : Geschwindigkeit)

$$\rightsquigarrow \quad v \approx \frac{1}{2m}\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) = \mathcal{O}(\frac{V}{c})u$$

d.h. die unteren 2 Komponenten von ψ sind viel kleiner als die oberen.

Dies in $(*)$ eingesetzt, ergibt mit $\pi := \mathbf{p} - e\mathbf{A}$

$$Eu = \frac{1}{2m}\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}\, u + mu + e\phi u$$

wobei $\pi = \mathbf{p} - e\mathbf{A}$, und wenn $E = m + W$, dann

$$Wu = \left(\frac{1}{2m}\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} + e\phi\right)\, u$$

Wegen $\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$ folgt $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B})$
also

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})^2 &= \boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\pi} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{\pi} \times \boldsymbol{\pi}) \\ &= (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + i\boldsymbol{\sigma} \underbrace{(\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \times (\mathbf{p} - e\mathbf{A})}_{-e(\mathbf{p}\times\mathbf{A}+\mathbf{A}\times\mathbf{p})=ei\hbar\nabla\times\mathbf{A}=i\hbar e\mathbf{B}} \end{aligned}$$

Identifizieren wir $Wu = Hu$, dann

$$\boxed{\mathcal{H} = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + e\phi - \frac{e\hbar}{2m}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}}$$

Pauli-Gleichung: $\mathcal{H}u = Eu$
$\Rightarrow\ g_s = 2$

Bemerkung: g_s liegt etwas über 2 $\rightsquigarrow$ QED.

Um zu **relativistischen Korrekturen zur Pauli-Gleichung** zu gelangen, betrachten wir noch einmal $(**)$ für den Fall $\mathbf{A} = 0$, d.h. $\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p}$

$$\begin{aligned} v &= (E + m - e\phi)^{-1}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}\, u \\ &= \left(\frac{\sigma \cdot \mathbf{p}}{2m} - \frac{1}{2m}(E - m - e\phi)\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{2m}\right)\, u \\ &\quad \left(\text{wg. } \tfrac{1}{E+m-e\phi} = \tfrac{1}{2m} - \tfrac{E-m-e\phi}{(2m)^2}\right) \end{aligned}$$

Eingesetzt in $(*)$

$$\begin{aligned} Eu &= (e\phi+m)u + \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}\left(\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}}{2m} - \frac{1}{2m}(E-m-e\phi)\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}}{2m}\right) u \\ &= \Big\{ \underbrace{\frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p})}{2m}}_{=p^2/2m} + e\phi + m - \frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p})}{2m}\,\frac{E-m-e\phi}{2m}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}\Big\} u \\ &=: \mathcal{H}_2 u \end{aligned}$$

Da v in führender Ordnung $v = \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}}{2m}\,u$ ist, ist der Dirac-Spinor $\psi = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ dann richtig auf 1 normiert, wenn wir für ihn statt u $\quad \bar{u} = (1+\frac{p^2}{8m})\,u$ wählen, denn

$$\begin{aligned} 1 = \int d^3r\,\bar{\psi}\psi = \int d^3r \begin{pmatrix} u^+ & v^+ \end{pmatrix}\gamma^0 \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} &= \int d^3r\,\left(u^+u - v^+v\right) \\ &= \int d^3r\,u^+\left(1-\Big(\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}}{2m}\Big)^2\right) u \end{aligned}$$

d.h. mit

$$\bar{u} = \left(1-\frac{p^2}{4m^2}\right)^{-1/2} u \approx \underbrace{\left(1+\frac{p^2}{8m^2}\right)}_{=:\Omega} u$$

ist $\psi = \begin{pmatrix} \bar{u} \\ v \end{pmatrix}$ richtig normiert.

Wir schreiben nun $\mathcal{H}_2 u = Eu$ auf $\bar{u}$ um:

$$u = \Omega^{-1}\bar{u} = \left(1+\frac{p^2}{8m^2}\right)^{-1} u \approx \left(1-\frac{p^2}{8m^2}\right)\bar{u}$$

Also $(E-m)\Omega^{-1}\bar{u} = (\mathcal{H}_2 - m)\Omega^{-1}\,\bar{u}$
bzw. $\Omega^{-2}E'\bar{u} = \Omega^{-1}(\mathcal{H}_2-m)\Omega^{-1}$ mit $E' := E-m$
d.h.

$$\begin{aligned} \left(1-\frac{p^2}{4m^2}\right)E'\bar{u} &= \left\{\left(1-\frac{p^2}{8m^2}\right)\left(\frac{p^2}{2m}+e\phi-\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}}{2m}\,\frac{E'-e\phi}{2m}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}\right)\left(1-\frac{p^2}{8m^2}\right)\right\}\bar{u} \\ &\approx \left\{\frac{p^2}{2m}+e\phi-\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}}{2m}\,\frac{E'-e\phi}{2m}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p} - \frac{p^2}{8m^2}\left(\frac{p^2}{2m}+e\phi\right) - \left(\frac{p^2}{2m}+e\phi\right)\frac{p^2}{8m^2}\right\}\bar{u} \end{aligned}$$

$$\Longrightarrow E'\bar{u} = \left\{\frac{p^2}{2m}+e\phi-\frac{p^4}{8m^3}+\underbrace{\frac{p^2}{4m^2}E' - \frac{p^2}{8m^2}e\phi - e\phi\frac{p^2}{8m^2}}_{=\frac{p^2}{8m^2}(E'-e\phi)+(E'-e\phi)\frac{p^2}{8m^2}} - \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}}{2m}\,\frac{E'-e\phi}{2m}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}\right\}\bar{u}$$

Wegen $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p})^2 = p^2$ kann man umschreiben

$$E'\bar{u} = \left\{\frac{p^2}{2m}+e\phi-\frac{p^4}{8m^3}+\underbrace{\Big(\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}}{2m}\Big)^2\frac{E'-e\phi}{2m} + \frac{E'-e\phi}{2m}\Big(\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}}{2m}\Big)^2 - 2\,\overbrace{\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}}{2m}}^{=:A}\,\overbrace{\frac{E'-e\phi}{2m}}^{=:B}\,\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}}{2m}}_{(***)}\right\}\bar{u}$$

$$
\begin{aligned}
(***) &= A^2B + BA^2 - 2ABA \\
&= A(AB-BA) - (AB-BA)A = [A,\,[A,B]] \\
&= \frac{1}{8m^2}\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p},\, \underbrace{\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p},\, E'-e\phi\right]}_{=-ie\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\phi}\right] \\
&= -\frac{ie\hbar}{8m^2} \qquad \underbrace{\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p},\, \boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\phi\right]}_{\begin{array}{l}=\sigma_i\sigma_j[p_i,\nabla\phi_j]+\sigma_i[p_i,\sigma_j]\nabla\phi_j+\sigma_j[\sigma_i,\nabla\phi_j]p_i+[\sigma_i,\sigma_j]\nabla\phi_j p_i \\ =i\hbar\Delta\phi+2i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\nabla\phi\times\mathbf{p})\end{array}}
\end{aligned}
$$

$$
E'\bar{u} = \left\{ \frac{p^2}{2m} + e\phi - \underbrace{\frac{p^4}{8m^3}}_{p^4-\text{Term}} + \underbrace{\frac{e\hbar^2}{8m^2}\Delta\phi}_{\text{Darwin-Term}} + \underbrace{\frac{e\hbar}{4m^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\nabla\phi\times\mathbf{p})}_{\text{LS-Kopplung}} \right\} \bar{u}
$$

Dies sind die führenden relativistischen Korrekturen zur Pauli-Gleichung, Korrekturen höherer Ordnung in V/c können systematisch mit der **Foldy-Wouthuysen-Transformation** berechnet werden.

Wenn $\mathbf{A} \neq 0$, muß $\mathbf{p}$ durch $\mathbf{p} - e\mathbf{A}$ ersetzt werden und der Zusatzterm $g_s \frac{e}{2m}\mathbf{S}$ zum Hamiltonian hinzugefügt werden.

Die Bedeutung und Konsequenz der einzelnen Zusatzterme wurde schon in Quantenmechanik I diskutiert:
Darwin-Term ist beim Coulomb-Potential nur in s-Zuständen wirksam, denn $\Delta\frac{1}{r} = 4\pi\delta(\mathbf{r})$.
Der **$\mathbf{p^4}$-Term** ergibt sich aus

$$
E = m\sqrt{1+\frac{p^2}{m^2}} \approx m\left(1 + \frac{p^2}{2m^2} - \frac{1}{8}\left(\frac{p^2}{m^2}\right)^2\right) = m + \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3}
$$

LS-Kopplung ist Spin-Bohn-Kopplung: Für Zentralpotential ist $\nabla\phi = \frac{\mathbf{r}}{r}\phi'$, also

$$
\begin{aligned}
\frac{e\hbar}{4m^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\nabla\phi\times\mathbf{p}) &= \frac{\hbar}{4m^2}\frac{1}{r}e\phi'(\mathbf{r})\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{r}\times\mathbf{p}) \\
&= \frac{\hbar}{4m^2}\frac{e\phi'}{r}\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{L}, \qquad \mathbf{L}: \text{ der Bahndrehimpuls}
\end{aligned}
$$

Kapitel 7

Quantenelektrodynamik

7.1 Quantisierung des elektromagnetischen Feldes – Lorentzkovariante Formulierung

In der Lorentz-Eichung $\boxed{\partial_\mu A^\mu = 0}$ genügt das Viererpotential ($A^\mu = (\phi, \mathbf{A})$) im Quellfreien Fall ($\rho = 0$, $j^\mu = 0$) der d'Alembert Gleichung

$$\boxed{\Box A_\mu = 0}$$

$\Rightarrow$ Fourier-Entwicklung für die Feldoperatoren A_μ (wie bei Mesonen)

$$A_\mu = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 2\omega} \left\{ e^{ikx} a_\mu^+(\mathbf{k}) + e^{-ikx} a_\mu(\mathbf{k}) \right\}$$

mit

$$k = \begin{pmatrix} \omega \\ \mathbf{k} \end{pmatrix}, \quad \omega = |\mathbf{k}|, \quad kx = k^\mu x_\mu = \omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}$$

Mikrokausalität erfordert Bose-Vertauschungs-Relationen

$$\begin{aligned} \left[a_\mu^+(\mathbf{k}),\ a^+(\mathbf{k}')\right] &= 0 \\ \left[a_\mu(\mathbf{k}),\ a_\nu(\mathbf{k})\right] &= 0 \\ \left[a_\mu(\mathbf{k}),\ a_\nu^+(\mathbf{k}')\right] &= Z_{\mu\nu}(2\pi)^3 2\omega \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \end{aligned}$$

mit zunächst noch unbekannten $Z_{\mu\nu}$.
a, a^+ wirken im Fock-Raum, für das Vakuum gilt

$$a_\mu(\mathbf{k}) |\, 0 \,\rangle = 0 \qquad \forall \mu, \mathbf{k}$$

Falls wir explizite Lorentz-Kovarianz der Theorie wollen, muß $Z_{\mu\nu}$ ein konstanter Tensor zweiter Stufe sein. Der einzige solche Tensor ist $g_{\mu\nu}$. Nach eventueller Reskalierung muß also $Z_{\mu\nu} = \pm g_{\mu\nu}$, die richtige Wahl (s.u.) ist

$$\left[a_\mu(\mathbf{k}),\ a_\nu^+(\mathbf{k}')\right] = -g_{\mu\nu}(2\pi)^3 2\omega\, \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$$

die Operatoren a_j^+ $(j = 1, 2, 3)$ angewandt auf das Vakuum führen zu Zuständen mit positiver Norm, a_0^+ zu Zuständen negativer Norm.

Betrachte allgemeinen Zustand $|\, f \,\rangle = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3\sqrt{2\omega}} \sum_\mu f_\mu(\mathbf{k}) a^+(\mathbf{k}) \,|\, 0 \,\rangle$

$$\rightsquigarrow \langle\, f \,|\, f \,\rangle = \int \frac{d^3k\, d^3k'}{(2\pi)^6\sqrt{2\omega 2\omega'}} \sum_{\mu,\nu} f_\nu^*(\mathbf{k}') f_\mu(\mathbf{k}) \,\langle 0|\, a_\nu(\mathbf{k}') a_\mu^+(\mathbf{k}) \,|0\rangle$$

$$= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_\mu \pm |f_\mu(\mathbf{k})|^2 \quad \begin{cases} \geq 0 & \text{für} \quad f_0 = 0 \\ < 0 & \text{für} \quad f_0 > 0,\ f_{1,2,3} = 0 \end{cases}$$

Neben Zuständen mit negativer Norm treten Zustände

$$|\mathbf{k}, \varepsilon\rangle = -\varepsilon^\mu a_\mu^+(\mathbf{k}) \,|0\rangle$$

mit beliebiger Vierer-Polarisationsrichtung ε auf, so daß wir *vier* linear unabhängige Polarisationsrichtungen zu festem $\mathbf{k}$ statt nur 2 experimentell beobachteten.

Das Verfahren von Gupta und Bleuler (1950) garantiert positive Norm und wird die 2 unerwünschten Polarisationsrichtungen los: Lorentz-Bedingung muß als Nebenbedingung für *Zustände* gefordert werden.

Nur einen Teil der Zustandsvektoren im Fock-Raum erklären wir für physikalisch, und zwar gerade diejenigen, die in gewisser Weise die Lorentz-Bedingung erfüllen. Wir nehmen den Teil von A_μ, der nur Vernichter enthält:

$$A_\mu^{(-)}(x) := \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 2\omega}\, e^{-ikx} a_\mu(\mathbf{k})$$

und fordern für physikalische Zustandsvektoren bzw.

$$\begin{aligned} \partial^\mu A_\mu^{(-)}(x) \,|\text{phys. Zust.}\rangle &= 0 \\ k^\mu a_\mu(x) \,|\text{phys. Zust.}\rangle &= 0 \qquad \forall\, \mathbf{k} \end{aligned}$$

Hiermit $\langle \text{phys. Zust.}|\, \partial^\mu A_\mu^{(-)}(x) \,|\text{phys. Zust.}\rangle = 0$ d.h. der *Erwartungswert* der Divergenz des Feldes A_μ verschwindet für beliebige physikalische Zustände. Unterraum $\{|\,\text{phys. Zust.}\rangle\}$ ist offenbar ein linearer Raum.

Behauptung:

$$\langle \text{phys. Zust.} \,|\, \text{phys. Zust.}\rangle \geq 0$$

d.h. der Raum hat positiv *semi*-definite Metrik.

Beweis:
Wir wählen neue Basis für Erzeuger und Vernichter: Betrachte die Operatoren $a_\mu^+(\mathbf{k})$ für

festes $\mathbf{k}$. Wähle zwei Einheitsvektoren $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2 \perp \mathbf{k}$, so daß $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$, $\mathbf{e}_3 := \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|}$ orthonormales Dreibein $\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij}$

Definition:

$$\begin{aligned}
\alpha_0^+(\mathbf{k}) &:= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(a_0^+(\mathbf{k}) - \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{a}^+(\mathbf{k})\right) \\
\alpha_1^+(\mathbf{k}) &:= \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{a}^+(\mathbf{k}) \\
\alpha_2^+(\mathbf{k}) &:= \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{a}^+(\mathbf{k}) \\
\alpha_3^+(\mathbf{k}) &:= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(a_0^+(\mathbf{k}) + \mathbf{e} \cdot \mathbf{a}^+(\mathbf{k})\right) \\
\mathbf{a}^+ &= \left(a_1^+,\, a_2^+,\, a_3^+\right)
\end{aligned}$$

$\rightsquigarrow$ Vertauschungsrelationen

$$\begin{array}{rcl}
\left[\alpha_0(\mathbf{k}),\, \alpha_0^+(\mathbf{k}')\right] &=& \left[\alpha_3(\mathbf{k}),\, \alpha_3^+(\mathbf{k}')\right] = 0 \\
\left[\alpha_0(\mathbf{k}),\, \alpha_3^+(\mathbf{k}')\right] &=& \left[\alpha_3(\mathbf{k}),\, \alpha_0^+(\mathbf{k}')\right] = -(2\pi)^3 2\omega\delta^3(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \\
\left[\alpha_1(\mathbf{k}),\, \alpha_1^+(\mathbf{k}')\right] &=& \left[\alpha_2(\mathbf{k}),\, \alpha_2^+(\mathbf{k}')\right] = (2\pi)^3 2\omega\delta^3(\mathbf{k}-\mathbf{k}')
\end{array} \qquad (*)$$

alle anderen verschwinden.

Die Nebenbedingung $k^\mu a_\mu(\mathbf{k})|\text{phys. Zust.}\rangle = 0$ lautet dann einfach

$$\alpha_0|\text{phys. Zust.}\rangle = 0 \qquad (**)$$

Betrachte einen Zustandsvektor im Hilbertraum der Gestalt

$$\alpha_1^+(\mathbf{k}_1)\alpha_1^+(\mathbf{k}_2)\cdots\alpha_2^+\cdots\alpha_0^+\cdots\alpha_3^+\cdots|\,0\,\rangle \qquad (+)$$

d.h. beliebiges Produkt von Erzeugern angewandt auf Vakuum. Wegen der Kommutatorrel. $(*)$ kann $(**)$ dann und nur dann erfüllt sein, wenn kein Operator a_3^+ vorkommt! Z.B. sind unter $\alpha_\mu^+(\mathbf{k})|\,0\,\rangle$ nur $\alpha_1^+(\mathbf{k})|\,0\,\rangle$ und $\alpha_2^+(\mathbf{k})|\,0\,\rangle$ phys.. Diese sind orthogonal und ihre Längenquadrate größer gleich Null

$$\begin{array}{rcl}
\langle 0|\,\alpha_1(\mathbf{k})\alpha_1^+(\mathbf{k})\,|0\rangle &=& (2\pi)^3 2\omega\,\delta^3(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \\
\langle 0|\,\alpha_2(\mathbf{k})\alpha_2^+(\mathbf{k})\,|0\rangle &=& (2\pi)^3 2\omega\,\delta^3(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \\
\langle 0|\,\alpha_0(\mathbf{k})\alpha_0^+(\mathbf{k})\,|0\rangle &=& 0
\end{array} \qquad (++)$$

Ein beliebiger physikalischer Zustandsvektor ist eine Linearkombination von Zustandsvektoren der Gestalt $(+)$, die *kein* α_3^+ enthalten. Für diese zeigt man dann leicht (in Verallgemeinerung von $(++)$), daß kein Längenquadrat größer gleich Null ist. ■

Man gelangt von hier leicht zu einem Hilbert-Raum mit positiv-definiter Metrik: (dann Wahrscheinlichkeitsinterpretation im Sinne der QM zuläßt).

Definition: **Äquivalenzklassen von Zustandsvektoren**:

$$|\,1\,\rangle \sim |\,2\,\rangle \quad\Longleftrightarrow\quad (\langle\,1\,| - \langle\,2\,|)\,(|\,1\,\rangle - |\,2\,\rangle)$$

Der lineare Hilbertraum der Äquivalenzklassen hat dann positiv-definite Metrik.

Physikalische Interpretation:
Zustand eines Systems von Photonen wird durch eine ganze Klasse von äquivalenten Zustandsvektoren beschrieben. Man kann zeigen, daß der Erwartungswert von *beobachtbaren* Größen (wie Feldstärketensor, Energie etc.) identisch ist für äquivalente Zustandsvektoren. In der Praxis, z.B. bei der Berechung von Matrixelementen, kann man daher stets einen beliebigen Vertreter aus einer Äquivalenzklasse als Zustandsvektor nehmen.

Da wegen $(**)$ $\alpha_0^+(\mathbf{k})|\,0\,\rangle$ dem Nullvektor entspricht, sind nur Linearkombinationen aus

$$\boxed{\begin{aligned}|\mathbf{k},\varepsilon_1\rangle &= \alpha_1^+(\mathbf{k})\,|\,0\,\rangle = \mathbf{e}_1\cdot\mathbf{a}^+(\mathbf{k})\;|\,0\,\rangle\\ |\mathbf{k},\varepsilon_2\rangle &= \alpha_2^+(\mathbf{k})\,|\,0\,\rangle = \mathbf{e}_2\cdot\mathbf{a}^+(\mathbf{k})\;|\,0\,\rangle\end{aligned}}$$

mit $\varepsilon_{1,2} = \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{e}_{1,2} \end{pmatrix}$
physikalische Ein-Photon-Zutände = experimentellen Befund von nur 2 lin. unabh. Ein-Photon-Zutände für jedes $\mathbf{k}$ physikalische Ein-Photon-Zutände zu festem $\mathbf{k}$:

$$\boxed{|\mathbf{k},\varepsilon\rangle = -\varepsilon^\mu a_\mu^+(\mathbf{k})\;|\,0\,\rangle = \boldsymbol{\varepsilon}\cdot\mathbf{a}^+(\mathbf{k})\;|\,0\,\rangle\,,\quad \varepsilon = \begin{pmatrix} 0 \\ \boldsymbol{\varepsilon} \end{pmatrix}}$$

mit $\varepsilon^0 = 0,\ \boldsymbol{\varepsilon}\cdot\mathbf{k} = 0,\ |\boldsymbol{\varepsilon}| = 1$, d.h. insbesondere $\varepsilon^\mu k_\mu = 0$.

Diese Zustände erfüllen Kontinuumsnormierung

$$\langle \mathbf{k}',\varepsilon'|\mathbf{k},\varepsilon\rangle = \left(\boldsymbol{\varepsilon}'^*\cdot\boldsymbol{\varepsilon}\right)(2\pi)^3 2\omega\,\delta^3(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$$

Linear polarisierte Photonen werden durch reellen Polaristionsvektor $\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^*$ beschrieben, **rechts- und linkszirkular polarisierte** Photonen durch $\boldsymbol{\varepsilon}_\pm = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_1 \pm i\mathbf{e}_2)$. Warum haben wir uns nicht gleich auf Zustandsvektoren $(***)$ beschränkt? Transversalität an den Polarisationsvektor ε ist nicht Lorentz-Kovariant:

$$k \to k' = \Lambda k,\quad \varepsilon = \begin{pmatrix} 0 \\ \boldsymbol{\varepsilon} \end{pmatrix} \to \varepsilon' = \Lambda\varepsilon$$

$$\rightsquigarrow\quad \varepsilon'^\mu k'_\mu = 0 \quad\rightsquigarrow\quad \varepsilon' = \begin{pmatrix} \varepsilon'^0 \\ \mathbf{e}' + \varepsilon'^0\frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}'|} \end{pmatrix}$$

Zwar ist $\mathbf{e}'\cdot\frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}'|} = 0$ aber i.a. $\varepsilon'^0 \neq 0$.

Bermerkung: Der entsprechende Zustandsvektor ist aber äquivalent zu demjenigen eines rein transversalen Photons

$$\begin{aligned}-\varepsilon'^\mu a_\mu^+(\mathbf{k}')\;|\,0\,\rangle &= \left\{\mathbf{e}'\cdot\mathbf{a}^+(\mathbf{k}') - \varepsilon'^0\left[a_0^+(\mathbf{k}') - \frac{\mathbf{k}'}{|\mathbf{k}'|}\cdot\mathbf{a}^+(\mathbf{k}')\right]\right\}|\,0\,\rangle\\ &\sim\ \mathbf{e}'\cdot\mathbf{a}^+(\mathbf{k}')\,|\,0\,\rangle\end{aligned}$$

7.2 Normal- und zeitgeordnete Produkte

Wir wollen nun die Erwartungswerte einiger physikalisch beobachtbarer Größen angeben – $\langle \ldots \rangle$ bedeutet den EW in einem beliebigen physikalischen Zustand.
Wegen $\mathbf{B} = \mathrm{rot}\mathbf{A}$ ist

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{B}(x) \rangle &= \int \frac{dk}{(2\pi)^3 2\omega} \left\{ e^{ikx} \left\langle -i\mathbf{k} \times \left[\mathbf{e}_1 \alpha_1^+(\mathbf{k}) + \mathbf{e}_2 \alpha_2^+(\mathbf{k}) \right] \right\rangle \right\} \\ &\quad + e^{-ikx} \left\langle i\mathbf{k} \times \left[\mathbf{e}_1 \alpha_1(\mathbf{k}) + \mathbf{e}_2 \alpha_2(\mathbf{k}) \right] \right\rangle\end{aligned}$$

und wenn $\mathbf{E} = -\nabla A_0 - \partial_0 \mathbf{A} \quad \rightsquigarrow \ \langle \mathbf{E} \rangle = -\langle \partial_0 \mathbf{A} \rangle$ da $\langle \nabla A_0 \rangle = 0$ denn

$$\begin{aligned}&\langle \text{phys. Zust.} |\, a_0^+(\mathbf{k}) \,| \text{phys. Zust.} \rangle \\ = \ &\langle \text{phys. Zust.} |\, \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\alpha_0^+(\mathbf{k}) + \alpha_3^+(\mathbf{k}) \right) | \text{phys. Zust.} \rangle \\ = \ &0\end{aligned}$$

da $\alpha_0^+ \,|\text{phys. Zust.}\rangle$ und $\langle \text{phys. Zust.}| \, \alpha_3^+ = 0$ denn $|\text{phys. Zust.}\rangle$ enthält kein α_3^+.
analog $\langle \text{phys. Zust.}| \, a_0(\mathbf{k}) \,|\text{phys. Zust.}\rangle = 0$

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{E} \rangle &= -\langle \partial_0 \mathbf{A} \rangle \\ &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 2\omega} \left\{ -i\omega e^{ikx} \left\langle \mathbf{e}_1 \alpha_1^+(\mathbf{k}) + \mathbf{e}_2 \alpha_2^+(\mathbf{k}) \right\rangle + i\omega e^{-ikx} \left\langle \mathbf{e}_1 \alpha_1(\mathbf{k}) + \mathbf{e}_2 \alpha_2(\mathbf{k}) \right\rangle \right\}\end{aligned}$$

(Beachte $\mathbf{a}^+(\mathbf{k}) = \mathbf{e}_1 \alpha_1^+(\mathbf{k}) + \mathbf{e}_3 \alpha_3^+(\mathbf{k})$ und $\langle \text{phys. Zust.}| \, a_3^+(\mathbf{k}) \,|\text{phys. Zust.}\rangle = 0$).
Es tragen also nur die transversalen Freiheitsgrade der Photonen bei, im Einklang mit dem Experiment.

Energie p^0 und Impuls $\mathbf{p}$ des elektromagnetischen Feldes:

$$\begin{aligned}\text{klassisch} \qquad p^0 &= \int_{t=\text{const.}} d^3x \, \frac{1}{2} \left[E^2(x) + B^2(x) \right] \\ \mathbf{p} &= \int_{t=\text{const.}} d^3x \, \mathbf{E}(x) \times \mathbf{B}(x)\end{aligned}$$

Betrachten wir $\mathbf{E}$ und $\mathbf{B}$ als Feldoperatoren, so finden wir in einem beliebigen physikalischen Zustand

$$\begin{aligned}\langle p'^0 \rangle &= \frac{1}{2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 2\omega} \, \omega \cdot \left\langle \sum_{i=1}^{2} \left\{ \alpha_i^+(\mathbf{k}) \alpha_i(\mathbf{k}) + \alpha_i(\mathbf{k}) \alpha_i^+(\mathbf{k}) \right\} \right\rangle \\ \langle \mathbf{p}' \rangle &= \frac{1}{2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 2\omega} \, \mathbf{k} \cdot \left\langle \sum_{i=1}^{2} \left\{ \alpha_i^+(\mathbf{k}) \alpha_i(\mathbf{k}) + \alpha_i(\mathbf{k}) \alpha_i^+(\mathbf{k}) \right\} \right\rangle\end{aligned}$$

($\rightarrow$ Übung) wieder tragen nur die physikalischen Freiheitsgrade der Photonen bei.

Es ergibt sich aber eine neue Schwierigkeit:

Betrachte Vakuum-Erwartungswert

$$\begin{aligned}
\langle 0|\, p'^0\, |0\rangle &= \frac{1}{2}\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 2\omega}\,\omega \cdot \sum_{l=1}^{2} \langle 0|\, \alpha_i(\mathbf{k})\alpha_i^+(\mathbf{k})\, |0\rangle \\
&= \frac{1}{2}\int d^3k\,\omega \cdot 2\delta^3(0) \\
&= \frac{1}{2}\int d^3k\,\omega \cdot 2\frac{V}{(2\pi)^3} \qquad (1)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle 0|\, p'^0\, |0\rangle &= \frac{1}{2}\int d^3k\,\mathbf{k} \cdot 2\delta^3(0) \\
&= \frac{1}{2}\int d^3k\,\mathbf{k} \cdot 2\frac{V}{(2\pi)^3} \qquad (2)
\end{aligned}$$

Dabei haben wir Fermis Trick benutzt und $(2\pi)^3\delta^3(0)$ durch ein Normierungsvolumen V ersetzt.
$\delta^3(\mathbf{k}-\mathbf{k}') = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')} \Rightarrow (2\pi)^3\delta^3(0) = \int d^3k \to V$ falls Integral nicht über unendliche, sondern endliche Volumen V.

(1) ist relativ harmlos: Symmetrische Integration über alle Impulse gibt 0.

(2) stellt Nullpunktsenergie des elektromagnetischen Feldes dar (im Volumen). Nur Energiedifferenzen meßbar, wählen Vakuum als Nullpunkt der Energiezählung.
$\Rightarrow$ bisherige Energieoperatoren werden ersetzt durch

$$p^0 = p'^0 - \langle 0|\, p'^0\, |0\rangle$$

$$\begin{aligned}
\rightsquigarrow \quad \langle p^0 \rangle &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 2\omega}\,\omega \left\langle \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{2} \left\{ \alpha_i^+(\mathbf{k})\alpha_i(\mathbf{k}) + \alpha_i(\mathbf{k})\alpha_i^+(\mathbf{k}) - \langle 0|\, \alpha_i(\mathbf{k})\alpha_i^+(\mathbf{k})\, |0\rangle \right\} \right\rangle \\
&= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 2\omega}\,\omega \left\langle \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{2} \left\{ \alpha_i^+(\mathbf{k})\alpha_i(\mathbf{k}) + \alpha_i(\mathbf{k})\alpha_i^+(\mathbf{k}) - \left[\alpha_i(\mathbf{k}),\, \alpha_i^+(\mathbf{k})\right] \right\} \right\rangle \\
&= \frac{d^3k}{(2\pi)^3 2\omega}\,\omega \left\langle \sum_{i=1}^{2} \alpha_i^+(\mathbf{k})\alpha_i(\mathbf{k}) \right\rangle
\end{aligned}$$

Hier stehen alle Erzeugungsoperatoren links von den Vernichtungsoperatoren
$\rightsquigarrow$ wohldefiniertem Operator ohne Divergenzen.

Mathematisch ergaben sich die Divergenzprobleme, da sich Produkte von Feldoperatoren am selben Punkt wie $(\mathbf{E}(x))^2$ als zu singulär erwiesen. Wir können die Subtraktion der Vakuumenergie automatisch bewirken, wenn wir eine neue Art Produkt von Feldoperatoren einführen, das **normalgeordnete Produkt** oder **Normalprodukt**.

Definition:
Im Normalprodukt wirken alle Erzeuger so, als stünden sie *links* von allen Vernichtern.

$$\begin{aligned}
:a^+a'^+: &= a^+a'^+ \\
:a^+\,a':\ &= a^+a' \\
:a'\,a'^+: &= a^+a' \\
:a\ \ a':\ &= a\ \ a'
\end{aligned}$$

a, a' beliebige Vernichter von **Bose**-Feldern. Bei Fermionen zusätzlich Minus-Zeichen.

Beispiel:

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(x) \sim a^+ + a \quad \Longrightarrow \quad :\mathbf{E}^2(x): \; &\sim \; :\left(a^+ + a\right)\left(a^+ + a\right): \\ &= \; :a^+a^+ + a^+a + aa^+ + aa: \\ &= \; a^+a^+ + 2a^+a + aa\end{aligned}$$

Damit ergeben sich die korrekten Ausdrücke für Energie und Impuls zu

$$\begin{aligned}p^0 &= \int_{t=\text{const}} d^3x \, \frac{1}{2} :\left(\mathbf{E}^2(x) + \mathbf{B}^2(x)\right): \\ \mathbf{p} &= \int_{t=\text{const}} d^3x \; :\mathbf{E}(x) \times \mathbf{B}(x):\end{aligned}$$

Das analoge Problem taucht beim Dirac-Feld auf und wird ebenso durch das Normalprodukt gelöst:

Betrachte den Dirac-Strom $\bar{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)$ transformiert wie Viererstromdichte.

Ursprünglich sah man das Dirac-Feld als relativistische Wahrscheinlichkeitsamplitude für ein Elektron an. Dabei wurde die Nullkomponente des Dirac-Stromes als Dichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit interpretiert, denn für den Dirac-Spinor gilt ja $\bar{\psi}(x)\gamma^0\psi(x) = \psi^+(x)\psi(x) > 0$ für $\psi(x) \neq 0$. Eine Ein-Teilchen-Interpretation des Dirac-Spinors ist jedoch nicht haltbar – Frage: Welche Rolle spielt der Dirac-Strom in der Theorie des freien quantisierten Dirac-Feldes?

Ladungs- und Stromverteilung, d.h. die elektromagnetische Viererstromdichte $j^\mu(x)$ eines Systems von Elektronen und Positronen ist sicher eine beobachtbare Größe. Ansatz:

$$j^\mu(x) = -e\bar{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x) \qquad -e = \text{Elektronenladung}$$

$\rightsquigarrow$ Operator der Gesamtladung

$$Q' = \int d^3x j^0(\mathbf{x}, t) = -e \int d^3x \bar{\psi}(\mathbf{x}, t)\gamma^0\psi(\mathbf{x}, t)$$

Erinnerung:

$$\psi(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2p^0} \sum_{s=\pm\frac{1}{2}} \left\{e^{ipx} v_s(p) b_s^+(\mathbf{p}) + e^{-ipx} u_s(p) a_s(\mathbf{p})\right\}$$

$$\rightsquigarrow \qquad Q' = -e \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3 2p^0} \sum_{s=\pm\frac{1}{2}} \left\{a_s^+(\mathbf{p}) a_s(\mathbf{p}) + b_s(\mathbf{p}) b^+(\mathbf{p})\right\}$$

$$\begin{aligned}\Longrightarrow \langle 0|\, Q' \,|0\rangle \; &= \; -e \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3 2p^0} \sum_{s=\pm\frac{1}{2}} \underbrace{\langle 0|\, b_s(\mathbf{p}) b_s^+(\mathbf{p}) \,|0\rangle}_{= \langle 0|\, \underbrace{\left\{b_s(\mathbf{p}),\, b_s^+(\mathbf{p})\right\}}_{= (2\pi)^3 2p^0 \delta(0)} |0\rangle} \\ &= \; -e \int d^3p \, 2\delta^3(0) \\ &= \; \infty \quad (V \to \infty)\end{aligned}$$

also ein ähnliches Problem wie mit dem Nullpunkt der Energiezählung. Wir erhalten einen "guten" Ladungsoperator Q, wenn wir die Gesamtladung des Vakuums als Nullpunkt wählen.

$$\begin{aligned} Q &= Q' - \langle 0| Q' |0\rangle \\ &= -e \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3 2p^0} \sum_{s=\pm\frac{1}{2}} \left(a_s^+(\mathbf{p}) a_s(\mathbf{p}) + b_s(\mathbf{p}) b_s^+(\mathbf{p}) - \left\{ b_s(\mathbf{p}),\, b_s^+(\mathbf{p}) \right\} \right) \\ &= -e \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3 2p^0} \sum_{s=\pm\frac{1}{2}} \left(a_s^+(\mathbf{p}) a_s(\mathbf{p}) - b_s^+(\mathbf{p}) b_s(\mathbf{p}) \right) \end{aligned}$$

Q hat positive und negative Eigenwerte, Elektronen haben Ladung $-e$, Positronen $+e$. Die unendliche Selbstladung des Vakuums rührt mathematisch wieder vom Produkt zweier Feldoperatoren am selben Ort, wird vermieden durch **Normalordnung** der Feld-Operatoren wie bei Bosonen.

Definition:

$$: a_r(\mathbf{p}) a_s^+(\mathbf{p}) : = -a_s^+(\mathbf{p}') a_r(\mathbf{p})$$

d.h. für jede Vertauschung von Feld-Operatoren ein "−" Zeichen.

$\rightsquigarrow$

$$\boxed{j^\mu(x) = -e : \bar{\psi}(x) \gamma^\mu \psi(x) :}$$

n.b.: $: \bar{\psi}\gamma^0\psi :$ nicht mehr positiv.

7.3 Elektromagnetische Kopplung und Störungsentwicklung

Im Rahmen eines deduktiven Aufbaus der QED stellt man die Lagrange-Funktion des gekoppelten Maxwell-Dirac Systems an die Spitze, und zwar zunächst für die klassischen Felder:

$$L = \int d^3x \mathcal{L}(\mathbf{x}, t)$$

mit der Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L}(x) = \mathcal{L}_0(x) + \mathcal{L}'(x)$$

Freie Felder:

$$\mathcal{L}_0(x) = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu}(x) F^{\mu\nu}(x) + \bar{\psi}(x)(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi(x)$$

WW:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}'(x) &= -j^\mu(x) A_\mu(x) \\ &= e\bar{\psi}(x)\gamma^\mu A_\mu(x)\psi(x) \end{aligned}$$

Die Gestalt des Kopplungsterms hatten wir schon früher im Zusammenhang mit der WW des quantisierten Strahlungsfeldes mit Materie hergeleitet. Er ergibt sich aus $\mathcal{L}_0$ durch die Substitution

$$\boxed{\partial_\mu \to \partial_\mu - ieA_\mu}$$ "minimale Ankopplung"

denn

$$\bar{\psi}\left(i\gamma^\mu\left(\partial_\mu - ieA_\mu\right) - m\right)\psi = \bar{\psi}\left(i\gamma^\mu\partial_\mu - m\right)\psi + e\bar{\psi}\gamma^\mu A_\mu\psi = \mathcal{L}_0 - j^\mu A_\mu.$$

Dies macht die Theorie **lokal** eichinvariant unter $U(1)$. $\mathcal{L}_0$ ist invariant unter $\psi \to e^{ie\Lambda\psi}$, Λ = const, die Lagrange-Funktion ändert sich bei Multiplikation des Dirac-Spinors mit konstantem Phasenfaktor nicht. Diese Invarianz der Lagrange-Funktion einer globalen Eichtransformation hat, nach dem Noether-Theorem, einen Erhaltungssatz zur Folge: In diesem Fall ist es die Ladung, die die Erhaltungsgröße darstellt. Da aber Λ konstant ist, muß die Eichtransformation an jedem Punkt der Raum-Zeit dieselbe sein, es ist eine **globale** Eichtransformation. D.h. rotieren wir die Phase des Spinors an einem Punkt um den Winkel Λ, müssen wir dieselbe Rotation an allen anderen Punkten gleichzeitig ausführen.

Nimmt man diese physikalische Interpretation ernst, dann sieht man, daß sie unmöglich zu erfüllen ist, da sie den Geist der Relativität verletzt, nach dem es eine minimale Verzögerung geben muß, die der Zeit entspricht, die das Licht braucht, um von einem Raumpunkt zum anderen zu reisen.

Um dieses Problem zu umschiffen, gibt man die Forderung, daß Λ eine Konstante sein muß, auf und schreibt den Phasenfaktor als eine beliebige Funktion der Raum-Zeit: $\Lambda(x)$

Dies ist eine **lokale** Eich-Transformation, sie variiert von Punkt zu Punkt. Sie wird auch "Eich-Transformation der zweiten Art" genannt.

Nun taucht bei einer Umeichung mit einer lokalen Eich-Transformation

$$\boxed{\psi \longrightarrow e^{ie\Lambda(x)}\psi} \tag{1}$$

ein Zusatzterm (durch) auf, der aber genau eine Umeichung des elektromagnetischen Feldes entspricht

$$\boxed{A_\mu \longrightarrow A_\mu - \partial_\mu\Lambda(x)} \tag{2}$$

denn mit (1)

$$\begin{aligned}\mathcal{L} \quad &\longrightarrow \quad \mathcal{L} + \bar{\psi}\left(i\gamma^\mu\partial_\mu(ie\Lambda)\right)\psi \\ &= \mathcal{L}_0 + e\bar{\psi}\gamma^\mu \underbrace{\left(A_\mu - \partial_\mu\Lambda\right)}_{=A'_\mu}\psi\end{aligned}$$

m.a.W.: $\mathcal{L}$ ist invariant unter der lokalen Eich-Transformation (1), (2) : $\mathcal{L} \to \mathcal{L}$. Diese von H. Weyl 1929 entdeckte Invarianz des gekoppelten Maxwell-Dirac-Systems bezeichnen wir in moderner Sprechweise als eine $U(1)$-Eichsymmetrie. Eichsymmetrien sind der Eckstein der modernen Theorien der Elementarteilchen. Sowohl die starke wie die schwache WW wird von Eichsymmetrien beherrscht, die eine Verallgemeinerung der Eichsymmetrie der QED darstellen.

Vernachlässigen wir in $\mathcal{L}$ den Kopplungsterm, d.h. setzen wir $e = 0$, so erhalten wir als Euler-Lagrange-Gleichungen die freien Maxwell- und Dirac-Gleichungen. die Quantisierung der entsprechenden Felder geschieht wie besprochen. Die Idee ist nun, eine Reihenentwicklung in e zu machen, um die Kopplung zu berücksichtigen. → Störungstheorie

Dirac- oder WW-Bild

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}'$$

$\rightsquigarrow$ Feldoperatoren genügen

$$\frac{\partial}{\partial t} = i\,[\mathcal{H}_0, A(t)] \quad \Longrightarrow \quad A(t) = e^{i\mathcal{H}_0 t} A e^{-i\mathcal{H}_0 t}$$

Zustände genügen

$$\boxed{i\frac{\partial}{\partial t}|t\rangle = \mathcal{H}'(t)|t\rangle} \qquad (*)$$

$$\Longrightarrow \quad |t\rangle = e^{-i\mathcal{H}' t}|t=0\rangle$$

Da der Kopplungsterm $\mathcal{L}'$ in der Lagrange-Dichte keine Ableitungen nach der Zeit enthält, ist die WW-Energie $\mathcal{H}'(t)$ bis auf Vorzeichen gleich $\mathcal{L}'$:

$$\mathcal{H}'(t) = -\int d^3r \mathcal{L}'(\mathbf{r},t) = \int d^3r j^\mu(\mathbf{r},t) A_\mu(\mathbf{r},t)$$

d.h.

$$\boxed{\mathcal{H}'(t) = -\int d^3r \ :\bar{\psi}(\mathbf{r},t)\gamma^\mu\psi(\mathbf{r},t):\ A_\mu(\mathbf{r},t)} \qquad (**)$$

Die Gleichungen $(*)$ und $(**)$ sind das Fundament, auf dem wir die Feynman-Regeln der QED aufbauen werden.

Wir betrachten folgende physikalische Fragestellung:
Zur Zeit $t \to -\infty$ sei eine gewisse Anzahl von Elektronen, Positronen und Photonen vorhanden, die alle weit voneinander separiert seien. Diese Teilchen können sich dann im Laufe der Zeit treffen, aneinander streuen, sich vernichten, neue Teilchen erzeugen.

Wir fragen nach dem Zustand zur Zeit $t \to +\infty$, insbesondere nach der Übergangsamplitude in einen gegebenen Zustand mit gewisser Anzahl von Elektronen, Positronen und Photonen.

$$e^-(p_1) + \cdots + e^+(q_1) + \cdots + \gamma(k_1) + \cdots \longrightarrow e^-(p_1') + \cdots + e^+(q_1') + \cdots + \gamma(k_1') + \cdots$$

7.4 Die Feynman- Regeln

Ausgangspunkt ist Gleichung $(*)$
Entwickeln wir in $(**)$ $\bar{\psi}$, ψ und A_μ nach Erzeugern und Vernichtern, wobei wir schematisch setzen $\bar{\psi} \sim b + a^+$, $\psi \sim b^+ + a$, $A_\mu \sim \alpha^+ + \alpha$
(Erinnerung: $\psi(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2p^0} \sum_{s=\pm 1/2} \left\{ e^{ipx} v_s(p) b_s^+(\mathbf{p}) + e^{-ipx} u_s(p) a_s(\mathbf{p}) \right\}$)
so erhalten wir folgende Struktur für $\mathcal{H}'$:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}' &\sim : \left(b + a^+\right)\left(b^+ + a\right) : \left(\alpha^+ + \alpha\right) \\ &\sim \underbrace{-b^+ b\left(\alpha^+ + \alpha\right)}_{(4)} + \underbrace{a^+ b^+\left(\alpha^+ + \alpha\right)}_{(3)} + \underbrace{ba\left(\alpha^+ + \alpha\right)}_{(2)} + \underbrace{a^+ a\left(\alpha^+ + \alpha\right)}_{(1)} \end{aligned}$$

Wenden wir $\mathcal{H}'$ auf einen beliebigen Zustand an, so bewirkt z.B. der Term (1) folgendes: Durch a wird ein Elektron vernichtet, durch a^+ ist wieder ein Elektron erzeugt mit im allgemeinen anderen Impuls. Dabei wird ein Photon entweder emittiert (α^+) oder absorbiert (α).

Diagrammatische Veranschaulichung:

(1) Emission oder Absorption eines Photons durch ein Elektron

(2) Vernichtung eines Elektron-Positron-Paares unter Emission oder Absorption eines Photons

(3) Erzeugung eines Elektron-Paares unter Emission oder Absorption eines Photons

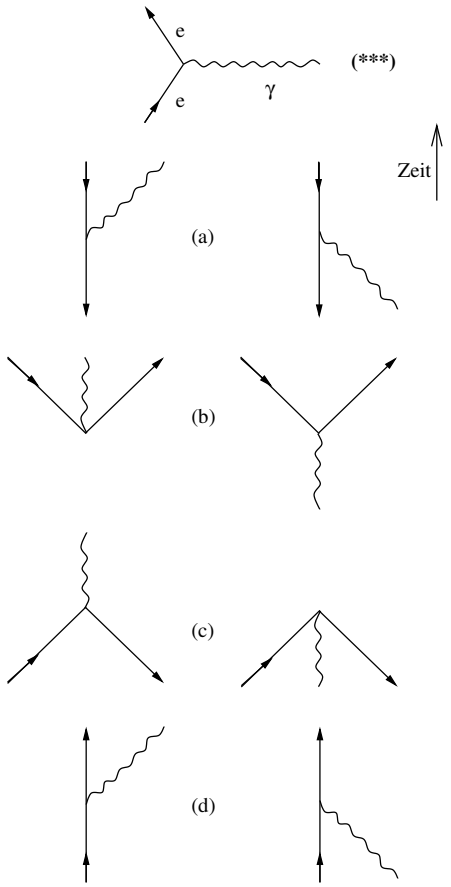
(4) Emission oder Absorption eines Photons durch ein Positron

Alle Prozesse können durch ein einziges Diagramm dargestellt werden, s. $(***)$, wenn man vereinbart, Positronen durch in der Zeit zurücklaufende Elektronenlinien zu symbolisieren.

Zur Zeit $t \to \infty$ haben wir eine gewisse Anzahl Elektronen, Positronen und Photonen, die wir durch entsprechende Linien andeuten.

Nach $(*)$ besteht eine Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit für den Übergang in anderen Zustand, wobei einer der Prozesse (1) - (4) geschehen kann. Das kann sich wiederholen; die Übergangs-Amplituden in einem bestimmten Endzustand müssen entsprechend den Regeln der QM kohärent addiert werden, unabhängig von den Zwischenschritten, die zu diesem Zustand führen. Korrekte Superposition ergibt sich aus der formalen Lösung von $(*)$:

$$|t\rangle = \left\{ 1 + (-i) \int_{-\infty}^{t} dt' \mathcal{H}'(t') + (-i)^2 \int_{-\infty}^{t} dt' \int_{-\infty}^{t'} dt'' \mathcal{H}'(t') \mathcal{H}'(t'') + \cdots \right\} |t = -\infty\rangle$$



Daraus ergibt sich der $\mathcal{S}$-Operator, der die Zeitentwicklung der Zustände von $t \to -\infty$ nach $t \to +\infty$ beschreibt:

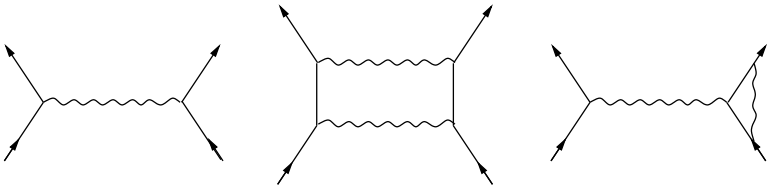
$$\begin{aligned} |t = +\infty\rangle &= \mathcal{S}\,|t = -\infty\rangle \\ &= \Big\{1 + (-i)\int_{-\infty}^{\infty} dt' \mathcal{H}'(t') + (-i)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{t'} dt'' \mathcal{H}'(t')\mathcal{H}'(t'') \\ &\quad + \cdots\Big\}\,|t = -\infty\rangle \end{aligned}$$

Mit Hilfe des zeitgeordneten Produkts kann man $\mathcal{S}$ etwas schöner schreiben:

$$\begin{aligned} \mathcal{S} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n T\left(\mathcal{H}'(t_1) \cdots \mathcal{H}'(t_n)\right) \\ &= T \exp\left\{-i \int_{-\infty}^{\infty} dt\, \mathcal{H}'(t')\right\} \qquad (+) \end{aligned}$$

Da $\mathcal{H}'$ proportional zu $e$ist, haben wir in (+) eine Entwicklung des $\mathcal{S}$-Operators nach Potenzen von $e = \sqrt{4\pi\alpha}$, α die Feinstrukturkonstante, vor uns: Bsp. für Streuung zweier Elektronen

Beispiel
Elektron-Elektron-Streuung (Møller-Streuung)



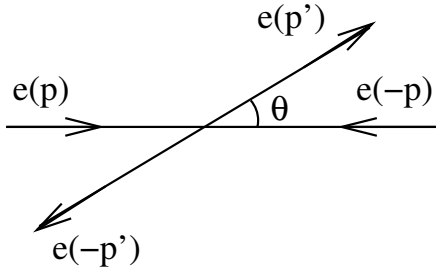
2. Ordnung in e 4. Ordnung in e

$$e^-(p_1, r_1) + e^-(p_2, r_2) \to e^-(p_3, r_3) + e^-(p_4\ r_4) \qquad (\times)$$

Schwerpunktssystem

$$p_1 = \begin{pmatrix} E \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad , \qquad p_2 = \begin{pmatrix} E \\ -\mathbf{p} \end{pmatrix}$$
$$p_3 = \begin{pmatrix} E \\ \mathbf{p}' \end{pmatrix} \quad , \qquad p_4 = \begin{pmatrix} E \\ -\mathbf{p}' \end{pmatrix}$$

Es ist $|\mathbf{p}| = |\mathbf{p}'|$.



Def.:

$$s = (p_1 + p_2)^2 = 4E^2 \quad \Rightarrow |\mathbf{p}| = \frac{1}{2}\sqrt{s - 4m^2}$$
$$t = (p_1 - p_3)^2 = -(\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2 = -4|p|^2 \sin^2\frac{\theta}{2}$$
$$u = (p_1 - p_4)^2 = -(\mathbf{p} + \mathbf{p}')^2 = -4|p|^2 \cos^2\frac{\theta}{2}$$

Vor der Streuung: $|t \to -\infty\rangle = a^+_{r_1}(\mathbf{p}_1)a^+_{r_2}(\mathbf{p}_2)|\,0\,\rangle$

Amplitude für $(\times)$:

$$\begin{aligned} S_{fi} &= \langle e(p_3, r_3)\, e(p_4, r_4)|\, \mathcal{S}\, |e(p_1, r_1)\, e(p_2, r_2)\rangle \\ &= \langle\, 0\,|\, a_{r_3}(\mathbf{p}_3)a_{r_4}(\mathbf{p}_4)\, \mathcal{S}\, a^+_{r_1}(\mathbf{p}_1)a^+_{r_2}(\mathbf{p}_2)\,|\,0\,\rangle \qquad (\times\times) \end{aligned}$$

$$\mathcal{S} = \mathbf{1}$$
trägt nichts bei zu $(\times\times)$, wenn $(p_1, r_1), (p_2, r_2) \neq (p_3, r_3), (p_4, r_4)$

$$+(-i)\int_{-\infty}^{\infty} dt' \mathcal{H}'(t')$$
trägt nichts bei zu $(\times\times)$ da nur**1** Photonen-Erzeuger bzw. -Vernichter

$$+(-i)^2 \int_{-\infty}^{t} dt' \int_{-\infty}^{t'} dt'' \mathcal{H}'(t')\mathcal{H}'(t'')$$
relevant, Ordnung e^2

$$\rightsquigarrow \quad S_{fi} = \frac{(-i)^2}{2!}\int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{\infty} dt'' \,\langle e(p_3,r_3)e(p_4,r_4)|\, T(\mathcal{H}(t')\mathcal{H}(t''))\,|e(p_1,r_1)e(p_2,r_2)\rangle$$

$$\begin{aligned}\rightsquigarrow \quad S_{fi} \;=\; & \frac{(i)^2}{2!}e^2 \int dx'dx''\,\langle\,0\,|\,a_{r_3}(\mathbf{p}_3)a_{r_4}(\mathbf{p}_4)\\ & T\left\{:\bar\psi(x')\gamma^\mu\psi(x'):\;A_\mu(x')\;:\bar\psi(x'')\gamma^\nu\psi(x''):\;A_\nu(x'')\right\}\\ & a^+_{r_1}(\mathbf{p}_1)a^+_{r_2}(\mathbf{p}_2)\,|\,0\,\rangle\end{aligned}$$

Struktur:

$$(\times) = \langle\,0\,|\,aa\,:\,(b+a^+)(b^++a)\,:\,(\alpha+\alpha^+)\,:\,(b+a^+)(b^++a)\,:\,(\alpha+\alpha^+)a^+a^+\,|\,0\,\rangle$$

Auswertung wird erleichtert durch das **Wick'sche Theorem**:
Erinnerung: $\langle\,0\,|\,a_ia_j^+\,|\,0\,\rangle = \langle\,0\,|\,\{a_i,a_j^+\} - a_j^+a_i\,|\,0\,\rangle = \{a_i,a_j\}$

$$\begin{aligned}\langle\,0\,|\,a_1a_2^+a_3a_4^+\,|\,0\,\rangle &= \langle\,0\,|\,\left(\left\{a_1,a_2^+\right\} - a_2^+a_1\right)\left(\left\{a_3,a_4^+\right\} - a_3^+a_4\right)|\,0\,\rangle\\ &= \left\{a_1,a_2^+\right\}\cdot\left\{a_3,a_4^+\right\}\\ &= \langle\,0\,|\,a_1a_2^+\,|\,0\,\rangle\,\langle\,0\,|\,a_3a_4^+\,|\,0\,\rangle\end{aligned}$$

Definition: $\langle\,0\,|a_ia_j^+|\,0\,\rangle = \underbrace{a_ia_j^+}$ ="Kontraktion"
d.h. $\langle\,0\,|\,\underbrace{a_1a_2^+}\,\underbrace{a_3a_4^+}\,|\,0\,\rangle = \underbrace{a_1a_2^+}\;\underbrace{a_3a_4^+}$

$$\begin{aligned}\langle\,0\,|\,a_1a_2a_3^+a_4^+\,|\,0\,\rangle &= \langle\,0\,|\,\left(a_1\left\{a_2,a_3^+\right\} - a_3^+a_2\right)a_4^+\,|\,0\,\rangle\\ &= \langle\,0\,|\,a_1a_4^+\,|\,0\,\rangle\left\{a_2,a_3^+\right\} - \langle\,0\,|\,a_1a_3^+a_2a_4^+\,|\,0\,\rangle\\ &= \langle\,0\,|\,a_1a_4^+\,|\,0\,\rangle\,\langle\,0\,|\,a_2a_3^+\,|\,0\,\rangle - \langle\,0\,|\,a_1a_3^+\,|\,0\,\rangle\,\langle\,0\,|\,a_3a_4^+\,|\,0\,\rangle\end{aligned}$$

d.h.

$$\begin{aligned}\langle\,0\,|\,a_1a_2a_3^+a_4^+\,|\,0\,\rangle &= \langle\,0\,|\,\underbrace{a_1\underbrace{a_2\underbrace{a_3^+}a_4^+}}\,|\,0\,\rangle + \langle\,0\,|\,\underbrace{a_1\underbrace{a_2\underbrace{a_3^+}a_4^+}}\,|\,0\,\rangle\\ &= +\underbrace{a_1a_4^+}\;\underbrace{a_2a_3^+} - \underbrace{a_1a_3^+}\;\underbrace{a_2a_4^+}\\ &\quad \text{für Fermionen! (Bosonen } \textit{kein}\; - \text{Zeichen.)}\end{aligned}$$

(3.) Wick'sches Theorem: Vakuumerwartungswert eines Produktes von Erzeugern und Vernichtern ist gleich der Summe aller Kontraktionen.

Zu S_{fi}: Die Operatoren α, α^+ aus $A_\mu(x')$ können nur mit denen aus $A_\nu(x'')$ kontrahiert werden.

Bei Kontraktion der Fermi-Operatoren erhalten wir keinen Beitrag, wenn ein Operator aus $\psi(x')$ mit einem aus $\bar\psi(x'')$ verbunden ist, denn dann tritt auch mindestens eine Kontraktion eines einlaufenden mit einem auslaufenden Elektronenoperator auf, die wegen $(p_1,r_1),(p_2,r_2) \neq (p_3,r_3),(p_4,r_4)$ verschwindet.

$\Rightarrow$ Nur Beiträge von Kontraktion der ein- bzw. auslaufenden Elektronen mit den Feldoperatoren ψ bzw. $\bar{\psi}$. (z.B. $a^+_{r_1}(\mathbf{p}_1)$ mit $\psi(x')$ und $\psi(x'')$ etc.)

$$
\begin{aligned}
\mu &= \langle\, 0 \,|\, a(\mathbf{p}_3)a(\mathbf{p}_4)\ :\ \overline{\psi}(x')\gamma^\mu\psi(x')\ ::\ \overline{\psi}(x'')\gamma^\nu\psi(x'')\ :\ a^+(\mathbf{p}_1)a^+(\mathbf{p}_2)\,|\,0\,\rangle \\
&= a(\mathbf{p}_3)a(\mathbf{p}_4):\overline{\psi}(x')\gamma^\mu\psi(x'):\,:\overline{\psi}(x'')\gamma^\nu\psi(x''):a^+(\mathbf{p}_1)a^+(\mathbf{p}_2) \\
&\quad + a(\mathbf{p}_3)a(\mathbf{p}_4):\overline{\psi}(x')\gamma^\mu\psi(x'):\,:\overline{\psi}(x'')\gamma^\nu\psi(x''):a^+(\mathbf{p}_1)a^+(\mathbf{p}_2) \\
&\quad + a(\mathbf{p}_3)a(\mathbf{p}_4):\overline{\psi}(x')\gamma^\mu\psi(x'):\,:\overline{\psi}(x'')\gamma^\nu\psi(x''):a^+(\mathbf{p}_1)a^+(\mathbf{p}_2) \\
&\quad + a(\mathbf{p}_3)a(\mathbf{p}_4):\overline{\psi}(x')\gamma^\mu\psi(x'):\,:\overline{\psi}(x'')\gamma^\nu\psi(x''):a^+(\mathbf{p}_1)a^+(\mathbf{p}_2) \\
&= \Big\{\bar{u}(p_4)e^{ip_4x'}\gamma^\mu u(p_1)e^{-ip_1x'}\cdot\bar{u}(p_3)e^{ip_3x''}\gamma^\nu u(p_2)e^{-ip_2x''} \\
&\quad -(1\leftrightarrow 2)-(3\leftrightarrow 4)+(1\leftrightarrow 2,3\leftrightarrow 4)\Big\}\,.
\end{aligned}
$$

Kontraktionen von Fermi-Operatoren liefern für $x'_0 > x''_0$ und $x''_0 > x'_0$ dasselbe, also

$$
\begin{aligned}
S_{fi} &= (ie)^2\int dx'\,dx''\,\langle 0|\,T\left(A_\mu(x')A_\gamma(x'')\right)|0\rangle \\
&\quad \Big\{\theta(x'_0-x''_0)\,\langle 0|\,A_\mu(x')A_\nu(x'')\,|0\rangle + \theta(x''_0-x'_0)\,\langle 0|\,A_\mu(x'')A_\nu(x')\,|0\rangle\Big\}\cdot \\
&\quad \Big\{\bar{u}(p_4)\gamma^\mu u(p_1)e^{i(p_4-p_1)x'}\cdot\bar{u}(p_3)\gamma^\nu u(p_2)e^{i(p_3-p_2)x''} \\
&\quad -(1\leftrightarrow 2)-(3\leftrightarrow 4)+(1\leftrightarrow 2,3\leftrightarrow 4)\Big\}\,.
\end{aligned}
$$

Zusammenfassung von Termen, die sich bloß durch Bezeichnung der Integrations- und Summationsintervalle unterscheiden:

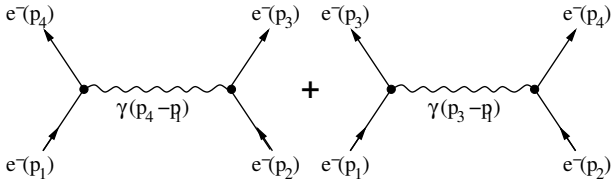
$$
\begin{aligned}
S_{fi} &= (ie)^2\int dx'dx''\,\langle 0|\,T(A_\mu(x')A_\nu(x''))\,|0\rangle\cdot \leftarrow \text{Propaganda-Funktion des Photonenfeldes} \\
&\quad \Big\{\bar{u}(p_4)\gamma^\mu u(p_1)\bar{u}(p_3)\gamma^\nu u(p_2)e^{i(p_4-p_1)x'}e^{i(p_3-p_2)x''} \\
&\quad -\bar{u}(p_3)\gamma^\mu u(p_1)\bar{u}(p_4)\gamma^\nu u(p_2)e^{i(p_3-p_1)x'}e^{i(p_4-p_2)x''}\Big\}
\end{aligned}
$$

Wegen

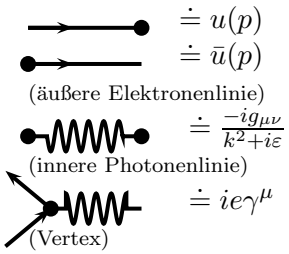
$$
\langle 0|\,T(A_\mu(x')A_\nu(x''))\,|0\rangle = \int\frac{dk}{(2\pi)^4}\,e^{-ik(x-y)}\frac{-ig_{\mu\nu}}{k^2+i\varepsilon}\qquad(\varepsilon\to 0)
$$

lassen sich die Integrale über x' und x'' leicht anführen und ergeben δ-Funktion für Viererimpulse

$$
\begin{aligned}
\Rightarrow S_{fi} &= i(2\pi)^4\delta(p_4+p_3-p_2-p_1)T_{fi} \\
T_{fi} &= \frac{1}{i}\Big\{\bar{u}(p_4)(ie\gamma^\mu)u(p_1)\frac{-ig_{\mu\nu}}{(p_4-p_1)^2}\bar{u}(p_3)(ie\gamma^\nu)u(p_2) \\
&\quad -\bar{u}(p_3)(ie\gamma^\mu)u(p_1)\frac{-ig_{\mu\nu}}{(p_3-p_1)^2}\bar{u}(p_4)(ie\gamma^\nu)u(p_2)\Big\}\,.
\end{aligned}
$$



An jedem Vertex gilt Vierer-Impuls-Erhaltung.



Zur Berechnung des Streuquerschnitts aus der Amplitude:

$$\boxed{d\sigma = \frac{\text{Übergangsrate nach } p_3, p_4}{\text{Fluss der einlaufenden Teilchen}} = \frac{dw_{fi}/T}{\phi}}$$

$$dw_{fi} = \underbrace{\frac{1}{2p_1^0\, 2p_2^0}\left(\frac{1}{V}\right)^2}_{\substack{\text{von der Normierung}\\ \text{d. einlaufenden}\\ \text{Elektronen-Zust.}}} \cdot \underbrace{\frac{d^3p_3\, d^3p_4}{(2\pi)^6\, 2p_3^0\, 2p_4^0}}_{\substack{\text{Lorentz-inv.}\\ \text{Volumenelement}\\ \text{im } (p_3/p_4)\text{-Raum}}} \underbrace{\sum_{\text{Spins}}{}'}_{\substack{\text{Mittelung / Summation}\\ \text{über Spinrichtung d.}\\ \text{Elektronen im}\\ \text{Anfangs / Endzustand.}}} \left[(2\pi)^4\, \delta(p_1+p_2-p_3-p_4)\, |T_{fi}|\right]^2$$

Das Quadrat der δ-Fktn interpretiert man mit Fermi's Trick:

$$\left[(2\pi)^4\, \delta(p_1+p_2-p_3-p_4)\right]^2 = \int_{V,T} dx\, e^{i(p_1+p_2-p_3-p_4)x}\, (2\pi)^4\, \delta(p_1+p_2-p_3-p_4)$$

V, T ← großes aber endl. Vol. V, große aber endl. Zeit T

$$= V\cdot T\, (2\pi)^4\, \delta(p_1+p_2-p_3-p_4)$$

$$\Rightarrow \frac{dw_{fi}}{T} = \frac{1}{V}\, \frac{1}{2p_1^0 2p_2^0}\, (2\pi)^4\, \delta(p_1+p_2-p_3-p_4)\, \frac{d^3p_3\, d^3p_4}{(2\pi)^6\, 2p_3^0 2p_4^0} \sum_{\text{Spins}}{}' |T_{fi}|^2$$

Fluss d. einlaufenden Teilchen: ϕ

wähle als Bezugssystem das Ruhesystem von e_2 (finale Formel wird Lorentz-invariant sein)

$$\phi = \frac{1}{V}\, |v_1| \quad \text{mit} \quad |v_1| = \frac{|\underline{p}_1|}{p_1^0} \qquad p_1 = \begin{pmatrix} E_1 \\ \underline{p}_1 \end{pmatrix}, \quad p_2 = \begin{pmatrix} m_2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$\frac{1}{V}$: Normierung d. einl. Zustands; $|v_1|$: Geschw. v. Teilchen 1

Def. Schwerpunktsenergie: $s := (p_1+p_2)^2 = p_1^2 + p_1\cdot p_2 + p_2^2 = m_1^2 + 2m_2E_1 + m_2^2$

$$\Rightarrow E_1 = (s - m_1^2 - m_2^2)/2m_2$$

$$\rightsquigarrow |\underline{p}_1| = \sqrt{E_1^2 - m_1^2} = \frac{1}{2m_2}\left\{(s-m_1^2-m_2^2)^2 - 4m_1^2m_2^2\right\}^{1/2}$$

$$= \frac{1}{2m_2}\left\{s^2 + m_1^4 + m_2^4 - 2sm_1^2 - 2sm_2^2 - 2m_1^2m_2^2\right\}$$

$$=: \frac{1}{2m_2}\, w(s, m_1^2, m_2^2) \qquad \text{mit } \boxed{w(x,y,z) = \{x^2+y^2+z^2 - 2xy - 2xz - 2yz\}^{1/2}}$$

$m_2 = p_2^0$

$$\Rightarrow \phi = \frac{1}{V}\, \frac{1}{p_1^0}\, \frac{w(s,m_1^2,m_2^2)}{2p_2^0}$$

$$\Rightarrow \boxed{d\sigma = \frac{1}{2w(s,m_1^2,m_2^2)}\, \frac{d^3p_3\, d^3p_4}{(2\pi)^6\, 2p_3^0 2p_4^0}\, (2\pi)^4\, \delta(p_1+p_2-p_3-p_4) \sum_{\text{Spins}}{}' |T_{fi}|^2} \quad (*)$$

Nun ist

$$\sum_{\text{Spins}}{}' |T_{fi}|^2 = \sum_{\text{Spins}}{}' T_{fi}^* T_{fi}$$

$$= \sum_{\text{Spins}}{}' \left\{ \frac{1}{(p_4-p_1)^2} \bar{u}(p_2)\gamma_\mu u(p_3)\, \bar{u}(p_1)\gamma^\mu u(p_4) - \frac{1}{(p_3-p_1)^2} \bar{u}(p_1)\gamma_\mu u(p_3)\, \bar{u}(p_2)\gamma^\mu u(p_4) \right\}$$

$$\cdot \left\{ \frac{1}{(p_4-p_1)^2} \bar{u}(p_4)\gamma_\nu u(p_1)\, \bar{u}(p_3)\gamma^\nu u(p_2) - \frac{1}{(p_3-p_1)^2} \bar{u}(p_4)\gamma_\nu u(p_1)\, \bar{u}(p_3)\gamma^\nu u(p_1) \right\}$$

$\leftarrow$ mit $\sum_{s=\pm 1/2} u_s(p)\bar{u}_s(p) = \not{p} + m = p^\mu\gamma_\mu + m$ und $\boxed{\begin{array}{l} u := (p_4-p_1)^2 \\ t := (p_3-p_1)^2 \end{array}}$

$$= \frac{e^4}{4} \left\{ \frac{1}{u^2} \mathrm{Sp}\left[(\not{p}_2+m)\gamma_\mu(\not{p}_3+m)\gamma_\nu\right] \cdot \mathrm{Sp}\left[(\not{p}_1+m)\gamma^\mu(\not{p}_4+m)\gamma^\nu\right] \right.$$

$$\left. - \frac{1}{tu} \mathrm{Sp}\left[(\not{p}_2+m)\gamma_\mu(\not{p}_3+m)\gamma_\nu(\not{p}_1+m)\gamma^\mu(\not{p}_4+m)\gamma^\nu\right] + (3 \leftrightarrow 4) \right\}$$

Es ist $\mathrm{Sp}\left[(\not{p}_2+m)\gamma_\mu(\not{p}_3+m)\gamma_\nu\right] = 4(g_{\mu\nu}m^2 + p_{2\mu}p_{3\nu} + p_{2\nu}p_{3\mu} - g_{\mu\nu}p_2\cdot p_3)$

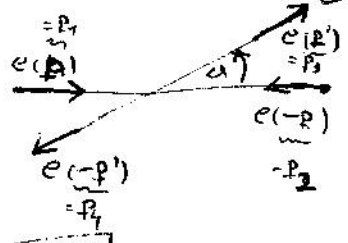
und $\mathrm{Sp}\left[(\not{p}_2+m)\gamma_\mu(\not{p}_3+m)\gamma_\nu(\not{p}_1+m)\gamma^\mu(\not{p}_4+m)\gamma^\nu\right]$

$$= 16\left(-2p_1\cdot p_2\, p_3\cdot p_4 + m^2 p_1\cdot p_3 + m^2(p_1+p_3)\cdot(p_2+p_4) + m^2 p_2\cdot p_4 - 2m^4\right)$$

(Übg.) Nach einiger Achg. ergibt sich unter Verwendung v. s, u und t:

$$\sum{}' |T_{fi}|^2 = \frac{64\pi^2\alpha^2}{t^2u^2}\left\{(s-2m^2)^2(t^2+u^2) + ut(-4m^2s + 12m^4 + ut)\right\}$$

Zähler $\boxed{\sqrt{4}}$



Einsetzen in (*) ergibt im Schwerpunktsvariablen

$$d\sigma = d\Omega \int_0^\infty d|p_3|\, |p_3|^2 \int d^3p_4 \frac{1}{2[s(s-4m^2)]^{1/2}} \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{2p_3^0 2p_4^0}$$
$$\delta(\sqrt{s} - p_3^0 - p_4^0)\, \delta^3(p_3+p_4) \sum{}' |T_{fi}|^2$$

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha^2}{st^2u^2}\left\{(s-2m^2)^2(t^2+u^2) + ut(-4m^2s + 12m^4) + ut\right\}}$$ (Møller 1932)

$$E = \sqrt{s}/2, \quad t = -4|p_1|^2 \sin^2\vartheta/2, \quad u = -4|p_1|^2\cos^2\frac{\vartheta}{2}$$

Kinematische Grenzen von ϑ bzw. t:

Quantenmechanisch sind die beiden Elektronen im Anfangs- und Endzustand als identische Teilchen anzusehen. Die Frage, ob das von rechts oder von links laufende Elektron den unter dem Winkel ϑ aufgestellten Zähler trifft, ist sinnlos.
Wir können nur feststellen, daß ein Elektron unter dem Winkel ϑ, eines unter dem Winkel $\pi-\vartheta$ vom Wechselwirkungspunkt wegfliegt

$\Rightarrow$ $\boxed{0 \le \vartheta \le \frac{\pi}{2}}$ erfasst schon alle verschiedenen Endzustände. $\Rightarrow$ $\boxed{0 \ge t \ge -\frac{1}{2}(s-4m^2)}$

Nichtrelativistischer Grenzfall:

$|\vec{p}| \ll m$:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha^2 m^2}{16 |\vec{p}|^4} \left\{ \underbrace{\frac{1}{\sin^4 \vartheta/2} + \frac{1}{\cos^4 \vartheta/2}}_{\hat{=}\text{ klassische Rutherford-Streuformel}} - \underbrace{\frac{1}{\sin^2 \vartheta/2 \cos^2 \vartheta/2}}_{\text{QM Zusatzterm v. Interferenz der beiden Elektronen}} \right\}$$

(Mott 1930)

Zusatzterm kommt v. QM - Addition der Amplituden, die den beiden Feynman-Diagrammen entsprechen, und anschließender Betrags-Bildung um Streuquerschnitt zu berechnen. Vorzeichen wird bestimmt durch die Fermi-Statistik der Elektronen, d.h. Bosonen würde es positiv.

Extrem relativistischer Grenzfall

$|\vec{p}| \gg m$:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha^2}{s} \left\{ \frac{1}{\sin^4 \vartheta/2} + \frac{1}{\cos^4 \vartheta/2} + 1 \right\}$$

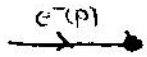
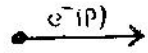
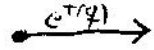
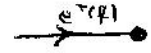
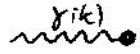
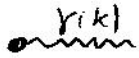
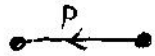
$$= \frac{\alpha^2}{s} \frac{(3 + \cos^2 \vartheta)^2}{\sin^4 \vartheta}$$

n.b.: $s \cdot \frac{d\sigma}{d\Omega}$ hängt nicht mehr von s ab $\Rightarrow$ Skalenverhalten des Streuquerschnitts.

Skalenverhalten wird als Anzeichen f. die punktförmige Natur der Elektronen gedeutet. Hätte nämlich das Elektron eine „Ausdehnung" der Größe $r = 1/\Lambda$, so würde man erwarten, daß $s \cdot \frac{d\sigma}{d\Omega}$ eine nichttriviale Funktion der dimensionslosen Variablen s/Λ^2 wäre, d.h. $s \cdot \frac{d\sigma}{d\Omega}$ wäre nicht unabh. v. s

Vorhersage d. Theorie f. Elektron-Elektron-Streuung wurden im Experiment durchweg bestätigt.

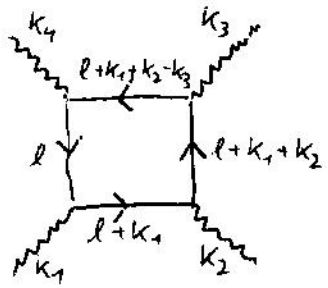
Zusammenstellung der Feynman-Regeln der QED:

physikal. Gegebenheit	analyt. Ausdruck	Diagrammteil
Elektron im Anfangszustand	$u(p)$	einlaufende E-Linie 
Elektron im Endzustand	$\bar{u}(p)$	auslaufende E-Linie 
Positron im Anfangszustand	$\bar{v}(q)$	auslaufende E-Linie 
Positron im Endzustand	$v(q)$	einlaufende E-Linie 
Photon im Anfangszustand	ϵ^{μ}	einlaufende Photon-Linie 
Photon im Endzustand	$\epsilon^{\mu *}$	auslaufende Photon-Linie 
virtuelles Photon	$\frac{-i g_{\mu\nu}}{k^2 + i\epsilon}$	innere Photon-Linie
virtuelles Elektron	$i\,\frac{\not{p} + m}{p^2 - m^2 + i\epsilon}$	innere E-Linie 
Elementarprozess	$ie\gamma^{\mu}$	Vertex

Übergangsamplitude für eine bestimmte Reaktion ergibt sich als Summe aller Diagramme mit vorgegebenen ein- und auslaufenden Linien.
Im Inneren der Diagramme sind beliebig viele Vertizes zugelassen.
An jedem Vertex gilt Viererimpulserhaltung $\Rightarrow$ 4-Impuls-Erhaltung im Ganzen (Σ einl. p = Σ ausl. p).

Bsp. f. Photon-Photon-Streuung

$\gamma(k_1) + \gamma(k_2)$
$\rightarrow \gamma(k_3) + \gamma(k_4)$

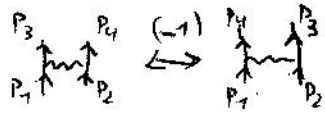


Schleifenimpuls ist l, über Schleifenimpulse ist stets zu integrieren mit Maß $\int \frac{dl}{(2\pi)^4}$

Für S-Matrix-Element ist noch ein Faktor f. Energie-Impulserhaltung hinzuzufügen: $(2\pi)^4 \delta\left(\sum_f p_f - \sum_i p_i\right)$, p_f Impulse auslaufender T., p_i —"— ein —"—

Faktor (-1) für jede geschlossene Fermionenschleife.
Permutationen äußerer Impulse v. Fermionen
$\rightarrow$ Signum der Permutation

z.B.

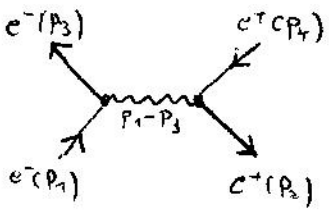


Elektron – Positron – Streuung (Bhabha-Streuung)

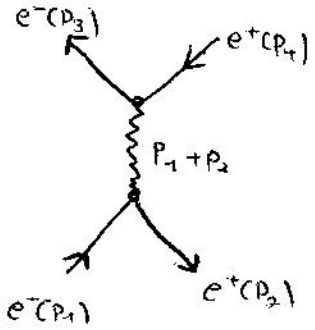
$$e^-(p_1) + e^+(p_2) \longrightarrow e^-(p_3) + e^+(p_4)$$

kinematisch dieselbe wie bei Elektron–Elektron-Streuung

Diagramme niedrigster Ordnung:



"Streuung"



"Annihilation"

Streuung: $(p_1-p_3)^2 \leq 0$

Annihil. $(p_1+p_2)^2 \geq 4m^2$

Für unpolarisierte Elektronen und Positronen im extrem relativistischen Grenzfall in Schwerpunktsvariablen:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha^2}{2}\left\{\frac{1}{2}\,\frac{1+\cos^4\vartheta/2}{\sin^4\vartheta/2} + \frac{1}{4}(1+\cos^2\vartheta) - \frac{\cos^4\vartheta/2}{\sin^2\vartheta/2}\right\}$$

$$= \frac{\alpha^2}{16s}\,\frac{(3+\cos^2\vartheta)^2}{\sin^4\vartheta/2} \qquad \text{f. } s \gg 4m^2$$

zwei unterscheidbare Teilchen im Anfangs- und Endzustand $\Rightarrow$ kinematischer Bereich

$\Rightarrow 0 \leq \vartheta < \pi$.

Studium der Bhabha-Streuung am Speicherring PETRA.

Höchste Schwerpunktenergie $\sqrt{s} \approx 45$ GeV.

Übereinstimmung v. Experiment u. Theorie sehr gut.

Angenommen, QED würde bei einer Energieskala Λ modifiziert

dann für $s \ll \Lambda^2$: $\frac{d\sigma}{d\Omega} \Big/ \frac{d\sigma^{QED}}{d\Omega} = 1 + O\left(\frac{s}{\Lambda^2}\right)$

Experimentelle Genauigkeit: $s \approx 10^3\,\text{GeV}^2 \Rightarrow s/\Lambda^2 \lesssim 0.05$

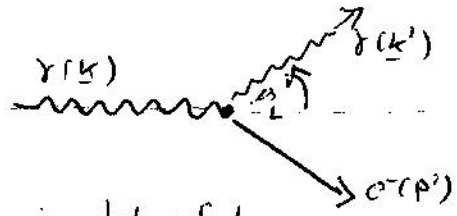
d.h. $\Lambda \gtrsim 150$ GeV

bzw. $1.3 \cdot 10^{-16}$ cm.

Aber: In diesem Energiebereich muss QED bereits durch elektroschwache WW ersetzt werden.

Compton - Streuung

$\gamma(k) + e^-(p) \rightarrow \gamma(k') + e^-(p')$



im Labor-System.

↑

Elektron ruht im Laborsystem.

$p = \begin{pmatrix} m \\ 0 \end{pmatrix}$, $p' = \begin{pmatrix} \sqrt{m^2 + p'^2} \\ \underline{p}' \end{pmatrix}$ $\qquad \omega = |\underline{k}|, \quad \omega' = |\underline{k}'|$

$k = \begin{pmatrix} \omega \\ \underline{k} \end{pmatrix}$, $k' = \begin{pmatrix} \omega' \\ \underline{k}' \end{pmatrix}$

Energie-Erh.: $m + \omega = \sqrt{m^2 + p'^2} + \omega'$

Impuls-Erh.: $\underline{k} = \underline{p}' + \underline{k}'$

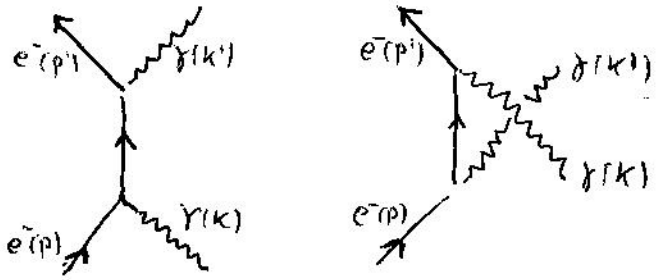
$\Rightarrow m + \omega = \sqrt{m^2 + (\underline{k} - \underline{k}')^2} + \omega'$

$\frac{\omega - \omega'}{\omega\omega'} = \frac{1}{m}(1 - \cos\vartheta_L) \quad \Rightarrow \quad \omega' = \omega\left[1 + \frac{\omega}{m}(1 - \cos\vartheta_L)\right]^{-1}$

bzw. $\lambda' - \lambda = \frac{2\pi}{m}(1 - \cos\vartheta_L)$ $\qquad$ exp. $\rightarrow$ Compton

$1/m \hat{=}$ Wellenlänge $= 3.86 \cdot 10^{-11}$ cm.

Feynman-Graphen niedrigster Ordg. f. den Streuquerschnitt:



unpolarisierte Elektronen und Photonen:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_L} = \frac{\alpha^2}{2} \frac{1}{[m + \omega(1 - \cos\vartheta_L)]^2} \cdot \left\{ \frac{\omega^2(1 - \cos\vartheta_L)^2}{m[m + \omega(1 - \cos\vartheta_L)]} + 1 + \cos^2\vartheta_L \right\}$$

(Klein, Nishina 1929)

nichtrel. Grenzfall; $\omega \ll m$: $\omega' = \omega$, $\frac{d\sigma}{d\Omega_L} = \frac{\alpha^2}{m^2} \frac{1 + \cos^2\vartheta_L}{2}$, $\sigma_{tot} = \frac{8\pi}{3} \frac{\alpha^2}{m^2}$

Extrem relativ. Fall $\omega \gg m$ bzw. $\lambda \ll 1/m$:

$1 - \cos\vartheta_L \ll \frac{m}{\omega} \quad \Rightarrow \quad \lambda' \approx \lambda, \quad \frac{d\sigma}{d\Omega_L} \approx \frac{\alpha^2}{m^2}$

$1 - \cos\vartheta_L \gg \frac{m}{\omega} \quad \Rightarrow \quad \lambda' \approx \frac{2\pi}{m}(1 - \cos\vartheta_L)$ ← unabh. v. d. Wellenlänge des einlaufenden Photons.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_L} \approx \frac{\alpha^2}{2m\omega(1 - \cos\vartheta_L)} \propto \frac{1}{\omega}$$

Bem. Elektron-Positron-Annihilation $e^- + e^+ \rightarrow \gamma + \gamma$
$\hat{=}$ "Hintereinanderausführen" v. Teilchen i. d. Compton-Streuung.

Probleme mit äußeren Feldern

Bisher: Reaktionen im Vakuum.

I.d. Praxis oft vorgegebene äußere Felder (Kondensatoren, Elektromagneten, Atomkerne).

Bsp.: (1) Streuung eines Elektrons an vorgegebener Ladungsverteilung (z.B. schwerer Kern)

(2) Emission v. Synchrotronstrahlung eines Elektrons im Speicherring

(3) Emission v. Bremsstrahlung eines Elektrons, das im Feld eines Kerns abgebremst wird → Erzeugung von Röntgenstrahlen in Röntgenröhren

(4) Erzeugung eines Elektron-Positron-Paares durch ein Photon im Feld eines schweren Kerns → Entdeckung des Positrons (Anderson, 1932)
Dient heute i.d. Hochenergiephysik zum exp. Nachweis v. Photonen.

Ausgangspunkt: $H'(t) = \int d^3x \; j^\mu(\underline{x},t)\, A_\mu(\underline{x},t)$

$$A_\mu(\underline{x},t) = \underbrace{A'_\mu(\underline{x},t)}_{\text{Quantenfeld}} + \underbrace{A^{ext}_\mu(\underline{x},t)}_{\text{äußeres Potential}}$$

A^{ext}_μ hat als Quellen die äußeren Ladungen und Ströme: j^{ext}_μ

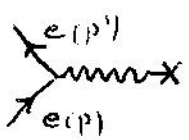
es mit Lorentz-Bed.: $\Box A^{ext}_\mu(x) = j^{ext}_\mu(x)$
$\partial^\mu A^{ext}_\mu(x) = 0$

Wieder Dirac- od. ww-Bild: $i\frac{\partial}{\partial t}|t\rangle = H'(t)\,|t\rangle$

Struktur v. H': $H' \sim :(b^+ + a^-)(b^+ + a):\, A^{ext}$
$\sim -b^+ b\, A^{ext} + a^+ b^+ A^{ext} + b a\, A^{ext} + a^+ a\, A^{ext}$
(4') (3') (2') (1')

Interpretation:
(1') Streuung eines Elektrons am äußeren Potential
(2') Vernichtung eines Elektron-Positron-Paares durch äußeres Potential
(3') Erzeugung " "
(4') Streuung eines Positrons am äußeren Potential

Diagrammatische Veranschaulichung:



≙ Feynman-Regel: $ie\gamma^\mu \int dx\, e^{i(p'-p)x} A^{ext}_\mu(x)$
$= -ie\gamma^\mu \frac{1}{(p-p')^2} \int dx\, e^{i(p'-p)x} \cdot j^{ext}_\mu(x)$

Tritt ein solcher Vertex im Diagramm auf, ist die δ-Fkt. der Energie-Impulserhaltung im S-Matrix-Element wegzulassen.

Strahlungskorrekturen / Renormierung

Bisher: Reaktionen i. d. QED in niedrigster Ordg.,
Resultate endlich, gute Übereinstimmung mit dem Exp.

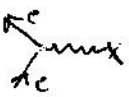
Aber: Terme höherer Ordg. i. d. Theorie vorhanden
Bei Präzisionsmessungen zu berücksichtigen.

Bei Berechnung höherer Ordnungen, den sog. Strahlungskorrekturen, treten Unendlichkeiten auf.

Systematisches Verfahren zur Berechnung höherer Ordg. mit endlichem Resultat:

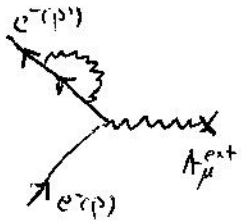
Renormierung

Bsp. Streuung eines Elektrons am äußeren Potential

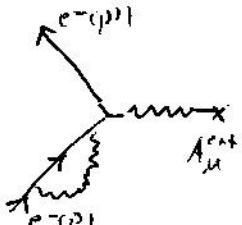
Niedrigste Ordg.  ok

Nächste Ordg.:

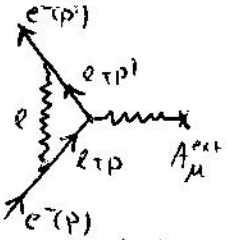
(+)



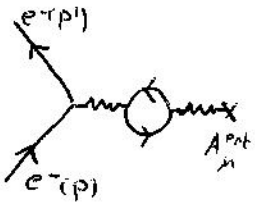
(a)



(b)



(c)



(d)

Betrachte Diagramm (c):
Nach den Feynman-Regeln ist über den Schleifenimpuls zu integrieren:
Schematisch (f. d. Amplitude):

$$A^{(c)} \sim \int d^4\ell \; \frac{1}{\ell^2} \; \frac{\not p + \not\ell + m_e}{p^2 + 2p\ell + \ell^2 - m_e^2} \; \frac{\not p' - \not\ell + m_e}{p'^2 - 2p'\ell + \ell^2 - m_e^2}$$

Integral divergiert für $\ell \to \infty$ logarithmisch ($\int d^4\ell \frac{1}{\ell^2}\frac{\ell}{\ell^2}\frac{\ell}{\ell^2}$)
→ "Ultraviolett-Katastrophe"

Integrale divergiert sogar für $\ell \to 0$ wg. $p^2 = p'^2 = m_e^2$ folgt $A^{(c)} \underset{\ell\to 0}{\sim} \int d^4\ell \frac{1}{\ell^2}\frac{1}{p\ell}\frac{1}{p'\ell}$
→ "Infrarot-Katastrophe"

Infrarot-Katastrophe lässt sich einfach beheben (Vorsicht: "weiche Photonen").

Quantenmech. Überlegung zur Infrarot-Divergenz:

Was beobachten wir, wenn wir sagen, ein Detektor hat ein Elektron angezeigt?

→ endl. Energieauflösung ΔE

Exp. nicht unterscheidbar, ob Elektron isoliert oder begleitet von sehr "weichen" Photon mit Energie $\omega \leq \Delta E$

$$\Rightarrow \sigma_{exp} = \sigma(1 \text{ Elektron}) + \sigma(1 \text{ Elektron} + 1 \text{ Photon der Energie } \omega \leq \Delta E) + \sigma(1 \text{ Elektron} + 2 \text{ Photonen mit Ges.-Energie} \leq \Delta E) \ldots \quad (*)$$

Rechg. ergibt

$$\sigma(1 \text{ Elektron} + 1 \text{ Photon mit Energie } \omega \text{ mit } \omega_{min} \leq \omega \leq \Delta E) \propto \delta \left(\ln \frac{\Delta E}{\omega_{min}} \xrightarrow[\omega_{min} \to 0]{} \infty\right) \quad (**)$$

Theorie soll endliche Resultate für beobachtbare Größen liefern.

Ist der Fall, wenn Streuquerschnitt über Endzustände in (*) summiert endlich ist.

Rechg zeigt:
In jeder Ordg. in α heben sich die Infrarot-Divergenzen in $\sigma(1 \text{ Elektron})$ in den Diagrammen (+) etc. gegen die Infrarot-Divergenzen in (**) weg.

Um in den Zwischenschritten keine Probleme mit infrarotdivergenten Integralen zu haben, führt man eine kleine Photonenmasse ein, die im Endresultat gleich Null gesetzt werden kann. Dieses Endresultat enthält dann auch die Auflösung ΔE des Apparats.

Bewältigung der Ultraviolett-Katastrophe schwieriger → Inhalt der Renormierungstheorie

Grundidee:

Mit divergenten Integralen kann man nichts anfangen
→ müssen per Hand endlich gemacht werden, d.h. regularisiert werden.

Verschiedene Regularisierungsverfahren sind vorgeschlagen worden:

z.B.: Man kann alle divergenten Integrale bei einem Abschneideparameter Λ abbrechen:

$$\int d\ell \, \frac{1}{\ell^2} \, \frac{1}{\not p + \not \ell - m} \, \frac{1}{\not p' - \not \ell - m} \longrightarrow \int_{|\ell| \leq \Lambda} d\ell \, \frac{1}{\ell^2} \, \frac{1}{\not p + \not \ell - m} \, \frac{1}{\not p' - \not \ell - m}$$

Resultate hängen dann logarithmisch v. Λ ab.

(andere Abschneideverfahren: Regularisierung nach Pauli-Villars, } lassen i. QED
dimensionale Regularisierung)

Nach der Regularisierung hat man eine Theorie, in der alles endlich ist.
Parameter der Theorie:

$$e_0 \; , \; m_0 \; , \; \Lambda$$

Ladungs- Masse- Parameter des Elektrons
(wie in der Hamilton-Fkt. bzw. den Feynmann-Regeln).

Grundlage der Renormierungstheorie:

e_0 und m_0 sind nicht identisch mit der beobachtbaren Ladung e und Masse m des Elektrons!

Wie misst man die Ladung des Elektrons?
z.B. im Magnetfeld über

$$\underline{K} = (-e)\,(\underline{v} \times \underline{B}) \qquad (xxx)$$

Im Rahmen der QED: Streuung eines Elektrons an einem äußeren Potential.
Rechg. mit der regularisierten Theorie liefert tatsächlich eine Kraft der Gestalt (xxx), aber es gilt $e \neq e_0$; es ergibt sich (mit Konst. a_1, a_2 etc.):

$$e = e_0\left(1 + a_1 e_0^2 \ln\frac{\Lambda}{m_0} + a_2 e_0^4 \left(\ln\frac{\Lambda}{m_0}\right)^2 + \dots\right) \qquad (e)$$

Analog findet man für die beobachtbare Masse m (mit Konst. $b_1, b_2, \dots$)

$$m = m_0\left(1 + b_1 e_0^2 \ln\frac{\Lambda}{m_0} + \dots\right) \qquad (m)$$

Im Limes $\Lambda \to \infty$ scheinen e und m zu divergieren $\Rightarrow$ sinnlos.

Ausweg: e_0 und m_0 haben bloß mathematische Existenz
Berechne den Limes $\Lambda \to \infty$ so, daß beobachtbare Größen e, m festgehalten und die mathematischen Parameter e_0, m_0 mit Λ variieren.
$\Rightarrow$ Ursprüngliche Größen e_0, m_0 divergieren f. $\Lambda \to \infty$, irrelevant, da nicht beobachtbar.

$\Rightarrow$ Programm: Berechne eine Übergangsamplitude A mit Hilfe der uns bekannten Technik in der regularisierten Theorie als Fktn. F der "nackten" Parameter e_0, m_0 und Λ (dem Abschneideparameter):

$$A = F(e_0, m_0, \Lambda, \dots) \qquad (A)$$

(äußere Impulse u. Polarisationen)

Durch Inversion von (e) und (m) denken wir uns die nackten ("bare") Parameter durch die physikalischen ausgedrückt:

$$e_0 = e_0(e, m, \Lambda)$$
$$m_0 = m_0(e, m, \Lambda)$$

Einsetzen in (A) ergibt A als Fktn. der Parameter e, m, Λ:

$$A = F(e_0(e,m,\Lambda), m_0(e,m,\Lambda), \Lambda, \dots)$$

jetzt $\Lambda \to \infty$, dabei e und m festgehalten.

Zentrales Theorem der Renormierungstheorie:

Der Limes der Entwicklung nach e existiert in allen Ordnungen.
(u.U. nach Abspaltung eines geeigneten Skalenfaktors Z, der nicht von äußeren Impulsen abh.)

Wir definieren die renormierte Amplitude A' als Funktion F' der physikalischen Parameter e, m und der äußeren Variablen:

$$A' = \lim_{\Lambda \to \infty} Z(e,m,\Lambda)\, F(e_0(e,m,\Lambda), m_0(e,m,\Lambda), \Lambda, \dots)$$
$$= F'(e, m, \dots)$$

Renormierungstheorie liefert eine Entwicklung der renormierten Amplituden nach Potenzen v. e:

$$F'(e,m,\dots) = F_0'(m,\dots) + e F_1'(m,\dots) + e^2 F_2'(m,\dots) + \dots$$

wobei alle F_i' endl. sind.

Über Konvergenz der Reihe ist nichts ausgesagt (meist nicht Konvergent sondern asymptotisch)

Mathematische Durchführung i. A. verwickelt.
Theorie ist durch Exp. glänzend bestätigt.

Grundlagen der starken WW / Quantenchromodynamik

Hadronen ($p, n, \pi^+, \pi^0, \pi^-, \Lambda, \Sigma^{+,0,-}, K, \ldots$) sind zusammengesetzte Teilchen, die fundamentalen Teilchen sind <u>Quarks</u>

daher Mesonen $\sim q\bar{q}$ (Quark-Antiquark)

Baryonen $\sim qqq$ (3-Quark-Zustände)

zunächst postulierte man 3 verschiedene Quarks <u>Quark-Flavors</u>

	Name	Spin	Ladung	Baryonenzahl	Strangeness
u	"up"	$1/2$	$2/3$	$1/3$	0
d	"down"	$1/2$	$-1/3$	$1/3$	0
s	"strange"	$1/2$	$-1/3$	$1/3$	-1
⋮					

z.B. für π- und K-Mesonen:

$\pi^+ \sim u\bar{d}$

$\pi^0 \sim \frac{1}{\sqrt{2}}(u\bar{u} - d\bar{d})$

$\pi^- \sim d\bar{u}$

$K^+ \sim u\bar{s}$

$K^0 \sim d\bar{s}$

und 3-Baryonen: $p \sim (uud)_g$, $n \sim (ddu)_g$, $\Lambda \sim (uds)_g$

Das Ω^--Teilchen (3-Baryonen) hat Spin $-3/2$ und Strangeness $S = -3$

$$\Rightarrow \Omega^-\left(\tfrac{3}{2}, \tfrac{3}{2}\right) \sim \underbrace{\uparrow s \uparrow s \uparrow s}_{\text{total symm.}} \underbrace{\psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \underline{r}_3)}_{\text{Ortswellenfkt. der 3 Quarks, Bahndrehimpuls } \emptyset \Rightarrow \text{ total symm.}}$$

Das wäre eine total symmetrische Wellenfkt. für Teilchen mit halbzahligem Spin ↯ (Pauli-Prinzip)

Ausweg: Einführung v. "<u>Farbe</u>" in 3 verschiedenen Versionen

u_1, u_2, u_3 ; d_1, d_2, d_3 ; s_1, s_2, s_3

$$\Rightarrow \Omega^-\left(\tfrac{3}{2}\, \tfrac{3}{2}\right) \sim \underbrace{\uparrow s_\alpha \uparrow s_\beta \uparrow s_\gamma \, \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}}_{\text{total antisymm.}} \underbrace{\psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2, \underline{r}_3)}_{\text{total symm.}} \quad \checkmark$$

$c \in \{u, d, s\}$

<u>Zeit. Invariant unter Drehungen im Farbraum</u> $q_\alpha \longrightarrow \sum_{\beta=1}^{3} q_\beta U_{\beta\alpha}$

$U \in SU(3)$ ← Farb-SU(3) fundamentale Rolle in QCD.

z.B. $\pi^+ \sim u_1\bar{d}_1 + u_2\bar{d}_2 + u_3\bar{d}_3$ invariant unter SU(3)

Experimente ergeben, daß neben den Quarks noch andere, Flavour-neutrale Konstituenten ("Partonen") des Nukleon dominierend sein müssen!
(Tragen Teil des Gesamtimpulses des Nukleons).

⇝ Diese sind verantwortlich für die WW der Quarks im Nukleon untereinander

— Gluonen —

Diese ergeben sich in natürlicher Weise aus einer SU(3) - Eichtheorie) die starke WW, der QCD.

Lagrange - Dichte der QCD

Kinetischer Term für die Quarks: $\mathcal{L}_q^{(0)}(x) = \sum_{j=1}^{f} \bar{q}^j(x)\,(i\gamma^\mu\partial_\mu - m_j)\,q^j(x)$

$j = 1,\dots,f$ Quark-Flavors, Masse m_j
$q^1 = u$, $q^2 = d$, $q^3 = s$, $q^4 = c$, ...

Quark-Felder q^j haben drei Farb-Komponenten $q^j = \begin{pmatrix} q^j_1 \\ q^j_2 \\ q^j_3 \end{pmatrix}$

Da die physikalischen Bindungszustände der Quarks (z.B. Mesonen, Baryonen) invariant unter SU(3) - Rotationen im Farbraum sind, sollte dies die Folge einer Invarianz der fundamentalen Lagrange-Dichte sein

In der Tat ist $\mathcal{L}_q^0(x)$ invariant unter $q^j(x) \longrightarrow U \cdot q^j(x)$ $(j = 1,\dots f)$
mit $UU^+ = 1$, $\det U = 1$, U = const.
d.h. $U \in SU(3)$.

Die globale Invarianz ist, wie die globale U(1) - Invarianz des Dirac-Feldes in der QED, vom relativistischen Standpunkt unbefriedigend.
⇒ Fordern lokale Eichinvarianz der Theorie $\boxed{q^j(x) \longrightarrow U(x)\,q^j(x), \quad U(x) \in SU(3)}$

In der QED wird dieses Eichprinzip durch die Einführung des Photonen etabliert.
Hier wird es durch die Einführung der Gluonen passieren!

⇝ (Weyl in QED): Physikalisches Postulat der Invarianz unter Farbtransformationen des Quarkfeldes kann als "Grund" für die Existenz der Gluonen angesehen werden!

Offenbar ist $\mathcal{L}_q^{(0)}(x)$ nicht invariant unter $q^j(x) \to U(x)\, q^j(x)$

$$\mathcal{L}_q^0(x) \longrightarrow \sum_{j=1}^{f} \bar{q}^j(x)\left(i\gamma^\mu \partial_\mu - m_j + i\gamma^\mu U^+(x)\, \partial_\mu U(x)\right) q^j(x)$$

In QED benötigten wir ein Photonenfeld A_μ zur Herstellung der lokalen Eichinvarianz gemäß der Anzahl von Generatoren der Eichgruppe $U(1)$.

Hier, in d. QCD brauchen wir 8 Gluonenfelder entsprechend den acht linear unabhängigen Erzeugenden der $SU(3)$-Farbgruppe: $G_\mu^a(x)$ (mit $a = 1, \dots, 8$), 8 Gluonen-Vierer-Potentiale.

Fassen diese zu einer 3×3 hermitesch spurlosen Matrix zusammen

$$\boxed{G_\mu(x) = G_\mu^a(x)\,\frac{\lambda_a}{2} = G_\mu^+(x), \quad \mathrm{Sp}\, G_\mu(x) = 0}$$

Die λ_a sind die Gell-Mann-λ-Matrizen, die im Farbraum wirken

$$\lambda_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\lambda_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \lambda_7 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_8 = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}$$

(n.b. infinitesimale Trafos der $SU(3)$: $U = 1 + i\,\delta\varphi_a \frac{1}{2}\lambda_a$,
$\rightsquigarrow$ endl. Trafos $U = \exp(i\,\delta\varphi_a \frac{1}{2}\lambda_a)$).

Kopplung der Gluonen an die Quarks (in Analoge zur QED) durch

minimale Ankopplung $\boxed{\partial_\mu \to \underbrace{D_\mu}_{\text{"kovariante Ableitung"}} := \partial_\mu + i\underbrace{g_s}_{\text{dimensionslose Kopplungskonst.}} G_\mu(x)}$ ($\hat{=}$ Ladung in QED)

$$\rightsquigarrow \mathcal{L}_q(x) := \sum_{j=1}^{f} \bar{q}^j(x)\left(i\gamma^\mu D_\mu - m_j\right) q^j(x)$$

$\mathcal{L}_q$ ist invariant unter lokalen Eichtrafos $q^j(x) \to U(x)\, q^j(x)$ wenn wir das Gluon-Potential wie folgt transformieren:

$$G_\mu(x) \longrightarrow G'_\mu(x) = U(x)\, G_\mu(x)\, U^+(x) - \frac{i}{g_s} U(x)\, \partial_\mu U^+(x) \qquad (**)$$

$G'_\mu(x)$ ist wieder hermitesch und hat Spur 0 f. bel. $U(x) \in SU(3)$:

$\ulcorner U(x)\cdot U^+(x) = 1 \Rightarrow U(x)(\partial_\mu U^+(x)) + (\partial_\mu U(x))\, U^+(x) = 0 \Rightarrow G_\mu^+(x) = G_\mu(x)$
und $\Rightarrow \mathrm{Sp}(U(x)\partial_\mu U^+(x)) = 0 \quad \to \mathrm{Sp}\, G'_\mu = \mathrm{Sp}\, G_\mu - \frac{i}{g_s}\mathrm{Sp}\, U\partial_\mu U^+ = 0 \lrcorner$

Das Gluon-Feld $G_\mu(x)$ muss selbst eine dynamische Variable sein.

Konstruktion des Anteils der Lagrange-Dichte, der die Gluon-Dynamik enthält, erfolgt in Analogie zur QED

Def. Gluon-Feldstärke-Tensor $G_{\mu\nu}(x)$:

$$G_{\mu\nu}(x) := \partial_\mu G_\nu(x) - \partial_\nu G_\mu(x) + i g_s [G_\mu(x), G_\nu(x)] \qquad (*)$$

(G_μ für festes x hermitesche, spurlose Matrix)

$\Rightarrow$ def. dessen Komponenten durch

$$G_{\mu\nu}(x) = G^a_{\mu\nu}(x) \frac{\lambda_a}{2}$$

mit (v. (*))

$$G^a_{\mu\nu}(x) = \partial_\mu G^a_\nu(x) - \partial_\nu G^a_\mu(x) - g_s f_{abc} G^b_\mu(x) G^c_\nu(x)$$

wobei f_{abc} die Strukturkonstanten der SU(3).

(ergeben sich aus der Algebra der Generatoren durch $[\lambda_a, \lambda_b] = 2i f_{abc} \lambda_c$)

Der Term quadratisch in den Gluon-Potentialen hat kein Analogon in der QED, und ist typisch für den nicht-abelschen Charakter der Farbgruppe SU(3). Dieser Term ist notwendig um ein einfaches Trafo-Verhalten v. $G_{\mu\nu}$ unter Eich-Trafos zu erreichen:

Denn
Nach Trafo der Gluonpot. (**) ergibt sich $G_{\mu\nu}(x) \longrightarrow U(x) G_{\mu\nu}(x) U^+(x)$

Dann ist die eichinvariante Lagrange-Dichte für Quarks und Gluonen:

$$\mathcal{L}_{QCD}(x) = -\frac{1}{2} Sp\left(G_{\mu\nu}(x) G^{\mu\nu}(x)\right) + \sum_{j=1}^{f} \bar{q}^j(x) \left(i\gamma^\mu D_\mu - m_j\right) q^j(x)$$

$$\hat{=} -\frac{1}{4} G^a_{\mu\nu}(x) G^{a\,\mu\nu}(x) + \sum_{j=1}^{f} \bar{q}^j(x) \left(i\gamma^\mu \left(\partial_\mu + i g_s G^a_\mu(x) \frac{\lambda_a}{2}\right)\right) q^j(x)$$

↳ grundlegende Lagrange-Dichte der QCD, Struktur ähnlich QED.

Vgl. QCD / QED	QED	QCD
Quantenzahl	elektrische Ladung	Farbe
Fermionen	Elektronen	Quarks (Farb-Tripletts)
Vektor-Bosonen	Photon (ungeladen)	Gluonen (Farb-Oktett)
Eichgruppe	U(1) (abelsch)	SU(3) (nicht-abelsch)
Kopplungskonst.	e, $\alpha = e^2/4\pi$	g_s, $\alpha_s = g_s^2/4\pi$
Bindungszust.	Positronium	Hadronen
Freie Teilchen (asympt. Zust.)	Elektronen, Positronen, Photonen	nur Hadronen, Quarks & Gluonen permanent gebunden