Relativistische Quantentheorie

Vorlesung gehalten im SS 97

von

G.Roepstorff

Literatur

1. Bjorken, Drell: Relativistic Quantum Mechanics, 1964. Deutsche Übersetzung als Taschenbuch bei B.I., 1966
2. Corinaldesi, Strocchi: Relativistic Wave Mechanics, 1963
3. Rose: Relativistic Electron Theory, 1961. Deutsche Übersetzung in zwei Bänden bei B.I., 1971
4. Roman Advanced Quantum Theory, 1965
5. Bethe, Jackiw: Intermediate Quantum Mechanics, 1968
6. Landau, Lifschitz: Lehrbuch der Theoretischen Physik, Band IV: Relativistische Quantentheorie, 1980
7. Itzykson, Zuber: Quantum Field Theory, 1988 (Kapitel 2+3)

Inhaltsverzeichnis

1 Quantenmechanik: Rückblick und Ergänzungen

1.1 Grundbegriffe und Strukturen

Die Quantenmechanik besteht aus zwei unterschiedlichen Teilen, dem mathematischen Rahmen und der statistischen Interpretation. Der erste Teil dient der begrifflichen Präzisierung und stellt den Ausgangspunkt für konkrete Rechnungen dar. Der zweite Teil schafft eine Beziehung zu den Experimenten. Wir werden die beiden Bereiche nicht getrennt behandeln, aber die Grundbegriffe nennen.

Der Zustandsbegriff. Die erreichbaren Zustände eines physikalischen Systems werden durch Wellenfunktionen ψ beschrieben. Allgemein gesprochen handelt es sich hierbei um Elemente (Vektoren) eines Hilbertraumes $\mathcal{H}$. Der Hilbertraum ersetzt den Phasenraum der klassischen Physik. Eindeutigkeit der Zuordnung wird erst erreicht, wenn wir zu normierten Wellenfunktionen übergehen und darüberhinaus zwei (normierte) Wellenfunktionen als äquivalent erklären, wenn sie sich um eine konstante Phase unterscheiden:

$$\psi_1 \sim \psi_2 \quad \Leftrightarrow \quad \psi_1 = e^{i\alpha}\psi_2 \tag{1}$$

Man kann die erwünschte Eindeutigkeit auch dadurch erreichen, daß man Zustände durch Projektoren P_ψ beschreibt:

$$P_\psi = \frac{\psi \otimes \psi^*}{\|\psi\|^2} \qquad \text{d.h.} \qquad P_\psi \phi = \frac{(\psi, \phi)}{\|\psi\|^2}\psi \qquad (\phi \in \mathcal{H}) \tag{2}$$

Da der Wertebereich von P_ψ genau alle Vielfachen des Vektors ψ enthält, nennen wir solche Projektoren *eindimensional*. Die Projektorenschreibweise ist jedoch ungeeignet für die Formulierung und Anwendung des Superpositionsprinzips. Sind nämlich ψ_1 und ψ_2 zwei beliebige Wellenfunktionen des gleichen physikalischen Systems, so ist ihre Superposition

$$\psi = a\psi_1 + b\psi_2, \qquad a, b \in \mathbb{C} \tag{3}$$

wieder eine realisierbare Wellenfunktion. Da die relative Phase der Koeffizienten a und b hierbei entscheidend eingeht, spricht man auch von einer kohärenten Superposition. Die Beugung am Doppelspalt demonstriert diese Art der Überlagerung.

Daneben gibt es die Möglichkeit der inkohärenten Superposition, bei der die relative Phase zweier Zustände keine Rolle spielt. Hierbei konstruiert man Dichtematrizen und erweitert so den Zustandsbegriff. Seien etwa ψ_1 und ψ_2 zwei orthogonale Zustände und

$$D = pP_{\psi_1} + (1-p)P_{\psi_2}, \qquad 0 < p < 1, \tag{4}$$

so beschreibt D, Dichtematrix genannt, einen Zustand, bei dem ψ_1 mit der Wahrscheinlichkeit p und ψ_2 mit der Wahrscheinlichkeit $1-p$ realisiert sind. Diese Art der Addition entspricht der Vorschrift der klassischen statistischen Physik, und wir sprechen demgemäß von einer gemischten Gesamtheit oder einem statistischen Ensemble. Wir unterscheiden also zwischen *reinen* Zuständen (Wellenfunktionen) und gemischten Zuständen (Dichtematrizen). Letztere sind dadurch charakteriert, daß sie eine Zerlegung der Art (4) gestatten. Der Sinn der Unterscheidung liegt darin begründet, daß Zustände unsere Kenntnis von einem physikalischen System wiedergeben, und unsere

Kenntnis nur dann maximal ist, wenn der Zustand rein ist, hingegen unvollständig, wenn er sich als eine Mischung darstellt.

Observable Größen. Jeder Größe, die in einem Experiment gemessen werden kann, entspricht ein (linearer) Operator A auf dem Hilbertraum $\mathcal{H}$. Da die gemessenen Werte – in geeigneten Einheiten – reelle Zahlen sind, ist zu fordern, daß der Operator A selbstadjungiert ist: $A = A^*$. Also nicht $\hbar\nabla$ ist eine Observable sondern $(\hbar/i)\nabla$. Sie stellt den Impuls dar. Es gibt Observable, die durch Differentialoperatoren dargestellt sind (Impuls, kinetische Energie), aber auch solche, die durch Multiplikationsoperatoren beschrieben werden (Ort, potentielle Energie). Die konkrete Gestalt jedoch hängt von der Wahl der Darstellung von $\mathcal{H}$ ab. Neben der Ortsdarstellung benutzt man auch die Impulsdarstellung. Zwischen beiden vermittelt die Fourier-Transformation.

Schrödinger-Gleichung. Die zeitliche Entwicklung eines Anfangszustandes ψ_0 – die Bahn ψ_t im Hilbertraum $\mathcal{H}$ – wird durch eine Differentialgleichung, die Schrödinger-Gleichung, beschrieben:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_t = H\psi_t \tag{5}$$

Hier hat H die Bedeutung der Gesamtenergie. Die konkrete Gestalt von H hängt von dem jeweiligen Problem ab. Es gilt das Korrespondenzprinzip: Hat das klassische n-Teilchenproblem die Hamilton-Funktion

$$H_{\text{klass}} = \sum_{\alpha=1}^{n} \frac{1}{2m_\alpha}\boldsymbol{p}_\alpha^2 + V(\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n), \tag{6}$$

so ist ihm ein quantenmechanisches Modell mit dem Hamilton-Operator

$$H = \sum_{\alpha=1}^{n} \frac{-\hbar^2}{2m_\alpha}\Delta_\alpha + V(\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n) \tag{7}$$

(in der Ortsdarstellung) zugeordnet. Er entsteht formal durch die Ersetzung

$$\boldsymbol{p}_\alpha \to \boldsymbol{P}_\alpha = \frac{\hbar}{i}\nabla_\alpha,$$

wobei α der Teilchenindex ist. Ein physikalisches System, dem man einen Hamilton-Operator zuordnen kann, ist *energetisch abgeschlossen*; denn seine Energie ist erhalten. Ist darüberhinaus das Potential invariant gegenüber Translationen, d.h. gilt

$$V(\boldsymbol{x}_1 + \boldsymbol{a}, \ldots, \boldsymbol{x}_n + \boldsymbol{a}) = V(\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n) \tag{8}$$

für alle $\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^3$, so ist der Gesamtimpuls erhalten, und das System ist *abgeschlossen im engeren Sinne*.

Die Schrödinger-Gleichung gestattet, das System sowohl für $t > 0$ (Zukunft) als auch für $t < 0$ (Vergangenheit) zu verfolgen. Invarianz gegen Zeitumkehr drückt sich so aus: Ist ψ_t eine Lösung der Schrödinger-Gleichung, so auch ψ^*_{-t}. Allgemein gilt: Die Symmetrien eines Modells der klassischen Mechanik haben ihre Entsprechung in der Formulierung dieses Modells in der Quantenmechanik.

Erwartungswerte. Zum Hilbertraum gehört, daß für seine Elemente ein Skalarprodukt definiert ist. Seine Existenz ist notwendig, damit man den Erwartungswert einer

Observable definieren kann. Ist ϕ eine Wellenfunktion und A ein selbstadjungierter Operator, so heißt die reelle Größe

$$\langle A\rangle = \frac{(\phi, A\phi)}{(\phi,\phi)} = \mathrm{Spur}\,(P_\phi A) \tag{9}$$

der Erwartungswert der Observable A im Zustand ϕ. Gilt $\langle A\rangle \geq 0$ für alle Erwartungswerte, so heißt A ein positiver Operator. Erwartungswerte lassen sich auch für Zustände einführen, die durch Dichtematrizen beschieben werden:

$$\langle A\rangle = \mathrm{Spur}\,(DA) \tag{10}$$

Damit diese Erweiterung des Begriffes „Erwartungswert“ sinnvoll ist, muß man nur fordern: $D = D^* > 0$ und $\mathrm{Spur}\,D = 1$. Anhand von Erwartungswerten kann man erläutern, wie Dichtematrizen aus reinen Zuständen entstehen. Wir betrachten eine kohärente Superposition aus zwei orthonormierten Wellenfunktionen

$$\phi = a\phi_1 + b\phi_2, \qquad (\phi_i, \phi_k) = \delta_{ik} \tag{11}$$

Durch $|a|^2 + |b|^2 = 1$ erreichen wir, daß ϕ bereits normiert ist. Wir setzen

$$|a|^2 = p, \quad |b|^2 = 1-p, \quad 0 < p < 1 \quad \bar{a}b = |a||b|e^{i\alpha} \tag{12}$$

Für eine beliebige Observable A finden wir dann den Erwartungswert

$$(\phi, A\phi) = p(\phi_1, A\phi_1) + (1-p)(\phi_2, A\phi_2) + 2|a||b|\mathrm{Re}\left((\phi_1, A\phi_2)e^{i\alpha}\right) \tag{13}$$

Nun mitteln wir über die relative Phase α der beiden Zustände und erhalten

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\alpha\,(\phi, A\phi) = p(\phi_1, A\phi_1) + (1-p)(\phi_2, A\phi_2) = \mathrm{Spur}\,(DA) \tag{14}$$

mit $D = pP_{\phi_1} + (1-p)P_{\phi_2}$, der inkohärenten Supersposition der beiden Zustände.

Da die Wellenfunktion komplexwertig und nicht eindeutig ist, kann sie nicht unmittelbar aus physikalischen Beobachtungen gewonnen werden. Sie ist also nur mittelbar eine physikalische Größe. Wählen wir etwa für ein Elektron die Ortsdarstellung, so ist sein Zustand – zu einen festen Zeitpunkt – durch eine Wellenfunktion $\psi(\boldsymbol{x})$ beschrieben, und wir haben die Freiheit, die Normierungsbedingung

$$\int d^3x\,|\psi(\boldsymbol{x})|^2 = 1$$

zu fordern. Die statistische Interpretation sagt, daß – Normierung vorausgesetzt – das Quadrat

$$\rho(\boldsymbol{x}) = |\psi(\boldsymbol{x})|^2 \tag{15}$$

die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Aufenthalt des Elektrons darstellt d.h. für ein Gebiet $G \subset \mathbb{R}^3$ ist

$$W_G = \int_G d^3x\,|\psi(\boldsymbol{x})|^2 \tag{16}$$

die Wahrscheinlichkeit für den Aufenthalt in G. Dies darf nicht so gedeutet werden, als ob die ganze Physik des Teilchens in $\rho(\boldsymbol{x})$ codiert wäre. Die Verteilung der Meßwerte für den Impuls $\boldsymbol{P}$ – kurz die Impulsverteilung – kann nicht durch die Ortsverteilung $\rho(\boldsymbol{x})$ ausgedrückt werden.

Die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t) = \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + V(\boldsymbol{x})\right)\psi(\boldsymbol{x},t) \tag{17}$$

bestimmt eine zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion und damit aller Wahrscheinlichkeiten. Insbesondere wird die Ortverteilung t-abhängig: $\rho(\boldsymbol{x},t)$. Es ist interessant, daß diese durch ein Kontinuitätsgleichung – ähnlich der der Maxwellschen Theorie – eingeschränkt ist:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\boldsymbol{x},t) + \nabla\cdot\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x},t) = 0 \tag{18}$$

wobei

$$\rho = |\psi|^2, \qquad \boldsymbol{j} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*(\nabla\psi) - (\nabla\psi)^*\psi\right) \tag{19}$$

gesetzt wurde. Aus der Definition der Stromdichte folgt eine bemerkenswerte Aussage: Ist ψ – nach Wahl einer geeigneten Phase – eine reelle Wellenfunktion, so gilt $\psi^*(\nabla\psi) = (\nabla\psi)^*\psi$, d.h. $\boldsymbol{j} = 0$. Dies ist in der Regel der Fall für die Grundzustände der Atome, insbesondere für den Grundzustand des H-Atoms. Solche Zustände sind also nicht nur stationär in dem Sinne, daß $\partial\rho/\partial t = 0$ und somit $\nabla\cdot\boldsymbol{j} = 0$, sondern auch in dem Sinne, daß $\boldsymbol{j}$ überhaupt verschwindet. Für ein einzelnes Elektron (Ladung e), können wir $e\boldsymbol{j}$ als den elektromagnetischen Strom ansehen, der durch die Bewegung des Elektrons hervorgerufen wird. Auch dieser Strom verschwindet im Grundzustand des H-Atoms.

1.2 Elektromagnetische Felder

Elektromagnetische Felder beeinflussen die Bewegung von Ladungsträgern. Umgekehrt erzeugen Ladungsträger ein elektromagnetisches Feld. Wird der zweite Effekt, also die Rückwirkung der Ladung auf das Feld, vernachlässigt, so sprechen wir von einem *äußeren* Feld.

Befindet sich das Elektron (Masse m, Ladung e) in einem äußeren Feld – beschrieben durch ein skalares Potential $\Phi(\boldsymbol{x},t)$ und ein Vektorpotential $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)$, so gilt aufgrund des Korrespondenzprinzips für den Energie-Operator[1]:

$$H(t) = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)\right)^2 + e\Phi(\boldsymbol{x},t) \tag{20}$$

Er ist im allgemeinen zeitabhängig und kann nicht unmittelbar durch die Feldstärken selbst ausgedrückt werden. Diese sind bekanntlich

$$\boldsymbol{E} = -\nabla\Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{A}, \qquad \boldsymbol{B} = \nabla\times\boldsymbol{A} \tag{21}$$

[1] Wir benutzen das Gaußsche Maßsystem.

Es ist vorteilhaft, schon hier von einer relativistischen Schreibweise Gebrauch zu machen. Wir betrachten zu diesem Zweck einen Vierervektor $\mathbb{P}^\mu$ $(\mu = 0, 1, 2, 3)$ mit den Komponenten

$$c\mathbb{P}^0 = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi, \qquad \mathbb{P}^k = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^k} - \frac{e}{c}A^k, \qquad (k = 1, 2, 3) \tag{22}$$

einführen mit $\boldsymbol{x} = \{x^1, x^2, x^3\}$ und $\boldsymbol{A} = \{A^1, A^2, A^3\}$. Die Schrödinger-Gleichung nimmt dann die Form an:

$$c\mathbb{P}^0\psi = \frac{1}{2m}\sum_{k=1}^{3}(\mathbb{P}^k)^2\psi. \tag{23}$$

Wir gehen noch einen Schritt weiter und betrachten Ableitungsoperatoren

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu}, \qquad \partial^\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu}$$

mit $x^\mu = \{ct, \boldsymbol{x}\}$ und $x_\mu = \{ct, -\boldsymbol{x}\}$, sodaß $x_0 = x^0 = ct$. Aus der Maxwellschen Theorie übernehmen wir das Konzept des Viererpotentials und des Feldstärkentensors:

$$A^\mu = \{\Phi, \boldsymbol{A}\}, \qquad F^{\mu\nu} = \partial^\nu A^\mu - \partial^\mu A^\nu \tag{24}$$

Aus den Definitionen folgt die Beziehung

$$\mathbb{P}^\mu = i\hbar\partial^\mu - \frac{e}{c}A^\mu \tag{25}$$

und daraus die Kommutatorrelation

$$[\mathbb{P}^\mu, \mathbb{P}^\nu] = i\frac{\hbar e}{c}F^{\mu\nu} \tag{26}$$

Damit die Kontinuitätsgleichung (18) weiterhin Gültigkeit hat, muß die Stromdichte $\boldsymbol{j}$ geeignet definiert werden:

$$\boldsymbol{j}^k = \frac{1}{2m}\left(\psi^*(\mathbb{P}^k\psi) + (\mathbb{P}^k\psi)^*\psi\right) \qquad (k = 1, 2, 3). \tag{27}$$

Scheinbar sind in den drei Gleichungen (23), (26) und (27) die Potentiale zu Gunsten der Feldstärken eliminiert worden. Daß die Wellenfunktion dennoch von von den Potentialen abhängt, zeigen die Eichtransformationen. Die Maxwell-Theorie definiert eine Umeichung als eine Ersetzung der Art

$$A^\mu \to A^\mu + \partial^\mu\alpha$$

In der Quantenmechanik eines Elektrons wird sie begleitet durch die Transformation $\psi \to \exp\{-i\frac{e\alpha}{\hbar c}\}\psi$. Nur so kann die Form der Schrödinger-Gleichung gewahrt werden. Da die (reelle) Eichfunktion α i.allg. von $\boldsymbol{x}$ und t abhängt, sind die alte und die neue Wellenfunktion nicht äquivalent. Ein Elektron, das ein Raumgebiet passiert, in dem zwar $F^{\mu\nu} = 0$ jedoch $A^\mu \neq 0$ gilt, spürt die Anwesenheit des Potential dadurch, daß es eine Transformation seiner Phase erfährt. Zwar kann durch eine Eichtransformation erreicht werden, daß $A^\mu = 0$ *lokal* gilt, i.allg. jedoch nicht *global*. Der Effekt ist durch ein Interferenz-Experiment nachweisbar (Aharonov-Bohm-Effekt).

1.3 Schrödinger-Bild und Heisenberg-Bild

Wir wollen zur Vereinfachung annehmen, daß der Hamilton-Operator nicht explizit von der Zeit abhängig ist. Die Lösung der Schrödinger-Gleichung schreibt man dann formal als

$$\psi_t = U_t \psi, \qquad U_t = e^{-i(t/\hbar)H} \qquad (t \in \mathbb{R}). \tag{28}$$

Die zeitliche Evolution respektiert Superpositionen:

$$(a\psi + b\phi)_t = a\psi_t + b\phi_t \qquad (a, b \in \mathbb{C}) \tag{29}$$

Somit ist U_t eine *linearer* Operator. Er ist zudem invertierbar: $U_t^{-1} = U_{-t}$. Wegen der Erhaltung des Skalarproduktes

$$(\psi_t, \psi_t) = (\psi, \psi) \tag{30}$$

ist U_t darüberhinaus *unitär*: $U_t^{-1} = U_t^*$. Schließlich gilt

$$U_t U_{t'} = U_{t+t'}, \qquad U_0 = \mathbb{1} \tag{31}$$

und wir sprechen deshalb von einer unitären Gruppe von Transformationen. Genauer, die Abbildung $t \mapsto U_t$ ist eine unitäre Darstellung der additiven Gruppe $\mathbb{R}$ (=Gruppe der Zeittranslationen).

Von physikalischem Interesse ist eigentlich nur die zeitliche Entwicklung aller Erwartungswerte. Diese Entwicklung kann aber auf zweierlei Weise beschrieben werden, was durch eine einfache Identität ermöglicht wird:

$$(U_t\psi, AU_t\psi) = (\psi, U_t^* A U_t \psi).$$

Führen wir für jede Observable A ihre zeitliche Entwicklung durch

$$A_t = U_t^* A U_t = e^{i(t/\hbar)H} A e^{-i(t/\hbar)H}$$

ein, so lautet unsere Identität einfach $(\psi_t, A\psi_t) = (\psi, A_t\psi)$. Die beiden Seiten der Gleichung entsprechen dem Schrödinger-Bild bzw. dem Heisenberg-Bild.

- Schrödinger-Bild: Zustände sind zeitabhängig und werden durch die Schrödinger-Gleichung $i\hbar\dot{\psi} = H\psi$ beschrieben. Observable dagegen sind zeitunabhängig. Ein Zustand ψ heißt stationär, wenn alle Erwartungswerte zeitlich konstant sind, d.h. wenn nach Wahl einer geeigneten t-abhängigen Phase $\dot{\psi} = 0$ gilt.

- Heisenberg-Bild: Observable sind zeitabhängig und werden durch die Heisenberg-Gleichung $i\hbar\dot{A} = [A, H]$ beschrieben. Zustände dagegen sind zeitunabhängig. Eine Observable A heißt Erhaltungsgröße, wenn alle Erwartungswerte zeitlich konstant sind, d.h. wenn $\dot{A} = 0$ gilt.

1.4 Der Eigendrehimpuls des Elektrons

Die Aufspaltung des Atomstrahls im Stern-Gerlach-Experiment in zwei Teilstrahlen zeigt, daß Elektronen – auch wenn ihr Bahndrehimpuls gleich Null ist – noch einen Eigendrehimpuls, Spin genannt, besitzen, und zwar mit zwei möglichen Einstellungen (unabhängigen Polarisationen). Das mathematische Modell eines Teilchens mit dem Spin $s = 1/2$ – unter Vernachlässigung aller weiteren Freiheitsgrade – geht deshalb von einem zweidimensionalen Hilbertraum aus. Ein solcher Zustandsraum kann stets mit dem Raum $\mathbb{C}^2$ identifiziert werden. Seine Elemente – Spinoren genannt – sind Paare von komplexen Zahlen:

$$u = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \|u\|^2 = |a|^2 + |b|^2 \tag{32}$$

Die beiden Basisvektoren $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ stehen für die Zustände „Spin nach oben" (in z-Richtung) bzw. „Spin nach unten" (entgegen der z-Richtung). Nach Normierung ($|a|^2 + |b|^2 = 1$), interpretieren wir die Zahlen $p = |a|^2$ und $1 - p = |b|^2$ als Wahrscheinlichkeiten. Durch (32) wird eine kohärente Superposition der beiden Spinpolarisationen beschrieben, wobei die relative Phase von a und b wichtig wird. Eine inkohärente Überlagerung mit den gleichen Wahrscheinlichkeiten wird durch die Dichtematrix

$$D = \begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & 1-p \end{pmatrix} = p \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + (1-p) \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{33}$$

beschrieben. Für $p = 1/2$ geht D in den völlig unpolarisierten Zustand über:

$$D = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{34}$$

Der Erwartungswert des Spins $\boldsymbol{s} = (\hbar/2)\boldsymbol{\sigma}$ ist

$$\langle \boldsymbol{s} \rangle = \frac{\hbar}{2} u^* \boldsymbol{\sigma} u \qquad \text{bzw.} \qquad \langle \boldsymbol{s} \rangle = \frac{\hbar}{2} \mathrm{Spur}\,(D\boldsymbol{\sigma}) \tag{35}$$

mit $\boldsymbol{\sigma} = \{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$ den Pauli-Matrizen:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{36}$$

Die Energie, die der Spin $\boldsymbol{s}$ in einem homogenen Magnetfeld $\boldsymbol{B}$ besitzt, ist durch sein magnetisches Moment verursacht:

$$H = -\frac{e}{mc} \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{s} = -\frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{\sigma} = -\mu_{\mathrm{B}} \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{\sigma} \tag{37}$$

Man bezeichnet $\mu_{\mathrm{B}} = e\hbar/(2mc)$ als das Bohrsche Magneton. Wir können die hermitesche Matrix H als Hamilton-Operator des Spinsystems auffassen. Die zeitliche Entwicklung eines Spinors u (klassisch: Präzession des Eigendrehimpulses um die Richtung des

Magnetfeldes mit der Winkelgeschwindigkeit $\boldsymbol{\omega} = e\boldsymbol{B}/(mc)$) läßt sich explizit angeben. Man scheibt wie gewohnt

$$u_t = U_t u, \qquad U_t = e^{-i(t/\hbar)H} = e^{i(t/2)\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\sigma}} \tag{38}$$

und errechnet

$$U_t = \cos(\omega t/2) + i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\sin(\omega t/2) \tag{39}$$

wobei wir die Winkelgeschwindigkeit nach Betrag und Richtung zerlegt haben: $\boldsymbol{\omega} = \omega\boldsymbol{n}$. Zeigt das Magnetfeld in die 3-Richtung, so gilt $\boldsymbol{n} = \{0, 0, 1\}$ und somit

$$U_t = \begin{pmatrix} e^{i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega t/2} \end{pmatrix} \tag{40}$$

Die zeitliche Evolution eines Polarisationszustandes, der durch eine Dichtematrix D beschrieben wird, ist durch

$$D_t = U_t D U_t^* \tag{41}$$

gegeben. Nur der unpolarisierte Zustand (34) hat die Eigenschaft, daß er durch kein Magnetfeld beeinflußt werden kann.

Interessant ist, daß U_t in jedem Fall eine unitäre 2×2-Matrix mit Determinante 1 darstellt und daß wir alle solche Matrizen auf diese Weise erhalten können. Sie bilden eine Gruppe, die man mit SU(2) bezeichnet (für „spezielle unitäre Gruppe in 2 Dimensionen“). Mehr noch: Zu jedem Element $U \in$SU(2) existiert eine Drehung $R(U) \in$SO(3) des $\mathbb{R}^3$, definiert durch die Wirkung auf die Pauli-Matrizen:

$$U^*\sigma_i U = \sum_{k=1}^{3} R(U)_{ik}\sigma_k \tag{42}$$

Es gilt $R(U_1U_2) = R(U_1)R(U_2)$. Die Beziehung zwischen U und R ist 2:1. Denn sowohl U also auch $-U$ führen zur gleichen Drehung R. Die Matrix U_t, wie oben konstruiert, entspricht einer Drehung $R(U_t)$ mit der Drehachse $\boldsymbol{n}$ und dem Drehwinkel ωt.

Bei Einbeziehung der translatorischen Freiheitsgrade eines Elektrons ist es notwendig, zur Pauli-Gleichung $i\hbar\partial\psi_t/\partial t = H\psi_t$ überzugehen. Sie benutzt zur Beschreibung eines Zustandes zweikomponentige Wellenfunktionen:

$$\psi(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\boldsymbol{x}) \\ \psi_2(\boldsymbol{x}) \end{pmatrix} = \psi_1(\boldsymbol{x})\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_2(\boldsymbol{x})\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{43}$$

Aus dem Normquadrat $\|\psi\|^2 = \|\psi_1\|^2 + \|\psi_2\|^2$ ergibt sich zwangsläufig das Skalarprodukt und damit die Struktur eines Hilbertraumes. Die Polarisation des Elektrons wird also ortsabhängig beschrieben. Für das Elektron des Wasserstoffatoms, das sich in einem Magnetfeld befindet, ist der Hamilton-Operator eine 2×2-Matrix, deren Elemente Operatoren sind:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{|\boldsymbol{x}|} - \frac{e}{2mc}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{L} + 2\boldsymbol{s}) \tag{44}$$

Hier bezeichnet $\boldsymbol{L} = \{L_1, L_2, L_3\}$ den Bahndrehimpuls. Nur die Anwesenheit des Spins $\boldsymbol{s}$ sorgt dafür, daß in der Pauli-Gleichung die beiden Komponenten ψ_1 und ψ_2 miteinander gekoppelt werden. Die Pauli-Gleichung führt zu einer Erklärung des Zeeman-Effektes (Aufspaltung der Spektrallinien im äußeren Magnetfeld).

2 Relativistische Wellengleichungen

2.1 Die Klein-Gordon-Gleichung

Aufgrund der speziellen Relativitätstheorie transformieren sich Energie und Impuls eines Teilchens wie Komponenten eines Vierervektors:

$$p^\mu = \{p^0, p^1, p^2, p^3\} = \{E/c, \boldsymbol{p}\} \qquad (E > 0) \tag{45}$$

Die Theorie gestattet die Konstruktion einer invarianten Größe, die wir mit der Masse m des Teilchens in Verbindung bringen:

$$p^2 := (p^0)^2 - (p^1)^2 - (p^2)^2 - (p^3)^2 = m^2c^2 \tag{46}$$

Unter 'Masse' verstehen wir grundsätzlich die 'Ruhmasse' des Teilchens. Indem wir die deBroglie-Beziehungen

$$E = \hbar\omega, \qquad \boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k} \tag{47}$$

beibehalten, können wir die ebene Welle mit der Frequenz ω und dem Wellenvektor $\boldsymbol{k}$ auch durch die Teilchengrößen ausdrücken:

$$\Phi(x) = \exp\{i(\boldsymbol{kx} - \omega t)\} = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{px} - Et)\right\} = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}px\right\} \tag{48}$$

mit

$$px = p_\mu x^\mu = p^\mu x_\mu = Et - \boldsymbol{px}$$

Die Welle (48) erfüllt die Differentialgleichung

$$(\Box + (mc/\hbar)^2)\Phi = 0 \tag{49}$$

(Klein-Gordon-Gleichung). Hier bezeichnet

$$\Box = \partial_\mu\partial^\mu = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta$$

den d'Alembert-Operator (auch Wellen-Operator genannt). Beachte: In (49) geht die Compton-Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{mc} \qquad (h = 2\pi\hbar) \tag{50}$$

des Teilchens ein. Für $m = 0$ geht die Klein-Gordon-Gleichung in die Wellengleichung über, die der Theorie elektromagnetischer Wellen zugrunde liegt.

Mit der Gleichung (49) sind drei Schwierigkeiten verknüpft:

1. Neben den Lösungen positiver Energie, $\exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{px} - ET)\right\}$, existieren auch Lösungen negativer Energie, $\exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{px} + ET)\right\}$.

2. Die KG-Gleichung enthält die Zeitableitung in zweiter Ordnung. Zur Bestimmung der zeitlichen Entwicklung benötigt man neben der Wellenfunktion Φ bei $t = 0$ noch deren erste zeitliche Ableitung $\dot{\Phi}$ bei $t = 0$.

3. Zwar ist die Kontinuitätsgleichung $\partial_\mu j^\mu = 0$ für den Strom

$$j^\mu = i\hbar c^2(\Phi^*\partial^\mu\Phi - \Phi\partial^\mu\Phi^*) \tag{51}$$

trivialerweise erfüllt, jedoch kann

$$\rho = \frac{1}{c}j^0 = i\hbar(\Phi^*\dot{\Phi} - \Phi\dot{\Phi}^*) \tag{52}$$

nicht als Dichte für den Aufenthalt des Teilchens gedeutet werden, weil dieser Ausdruck nicht positiv definit ist.

Dem ersten Einwand begegnen wir durch eine Uminterpretation der ebenen Wellen negativer Energie. Wir sagen: Eine Welle mit dem Viererimpuls $\{-E/c, \boldsymbol{p}\}$ entspricht einem Antiteilchen mit dem Viererimpuls $\{E/c, -\boldsymbol{p}\}$. Das Antiteilchen hat damit – wie das Teilchen – nur positive Energien, und sein Viererimpuls transformiert sich wie gewohnt unter Lorentz-Transformationen.

Es läßt sich nun zeigen, daß jede Lösung der KG-Gleichung eine Zerlegung nach positiven und negativen Frequenzen und damit nach Teilchen- und Antiteilchenamplituden besitzt. Wir gehen dabei so vor, daß wir in einem ersten Schritt eine Fourier-Zerlegung nur bezüglich der Abhängigkeit von $\boldsymbol{x}$ vornehmen:

$$\Phi(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d^3p\, a(\boldsymbol{p},t)e^{(i/\hbar)\boldsymbol{p}\,\boldsymbol{x}} \tag{53}$$

Aus der KG-Gleichung folgt

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{d^2}{dt^2} + \frac{1}{\hbar^2}\boldsymbol{p}^2 + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)a(\boldsymbol{p},t) = 0 \tag{54}$$

also

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \frac{E^2}{\hbar^2}\right)a(\boldsymbol{p},t) = 0, \qquad E = c\sqrt{m^2c^2 + \boldsymbol{p}^2} \tag{55}$$

mit der Lösung

$$a(\boldsymbol{p},t) = \frac{1}{2E}\Big(u(\boldsymbol{p})e^{-(i/\hbar)Et} + v(-\boldsymbol{p})e^{(i/\hbar)Et}\Big) \tag{56}$$

wobei der Vorfaktor $1/(2E)$ aus Gründen gewählt wurde, die gleich deutlich werden. Die Lösung $\Phi(x)$ der KG-Gleichung ist somit die Summe von zwei Integralen:

$$\Phi(x) = \Phi^{(+)}(x) + \Phi^{(-)}(x) \tag{57}$$

$$\Phi^{(+)}(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \frac{d^3p}{2E}\,u(\boldsymbol{p})e^{(i/\hbar)(\boldsymbol{p}\,\boldsymbol{x}-Et)} \tag{58}$$

$$\Phi^{(-)}(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \frac{d^3p}{2E}\,v(-\boldsymbol{p})e^{(i/\hbar)(\boldsymbol{p}\,\boldsymbol{x}+Et)} \tag{59}$$

Substituieren wir im zweiten Integral $\boldsymbol{p} \to -\boldsymbol{p}$, so gewinnen wir die Darstellung

$$\Phi(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \frac{d^3p}{2E}\,\Big(u(\boldsymbol{p})e^{-(i/\hbar)px} + v(\boldsymbol{p})e^{(i/\hbar)px}\Big) \tag{60}$$

Soll die Lösung ein Teilchen beschreiben, so setzen wir $v(\boldsymbol{p}) = 0$. Soll sie ein Antiteilchen beschreiben, so setzen wir $u(\boldsymbol{p}) = 0$. Es bleibt die Schwierigkeit zu erläutern, was eine kohärente Superposition aus Teilchen und Antiteilchen bedeuten soll. Eine solche Konstruktion scheint – nach allem was wir wissen – physikalisch unsinnig zu sein.

Dem zweiten Einwand begegnen wir dadurch, daß wir neben $\Phi(x)$ auch

$$\Phi_0(x) = \frac{i\hbar}{mc^2}\frac{\partial}{\partial t}\Phi(x) \tag{61}$$

als unabhängige Funktion einführen. Mit

$$\psi = \begin{pmatrix} \Phi \\ \Phi_0 \end{pmatrix}, \qquad H = \begin{pmatrix} 0 & mc^2 \\ mc^2 - \hbar^2 m^{-1}\Delta & 0 \end{pmatrix} \tag{62}$$

folgt dann eine Gleichung, die formal die Struktur der Schrödinger-Gleichung besitzt:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi \tag{63}$$

Sie ist der KG-Gleichung äquivalent. Die Dichte nimmt darin die Form

$$\rho = mc^2(\Phi^*\Phi_0 + \Phi_0^*\Phi) \tag{64}$$

an. Wir möchten nun das Integral $\int d^3x\, \rho(\boldsymbol{x}, t)$, das t-unabhängig ist, durch die Fourieramplituden ausdrücken. Dazu beachten wir:

$$\Phi(t=0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\frac{d^3p}{2E}\Big(u(\boldsymbol{p}) + v(-\boldsymbol{p})\Big)e^{(i/\hbar)\boldsymbol{px}} \tag{65}$$

$$\Phi_0(t=0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\frac{d^3p}{2mc^2}\Big(u(\boldsymbol{p}) - v(-\boldsymbol{p})\Big)e^{(i/\hbar)\boldsymbol{px}} \tag{66}$$

Das Integral über $\boldsymbol{x}$ läßt sich ausführen vermöge der Regel

$$\int d^3x\, e^{(i/\hbar)(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})\boldsymbol{x}} = (2\pi\hbar)^3\delta^3(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}) \tag{67}$$

(gültig im Sinne der Distributionen). Beachtet man dann noch

$$\begin{aligned}\Big(u(\boldsymbol{p}) + v(-\boldsymbol{p})\Big)\overline{\Big(u(\boldsymbol{p}) - v(-\boldsymbol{p})\Big)} + \Big(u(\boldsymbol{p}) - v(-\boldsymbol{p})\Big)\overline{\Big(u(\boldsymbol{p}) + v(-\boldsymbol{p})\Big)} \\ = 2\Big(|u(\boldsymbol{p})|^2 - |v(-\boldsymbol{p})|^2\Big)\end{aligned}$$

so lautet das Ergebnis:

$$\int d^3x\, \rho(x) = \int\frac{d^3p}{2E}\Big(|u(\boldsymbol{p})|^2 - |v(\boldsymbol{p})|^2\Big) \tag{68}$$

Nach Integration über $\boldsymbol{x}$ verschwinden also die Interferenzterme zwischen $u(\boldsymbol{p})$ und $v(\boldsymbol{p})$. Das Ergebnis zeigt, daß es sinnvoll ist, die folgenden Normierungsbedingungen einzuführen:

$$\begin{array}{rlcl} \text{Teilchen:} & \displaystyle\int\frac{d^3p}{2E}|u(\boldsymbol{p})|^2 = 1, \quad v(\boldsymbol{p}) = 0 & \Rightarrow & \displaystyle e\int d^3x\, \rho(x) = e \\ \text{Antiteilchen:} & \displaystyle\int\frac{d^3p}{2E}|v(\boldsymbol{p})|^2 = 1, \quad u(\boldsymbol{p}) = 0 & \Rightarrow & \displaystyle e\int d^3x\, \rho(x) = -e \end{array}$$

Wir erhalten in beiden Fällen einen Hilbertraum von Zuständen für Spin-0-Teilchen mit der Ladung e bzw. $-e$.

Die Umformulierung (63) der KG-Theorie verbirgt ihre Lorentz-Invarianz. Eine andere mehr befriedigende Formulierung geht davon aus, daß man das Lorentz-kovariante Vektorfeld

$$\Phi_\mu(x) = \frac{i\hbar}{mc}\partial_\mu\Phi(x) \tag{69}$$

als eine fundamentale Wellenfunktion einführt und die KG-Gleichung durch ein Paar von Gleichungen ersetzt:

$$i\hbar\partial_\mu\Phi(x) = mc\Phi_\mu(x) \tag{70}$$

$$i\hbar\partial_\mu\Phi^\mu(x) = mc\Phi(x) \tag{71}$$

Die Lorentz-Invarianz ist nun offensichtlich, und alle Ableitungen treten nur noch in erster Ordnung auf.

Dem dritten Einwand begegnen wir dadurch, daß wir die Existenz eines Ortsoperators aufgeben und damit den Begriff der Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Die KG-Gleichung beschreibt spinlose Teilchen (auch skalare Teilchen genannt). Werden sie in einem Experiment erzeugt, so geschieht ihr Nachweis durch Detektoren, die den Impuls feststellen (z.B. durch die Festellung von Energie und Flugrichtung). Andere physikalische Größen existieren nicht. Die Kenntnis des Zustandes ist maximal, wenn wir die Wellenfunktion $u(\boldsymbol{p})$ bzw. $v(\boldsymbol{p})$ kennen.

Der Ort $\boldsymbol{x}$ und die Zeit t treten erst in Erscheinung, wenn das Teilchen wechselwirkt, etwa mit dem Photon-Feld vermöge seiner Ladung e. Der elektromagnetischen Strom $ej_\mu(x)$ ist dann die entscheidende Größe, in die Ort und Zeit als Variable eingehen. Beide geben an, wann und wo ein Photon emittiert oder absorbiert wurde. In der Feldtheorie wird die Vorstellung von Operatoren, die Ort und Zeit messen, völlig aufgegeben zugunsten einer Beschreibung, wobei x nurmehr eine Ereignisvariable darstellt, von der die Feldgrößen abhängen.

Für die Klein-Gordon-Theorie heißt dies konkret: Nur wenn wir $\rho(x)$ nicht als die Dichte für den Aufenthalt interpretieren, vermeiden wir Paradoxien. An ihre Stelle tritt die Ladungsdichte $e\rho(x)$, von der wir nicht erwarten, daß sie positiv definit ist.

Wir wollen uns nun näher mit der Lösung (60) auseinandersetzen. Die Behauptung ist, daß $d^3p/(2E)$ für das Massenhyperboloid

$$H_m = \{p \in \mathbb{R}^4 \mid p^2 = m^2c^2, p_0 \geq mc\} \tag{72}$$

ein Lorentz-invariantes Integrationsmaß darstellt. Grund hierfür ist die Formel

$$\frac{1}{c^2}\int d^4p\Theta(p_0)\delta(p^2 - m^2c^2)f(p) = \int \frac{d^3p}{2E} f(E/c, \boldsymbol{p}) \tag{73}$$

gültig für alle integrierbaren Funktionen $f(p) = f(p_0, \boldsymbol{p})$. Hier bezeichnet $\delta(\cdot)$ die Diracsche Deltafunktion, und

$$\Theta(p_0) = \begin{cases} 1 & \text{falls } p_0 > 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{74}$$

Die Formel (73) ist eine einfache Folge der Zerlegung

$$\begin{aligned}\delta(p^2 - m^2c^2) &= \delta(p_0^2 - E^2/c^2) \\ &= \frac{c^2}{2E}\Big(\delta(p_0 - E/c) + \delta(p_0 + E/c)\Big)\end{aligned} \tag{75}$$

und der daraus resultierenden Formel

$$\Theta(p_0)\delta(p^2 - m^2c^2) = \frac{c^2}{2E}\delta(p_0 - E/c) \tag{76}$$

Die Formel (75) wiederum beruht auf einer sehr allgemeinen Regel: Ist die reellwertige und differenzierbare Funktion $u(x)$ von einer reellen Variablen x so beschaffen, daß sie nur einfache Nullstellen x_* besitzt, so gilt

$$\delta(u(x)) = \sum_{x_*} \frac{1}{|u'(x_*)|}\delta(x - x_*) \tag{77}$$

wobei die Summe sich über alle Nullstellen erstreckt. Man weist dies nach, indem man sich zunächst klar macht, daß alle Beiträge nur von den Umgebungen der Nullstellen herkommen und daß in der Nähe einer Nullstelle x_* die Funktion approximiert werden kann:

$$u(x) \approx u'(x_*)(x - x_*) \tag{78}$$

Sodann muß man nur $\delta(ax) = |a|^{-1}\delta(x)$ beachten, um zu dem Ergebnis (77) zu gelangen. Nun ist offensichtlich, daß (75) aus (77) folgt, wenn man $u(p_0) = p^2 - m^2c^2 = p_0^2 - (E/c)^2$ setzt.

Die Ankopplung an ein äußeres elektromagnetisches Feld geschieht wieder vermöge des Prinzips der minimalen Ersetzung:

$$i\hbar\partial_\mu \quad \to \quad \mathbb{P}_\mu = i\hbar\partial_\mu - \frac{e}{c}A_\mu \tag{79}$$

Auf diese Weise erhalten wir aus der KG-Gleichung eine neue Gleichung der Form

$$(\mathbb{P}_\mu\mathbb{P}^\mu - m^2c^2)\Phi(x) = 0 \tag{80}$$

die nun die Wechselwirkung eines spinlosen Teilchens der Masse m mit dem Viererpotential $A_\mu(x)$ beschreibt. Bevorzugen wir eine Darstellung, in der nur erste Ableitungen auftreten, so können wir auch schreiben:

$$\mathbb{P}_\mu\Phi(x) = mc\Phi_\mu \tag{81}$$

$$\mathbb{P}^\mu\Phi_\mu(x) = mc\Phi(x) \tag{82}$$

Der elektromagnetische Strom bekommt die Form

$$ej_\mu = ec^2\Big(\Phi^*(\mathbb{P}_\mu\Phi) + (\mathbb{P}_\mu\Phi)^*\Phi\Big) \tag{83}$$

$$= emc^3(\Phi^*\Phi_\mu + \Phi_\mu^*\Phi) \tag{84}$$

wobei die Darstellung durch Φ und Φ_μ vorzuziehen ist, weil sie das explizite Auftreten des Viererpotentials vermeidet.

2.2 Das Coulomb-Problem für ein spinloses Teilchen

Es ist offensichtlich, wie aus den vorigen Formeln das relativistische Coulomb-Problem entsteht. Für ein spinloses Teilchen der Ladung $-e$ im Coulomb-Feld eines (unendlich schwer angenommenen) Kerns der Ladung Ze am Ort $r = |\boldsymbol{x}| = 0$ gilt $A_\mu = \{-Ze^2/r, 0, 0, 0\}$. Dies entspricht der Ersetzung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \quad \to \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \frac{Ze^2}{r} \tag{85}$$

oder – gleichbedeutend – der Ersetzung

$$H \quad \to \quad H - \frac{Ze^2}{r} \tag{86}$$

in (63), oder auch der modifizierten KG-Gleichung

$$\left(\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{iZe^2}{\hbar r}\right)^2 - \Delta + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\Phi(x) = 0. \tag{87}$$

Wir suchen stationäre Lösungen der Form

$$\Phi(\boldsymbol{x}, t) = f(\boldsymbol{x})e^{-(i/\hbar)Et} \qquad (E > 0) \tag{88}$$

und gelangen so zu der t-unabhängigen Gleichung

$$(-\Delta + v(r))f(\boldsymbol{x}) = 0, \qquad v(r) = \frac{m^2c^4 - (E + Ze^2/r)^2}{\hbar^2c^2} \tag{89}$$

die einer Schrödinger-Gleichung ähnelt mit einem Potential, das sowohl einen $1/r$-Anteil wie auch einen $1/r^2$-Anteil besitzt (beide anziehend). Gehen wir deshalb genau so vor wie gewohnt und setzen

$$f(\boldsymbol{x}) = u_\ell(r)Y_{\ell m}(\boldsymbol{n}), \qquad \boldsymbol{x} = r\boldsymbol{n} \tag{90}$$

mit den Kugelfunktionen $Y_{\ell m}(\boldsymbol{n})$, so folgt:

$$\left[-\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r + \frac{\ell(\ell+1) - (Z\alpha)^2}{r^2} - \frac{2EZ\alpha}{\hbar cr} + k^2\right]u_\ell(r) = 0 \tag{91}$$

wobei wir gesetzt haben (gültig im Gaußschen Maßsystem):

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137,036..} \qquad k^2 = \frac{m^2c^4 - E^2}{\hbar^2c^2} \tag{92}$$

in der Erwartung, daß $E < mc^2$ für gebundene Zustände gilt. Man nennt α auch die Feinstrukturkonstante wegen ihrer besonderen Rolle bei der Beschreibung der Feinstruktur der Spektrallinien.

Schließlich können wir durch eine geignete Skalierung erreichen, daß alle Größen dimensionslos werden. Hierzu setzen wir

$$s = 2kr, \qquad \lambda = \frac{EZ\alpha}{\hbar ck}, \qquad L(L+1) = \ell(\ell+1) - (Z\alpha)^2 \tag{93}$$

und betrachten die Radialwellenfunktion u_ℓ als eine Funktion von s. Dies ergibt:

$$\left[\frac{1}{s}\frac{d^2}{ds^2}s + \frac{\lambda}{s} - \frac{1}{4} - \frac{L(L+1)}{s^2}\right] u_\ell(s) = 0 \tag{94}$$

Mit dieser Schreibweise wurde erreicht, daß das Problem formal genau so aussieht, wie die Radialwellengleichung bei dem nichtrelativistischen H-Atom. Mit einer einzigen Abweichung: L ist nicht mehr ganzzahlig! Dies beeinträchtigt jedoch nicht die Analyse, die wir übernehmen. Konkret: Exponentiell gedämpfte Lösungen erhalten wir genau dann, wenn

$$\lambda = L + 1 + n, \qquad n = 0, 1, 2, 3, \ldots \tag{95}$$

gilt; n ist die Radialquantenzahl, λ (nun nicht mehr ganzzahlig) entspricht der Hauptquantenzahl. Wir wollen dennoch, wie allgemein üblich, weiterhin $n+\ell+1$ die „Hauptquantenzahl" nennen.

Die Lösungen werden durch zugeordnete Laguerre-Polynome beschrieben:

$$u_\ell(s) = s^L e^{-s/2} L_n^{(2L+1)}(s) \tag{96}$$

Hier gilt nun nicht mehr, wie in der Quantenmechanik, daß der obere Index des Laguerre-Polynoms, $2L+1$, ganzzahlig ist. Dies ist auch gar nicht notwendig. Die Definition der Laguerre-Polynome $L_n^{(\alpha)}(z)$ ist allgemein genug, um den Fall $\alpha = 2L+1 > 0$ einzuschließen:

$$L_n^{(\alpha)}(z) = \sum_{m=0}^{n} (-1)^m \binom{n+\alpha}{n-m} \frac{z^m}{m!} \tag{97}$$

Die Bedingungsgleichungen für den Eigenwert E, abhängig von ℓ und n, lauten nun:

$$\frac{EZ\alpha}{\sqrt{m^2c^4 - E^2}} = L + 1 + n \tag{98}$$

$$L(L+1) = \ell(\ell+1) - (Z\alpha)^2, \qquad (L > 0) \tag{99}$$

Es folgt (wir wählen die positive Wurzel)

$$L + \tfrac{1}{2} = \sqrt{(\ell + \tfrac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2} \tag{100}$$

und somit

$$E = mc^2 \left[1 + \left(\frac{Z\alpha}{n + \frac{1}{2} + \sqrt{(\ell+\frac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2}}\right)^2\right]^{-1/2} \tag{101}$$

Man erkennt drei Eigenschaften:

1. Die zufällige Entartung, die für die nichtrelativistische Behandlung charakteristisch ist (n und ℓ mit gleicher Summe führen zur gleichen Energie), ist hier aufgehoben. Eine solche Aufhebung führt zur sogenannten Feinstruktur der Energie-Niveaus.

2. Für $Z\alpha \ll 1$ geht (101) in die Formel

$$E = mc^2 - \frac{m(Z\alpha c)^2}{2(n+\ell+1)^2}$$

über. Die Differenz $E - mc^2$ entspricht der Energie des Bindungszustandes, wie man sie in der Quantenmechanik angibt.

3. Für $Z\alpha > \frac{1}{2}$ und $\ell = 0$ erhalten wir keine vernünftige Lösung: E ist dann komplex! Dies heißt, daß spätestens für Kernladungszahlen $Z > 137/2$ die Anwendbarkeit der relativistischen Quantentheorie aufhört.

Die aus dieser Analyse resultierende Feinstruktur der Eigenwerte stimmt nicht völlig überein mit der Feinstruktur, gewonnen auf der Basis der Dirac-Gleichung. Dies soll später deutlich gemacht werden. Es zeigt uns, daß der Spin des Elektrons selbst dort eingeht, wo man es nicht erwartet: Bei der Ankopplung an ein skalares Potential.

2.3 Die Dirac-Gleichung

Aufgrund formaler Argumente fand Dirac 1928 eine Gleichung, die besser als die Klein-Gordon-Gleichung geeignet war, ein Elektron zu beschreiben. Er ging dabei von dem Schrödinger-Ansatz aus,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi, \tag{102}$$

wählte aber für den Energie-Operator H einen Ansatz, der linear in den räumlichen Ableitungen war:

$$H = -i\hbar c\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta mc^2 \tag{103}$$

Ausführlich:

$$\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla = \alpha_1 \frac{\partial}{\partial x^1} + \alpha_2 \frac{\partial}{\partial x^2} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial x^3} \tag{104}$$

Dirac war sich bewußt, daß die Koeffizienten α_i nicht einfach „Zahlen“ sein konnten. Sonst wäre ja $\boldsymbol{\alpha}$ ein Vektor, der eine ausgezeichnete Richtung im Raum festlegen würde. Also nahm er an, daß die Größen α_i und β in Wirklichkeit $n \times n$-Matrizen sind. Gleichzeitig mußte er annehmen, daß die Wellenfunktion ψ n Komponenten besitzt, die er zweckmäßig in einer Spalte anordnete (als eine $n \times 1$-Matrix):

$$\psi = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{bmatrix}$$

Damit wird (102) zu einem System von n gekoppelten Gleichungen. Wellenfunktionen ψ mit mehreren Komponenten dieser Art, wollen wir *Spinoren* nennen.

Wenn diese Gleichungen ein freies Teilchen der Masse m beschreiben sollen, so ist die Mindestforderung, daß aus ihnen die richtige Energie-Impuls- Beziehung, also die Klein-Gordon-Gleichung für alle Komponenten von ψ folgen muß. Das führt zur Bedingung

$$H^2 = -\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4 \tag{105}$$

Nun ist

$$
\begin{aligned}
H^2 &= -\hbar^2 c^2 \sum_{j,k=1}^{3} \alpha_j \alpha_k \frac{\partial}{\partial x^j} \frac{\partial}{\partial x^k} \\
&\quad -i\hbar m c^3 \sum_{j=1}^{3} (\alpha_j \beta + \beta \alpha_j) \frac{\partial}{\partial x^j} \\
&\quad +\beta^2 m^2 c^4
\end{aligned}
$$

Hier können wir die Ersetzung

$$\alpha_j \alpha_k \quad \to \quad \tfrac{1}{2}(\alpha_j \alpha_k + \alpha_k \alpha_j)$$

vornehmen und erhalten durch einen Vergleich mit (105) die algebraischen Bedingungen

$$\alpha_j \alpha_k + \alpha_k \alpha_j = 2\delta_{jk} \mathbb{1}, \qquad \alpha_j \beta + \beta \alpha_j = 0, \qquad \beta^2 = \mathbb{1} \tag{106}$$

Dirac nahm ferner an, daß die Spinoren ψ, zu festen Zeiten t, Elemente eines Hilbertraumes sind mit dem Skalarprodukt

$$(\psi, \psi') = \int d^3x \, \psi(\boldsymbol{x}, t)^* \psi'(\boldsymbol{x}, t) \tag{107}$$

wobei der konjugierte Spinor ψ^* als eine Zeile interpretiert wird (als eine $1 \times n$-Matrix):

$$\psi^* = [\bar{\psi}_1, \bar{\psi}_2, \ldots, \bar{\psi}_n]$$

Damit die Energie H bezüglich dieses so gewählten Skalarproduktes reelle Erwartungswerte bekommt, müssen die Matrizen α_i und β hermitesch sein.

Behauptung 1 Die Dimension n der Dirac-Matrizen muß gerade sein.

Zum Beweis nutzen wir, daß offenbar $\alpha_i^2 = \beta^2 = \mathbb{1}$ gilt. Die Eigenwerte aller Dirac-Matrizen sind also ± 1. Sodann folgt aus (106)

$$\alpha_i = -\beta^{-1} \alpha_i \beta$$

also $\operatorname{Spur} \alpha_i = -\operatorname{Spur} \alpha_i$ und somit $\operatorname{Spur} \alpha_i = 0$. Ebenso

$$\beta = -\alpha_i^{-1} \beta \alpha_i$$

und somit $\operatorname{Spur} \beta = 0$. Da die Spur die Summe aller Eigenwerte ist, muß die Anzahl der positiven Eigenwerte (+1) und die der negativen Eigenwerte (-1) gleich sein. Also ist die Dimension gerade.

Behauptung 2 Die kleinste Dimension, in der Dirac-Matrizen existieren ist $n = 4$.

Wir haben nur zu zeigen, daß $n = 2$ ausgeschlossen ist. Nehmen wir also an, daß $n = 2$ sei. Dann können wir die α_i mit den Pauli-Matrizen identifizieren, da sie die gleichen Relationen erfüllen. Sei M eine beliebige 2×2-Matrix. Dann existieren komplexe Zahlen $c_0, \ldots, c_3$, so daß

$$M = c_0 \mathbb{1} + c_1 \alpha_2 \alpha_3 + c_2 \alpha_3 \alpha_1 + c_3 \alpha_1 \alpha_2$$

Aus $\beta\alpha_i = -\alpha_i\beta$ folgt $[\beta, M] = 0$. Da dies für alle Matrizen M gilt und die Algebra dieser Matrizen irreduzibel ist, kann β nur ein Vielfaches der Einheit $\mathbb{1}$ sein. Da die Spur von β verschwindet, gilt $\beta = 0$, was $\beta^2 = \mathbb{1}$ widerspricht.

Wir wenden uns dem interessanten Fall $n = 4$ zu und finden hier Dirac-Matrizen der Form

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \qquad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \tag{108}$$

Wir haben hier eine Blockform gewählt: Jede Eintragung entspricht einer 2×2-Matrix. Die σ_i sind die Pauli-Matrizen. Man kann zeigen, daß jede andere Wahl zu dieser Darstellung äquivalent ist in dem Sinne, daß zwei beliebige Darstellungen durch eine unitäre Transformation ineinander überführt werden können. Dies garantiert, daß, bei Wahl von $n = 4$, nur eine Dirac-Theorie existiert.

Bemerkenswert an der Dirac-Theorie ist, daß es hier eine Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla \cdot \boldsymbol{j} = 0 \tag{109}$$

mit $\rho \geq 0$ gibt. Dazu setzt man

$$\rho = \psi^*\psi, \qquad \boldsymbol{j} = c\psi^*\boldsymbol{\alpha}\psi \tag{110}$$

Zum Beweis von (109) multipliziert man die Dirac-Gleichung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -i\hbar c\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla\psi + mc^2\beta\psi$$

von links mit ψ^* und die konjugierte Dirac-Gleichung

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^* = i\hbar c\nabla\psi^* \cdot \boldsymbol{\alpha} + mc^2\psi^*\beta$$

von rechts mit ψ und bildet die Differenz der rechten bzw. der linken Seiten, so entsteht gerade (109). Aus der Kontinuitätsgleichung folgt, daß $\int d^3x\, \rho$ eine Erhaltungsgröße ist. Es bleiben zwei Probleme, die wir zurückstellen wollen:

1. In welchem Sinne ist die Dirac-Gleichung Lorentz-kovariant, d.h. wie transformiert sich der Spinor $\psi(x)$ unter einer Lorentz-Transformation?

2. Ist garantiert, daß sich $j^\mu(x) = \{c\rho, \boldsymbol{j}\}$ dabei wie ein Vierervektor transformiert?

2.4 Der nichtrelativistische Limes

Da ein Dirac-Spinor vier (statt zwei) Komponenten hat, sind wir zu recht mißtrauisch, ob die Dirac-Theorie geeignet ist, Elektronen zu beschreiben. Das Vertrauen in die neue Theorie können wir nur stärken, indem wir die Freiheitsgrade bei gegebenen Impuls des Teilchens untersuchen. Es genügt, das Ruhsystem des Teilchens zu wählen, wenn wir schon wissen, daß die Theorie Lorentz-kovariant formuliert ist. Für ein ruhendes Elektron lautet die Dirac-Gleichung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \beta mc^2\psi \tag{111}$$

Bei Wahl von β, wie im vorigen Abschnitt vorgenommen, ergeben sich vier unabhängige Lösungen:

$$\begin{bmatrix} e^{-(i/\hbar)mc^2t} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0 \\ e^{-(i/\hbar)mc^2t} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ e^{(i/\hbar)mc^2t} \\ 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ e^{(i/\hbar)mc^2t} \end{bmatrix} \tag{112}$$

Die ersten beiden gehören zu positiver, die letzten beiden zu negativer Frequenz. Also auch hier treffen wir auf die Teilchen-Antiteilchen-Symmetrie. Die ersten beiden Lösungen verbinden wir mit den beiden Spin-Zuständen des Elektrons, die letzten beiden Lösungen mit den Spin-Zuständen des Positrons. Entsprechend verfahren wir, wenn wir Protonen-Antiprotonen oder Neutronen-Antineutronen beschreiben.

Doch wie ist die Verbindung zur Paulischen Spintheorie? Zu Beantwortung führen wir die bekannte Ersetzung

$$i\hbar\partial_\mu \quad \to \quad i\hbar\partial_\mu - \frac{e}{c}A_\mu \tag{113}$$

in der Dirac-Gleichung durch, beachten $A^\mu = \{\Phi, \boldsymbol{A}\}$ und erhalten den Energie-Operator

$$H = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \Big(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\Big) + \beta mc^2 + e\Phi \tag{114}$$

Hier können wir auch schreiben

$$H = H_0 + H_1, \qquad H_1 = -e\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{A} + e\Phi, \tag{115}$$

wobei H_1 die Wechselwirkungsenergie bezeichnet. Dadurch wird deutlich, daß $c\boldsymbol{\alpha}$ in der Dirac-Theorie die Rolle der Geschwindigkeit übernimmt (nicht zu identifizieren mit Impuls/Masse). Denn klassisch – etwa in der Lagrange-Funktion – geben wir diese Energie durch den Ausdruck $-\frac{e}{c}\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{A} + e\Phi$ wieder. Die Vorstellung von $c\boldsymbol{\alpha}$ als Geschwindigkeit ist auch im Einklang mit der Definition der Stromdichte (110).

Für den Limes $c \to \infty$ ist es bequem, den Dirac-Spinor ψ durch zweikomponentige Subspinoren auszudrücken:

$$\psi = e^{-(i/\hbar)mc^2t} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \tag{116}$$

wobei wir ϕ und χ als raum- und zeitabhängig ansehen, jedoch langsam veränderlich in t verglichen mit dem Vorfaktor $e^{-(i/\hbar)mc^2t}$. Die Dirac-Gleichung erhält in dieser Darstellung die Form von zwei gekoppelten Gleichungen

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi \;=\; c\boldsymbol{P} \cdot \boldsymbol{\sigma}\chi + e\Phi\phi \tag{117}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi \;=\; c\boldsymbol{P} \cdot \boldsymbol{\sigma}\phi + e\Phi\chi - 2mc^2\chi \tag{118}$$

mit $\boldsymbol{P} = (\hbar/i)\nabla - (e/c)\boldsymbol{A}$. Die zweite dieser Gleichungen approximieren wir so:

$$0 = c\boldsymbol{P} \cdot \boldsymbol{\sigma}\phi - 2mc^2\chi$$

Hierbei haben wir Gebrauch gemacht von zwei Annahmen:

$$|e\Phi| \ll mc^2, \qquad \hbar|\dot{\chi}/\chi| \ll mc^2$$

Das Ergebnis zeigt uns, daß χ gegenüber ϕ um einen Faktor $1/c$ kleiner ist. Man nennt deshalb χ die „großen Komponenten“und χ die „kleinen Komponenten“der Wellenfunktion ψ. Nun können wir χ eliminieren mit dem Ergebnis:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi = \left(\frac{(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{\sigma})^2}{2m} + e\Phi\right)\phi \tag{119}$$

wobei $\boldsymbol{P} = (\hbar/i)\nabla - (e/c)\boldsymbol{A}$ gesetzt wurde. Beachtet man, daß die Komponenten des Vektors $\boldsymbol{P}$ nicht miteinander vertauschen und daß

$$\boldsymbol{P}\times\boldsymbol{P} = i\frac{e\hbar}{c}\boldsymbol{B}$$

gilt ($\boldsymbol{B}$ = Magnetfeld), so folgt (s. Anmerkung unten)

$$(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{\sigma})^2 = \boldsymbol{P}^2 - \frac{e\hbar}{c}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}$$

Nun setzen wir noch $\boldsymbol{s} = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}$ und fassen zusammen:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi = \left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 - \frac{e}{mc}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{B} + e\Phi\right]\phi \tag{120}$$

Dies ist aber gerade die Pauli-Gleichung für eine zweikomponentige Wellenfunktion. Hierbei ist noch nicht angenommen, daß das Magnetfeld schwach ist. Vernachlässigen wir hingegen den in $\boldsymbol{A}$ quadratischen Term und nehmen auch noch an, daß $\boldsymbol{B} = \nabla\times\boldsymbol{A}$ homogen ist, so können wir $\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{x}$ setzen und erhalten

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi = \left[\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e}{2mc}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{s})\right]\phi \tag{121}$$

in völliger Übereinstimmung mit (44). Insbesondere haben wir auf diese Weise gezeigt, daß das gyromagnetische Verhältnis $g = 2$ für den Spin aus der Dirac-Gleichung folgt: Ein früher Triumpf der Dirac-Theorie!

Anmerkung. Bekanntlich erfüllen die Pauli-Matrizen die Relationen

$$\sigma_j\sigma_k = \begin{cases} i\sigma_\ell & (j,k,\ell) = (1,2,3) \text{ zyklisch} \\ \mathbb{1} & \text{j=k} \end{cases}$$

Diese kann man auch ohne Verwendung von Komponenten so zusammenfassen: Für alle Vektoren $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ gilt

$$(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\sigma}) = \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} + i(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\cdot\boldsymbol{\sigma}$$

Diese Formel behält auch dann ihre Gültigkeit, wenn $\boldsymbol{a}$ und $\boldsymbol{b}$ Komponenten besitzen, die nicht miteinander kommutieren (z.B. Differentialoperatoren).

2.5 Gamma-Matrizen und Lorentz-Kovarianz

Wir schreiben heute die Dirac-Gleichung nicht mehr in der ursprünglichen, von Dirac angegebenen Form, sondern in einer mehr zweckmäßigen Form, die der Symmetrie aller Komponenten $\{x^0, x^1, x^2, x^3\}$ Rechnung trägt. Zu diesem Zweck führen wir γ-Matrizen ein:

$$\gamma^0 = \beta, \qquad \gamma^i = \beta\alpha_i \qquad (i = 1, 2, 3) \tag{122}$$

ein. Aufgrund der algebraischen Beziehungen, die die Dirac-Matrizen untereinander erfüllen, finden wir nun:

$$\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}\mathbb{1} \tag{123}$$

wobei $g^{\mu\nu} = \mathrm{diag}\{1, -1, -1, -1\}$ den metrischen Tensor der Raumzeit bezeichnet. Die γ-Matrizen sind nun nicht mehr hermitesch. Vielmehr gilt: Die Matrizen γ^0, $i\gamma^1$, $i\gamma^2$, $i\gamma^3$ sind hermitesch (die Vorfaktoren haben die Quadrate 1, -1, -1, -1), was man auch so formulieren kann:

$$(\gamma^\mu)^* = \gamma^0\gamma^\mu\gamma^0 \tag{124}$$

In der Dirac-Darstellung haben die γ-Matrizen die Gestalt

$$\gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix} \qquad \gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \tag{125}$$

Das System der γ-Matrizen erlaubt die Konstruktion einer 4×4-Matrix $\not{a}$ aus irgendeinem Vierervektor a vermöge der Vorschrift

$$\not{a} = a_\mu\gamma^\mu = a_0\gamma^0 + a_1\gamma^1 + a_2\gamma^2 + a_3\gamma^3 \tag{126}$$

d.h., $\not{a}$ wird als eine Summe von vier Matrizen dargestellt, und die Abbildung $a \mapsto \not{a}$ ist linear. Ferner können wir die Relationen (123) nun ohne Benutzung von Komponenten formulieren:

$$\not{a}\not{b} + \not{b}\not{a} = 2ab\mathbb{1} \tag{127}$$

Hier bezeichnet ab das Lorentz-invariante Produkt der Vierervektoren a und b.

Wir gehen einen Schritt weiter und erlauben auch die Konstruktion einer Matrix $\not{\partial}$, deren Elemente Differentialoperatoren sind:

$$\not{\partial} = \gamma^\mu\partial_\mu, \qquad \partial_\mu = \partial/\partial x^\mu$$

Die Dirac-Gleichung eines freien Teilchens der Masse m nimmt nun die sehr einfache Gestalt

$$(i\hbar\not{\partial} - mc)\psi(x) = 0 \tag{128}$$

an. Bei Ankopplung an ein äußeres elektromagnetisches Feld wird hieraus:

$$\left(i\hbar\not{\partial} - \frac{e}{c}\not{A} - mc\right)\psi(x) = 0 \tag{129}$$

Das Relativitätsprinzip verlangt, daß bei einem Wechsel des Bezugssystems, d.h. unter einer Lorentz-Transformation $x' = \Lambda x$, die Wellenfunktion ψ übergeht in eine transformierte Wellenfunktion ψ', derart, daß eine Beziehung der Art

$$\psi'(x') = S(\Lambda)\psi(x) \tag{130}$$

besteht. Dies entspricht der *passiven* Auffassung einer Lorentz-Transformation (ein Zustand, zwei Beobachter). Wir gelangen zu der *aktiven* Auffassung (ein Beobachter, zwei Zustände) durch eine einfache Umschreibung:

$$\psi'(x) = S(\Lambda)\psi(\Lambda^{-1}x) \tag{131}$$

Es muß möglich sein, die Matrix $S(\Lambda)$ so zu wählen, daß $\psi'(x)$ wiederum Lösung der Dirac-Gleichung (128) ist. Dann operiert die Lorentz-Gruppe vermöge (131) auf dem linearen Raum der Lösungen der Dirac-Gleichung. Eine Rechnung zeigt uns, wann die Bedingung erfüllt ist:

$$\begin{aligned}(i\hbar\partial\!\!\!/ - mc)\psi'(x) &= \left(i\hbar\gamma^\mu\frac{\partial}{\partial x^\mu} - mc\right)S(\Lambda)\psi(\Lambda^{-1}x)\\ &= \left(i\hbar\gamma^\mu(\Lambda^{-1})^\nu{}_\mu\frac{\partial}{\partial y^\nu} - mc\right)S(\Lambda)\psi(y) \qquad (y=\Lambda^{-1}x)\\ &= S(\Lambda)\left(i\hbar\gamma^\nu\frac{\partial}{\partial y^\nu} - mc\right)\psi(y) = 0\end{aligned}$$

Die letzte Zeile folgt unter der Voraussetzung daß

$$S(\Lambda)\gamma^\nu = (\Lambda^{-1})^\nu{}_\mu\gamma^\mu S(\Lambda)$$

gilt, was wir auch so schreiben können:

$$S(\Lambda)\gamma^\nu S(\Lambda)^{-1} = (\Lambda^{-1})^\nu{}_\mu\,\gamma^\mu \tag{132}$$

In Worten: Grundsätzlich wirkt eine Lorentz-Transformation auf die γ-Matrizen und erzeugt so ein neues System von Matrizen,

$$\hat\gamma^\nu = (\Lambda^{-1})^\nu{}_\mu\,\gamma^\mu,$$

mit den gleichen algebraischen Eigenschaften:

$$\hat\gamma^\mu\hat\gamma^\nu + \hat\gamma^\nu\hat\gamma^\mu = g^{\mu\nu}\mathbb{1}$$

Relativistische Kovarianz ist gewährleistet, wenn jedes so erzeugte neue System von γ-Matrizen aus dem alten System durch eine Äquivalenztransformation – abhängig von Λ – hervorgeht: Dies ist der Inhalt der Forderung (132). Weder haben wir die Matrizen $S(\Lambda)$ bislang konstruiert noch haben wir ihre Existenz bewiesen. Der nächste Abschnitt dient dieser Aufgabe.

2.6 Die van-der-Waerden-Darstellung

Für die Konstruktion der Matrizen $S(\Lambda)$ ist eine andere Darstellung der γ-Matrizen geeigneter, die van-der-Waerden-Darstellung:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1} \\ \mathbb{1} & 0 \end{pmatrix} \qquad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \qquad (i=1,2,3) \tag{133}$$

In dieser Darstellung erhalten wir:

$$\not{x} = \begin{pmatrix} 0 & x^0 \mathbb{1} + \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ x^0 \mathbb{1} - \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \tag{134}$$

Eine bemerkenswerte Konstruktion erkennen wir in dem rechten oberen Block: Jedem Punkt x des Minkowski-Raumes ist eine hermitesche 2×2-Matrix $\underline{x}$ zugeordnet vermöge der Vorschrift

$$\underline{x} = x^0 \mathbb{1} + \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} x^0 + x^3 & x^1 - ix^2 \\ x^1 + ix^2 & x^0 - x^3 \end{pmatrix} \tag{135}$$

Die Beziehung zwischen den Punkten x und den hermiteschen Matrizen ist 1:1 und linear. Mehr noch, es gilt

$$\mathrm{Det}\, \underline{x} = (x^0)^2 - \boldsymbol{x}^2 \equiv x^2 \tag{136}$$

d.h. die Determinante erweist sich als Lorentz-invariant. Dies gibt uns die Möglichkeit, eine Lorentz-Transformation aus einer Matrix-Transformation zu gewinnen. Sei nämlich a eine beliebige (komplexe) 2×2-Matrix. Dann gilt

$$\mathrm{Det}\,(a\underline{x}a^*) = |\mathrm{Det}\, a|^2 \mathrm{Det}\, \underline{x}$$

Andererseits ist $a\underline{x}a^*$ durch Konstruktion hermitesch, so daß ein Punkt x' existiert, für den $\underline{x}' = a\underline{x}a^*$ gilt. Man erkennt, daß die Abbildung $x \mapsto x'$ linear ist. Wir schreiben deshalb $x' = \Lambda x$, und, da Λ von der Matrix a abhängig ist: $\Lambda = \Lambda(a)$. Fordern wir noch, daß $\mathrm{Det}\, a = 1$ gilt, so haben wir

$$\mathrm{Det}\, \underline{x}' = \mathrm{Det}\, \underline{x}$$

und $\Lambda(a)$ ist eine Lorentz-Transformation. Man bezeichnet

$$\mathrm{SL}(2, \mathrm{C}) = \{a \in \mathrm{GL}(2, \mathrm{C}) \,|\, \mathrm{Det}\, a = 1\}$$

als die *spezielle lineare Gruppe* in zwei Dimensionen (GL(2,C) ist die volle lineare Gruppe).

Zur Erinnerung: In der Quantenmechanik tritt bei der Behandlung des Spins die unitäre Gruppe SU(2) auf, und zwar in der Weise, daß jeder Matrix $u \in$SU(2) eine Rotation $R(u)$ des $\mathbb{R}^3$ zugeordnet ist. Die Lorentz-Transformationen $\Lambda(a)$ erweitern die Abbildung in folgendem Sinne: Bei Wahl von $a = u \in$SU(2) gilt

$$\Lambda(u) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & R(u) \end{pmatrix}$$

Man erkennt dies unmittelbar an den Definitionen. Den Unterschied zwischen $R(u)$ und $\Lambda(u)$ verwischend, nennen wir im folgenden $\Lambda(u)$ eine „Rotation“.

Wir notieren eine Reihe von Tatsachen (einige ohne Beweis).

1. Es gilt die Darstellungsrelation $\Lambda(ab) = \Lambda(a)\Lambda(b)$. Zum Beweis berechnen wir

$$(ab)\underline{x}(ab)^* = a(b\underline{x}b^*)a^* = a\underline{x}'a^* = \underline{x}''$$

wobei $x' = \Lambda(b)x$ und $x'' = \Lambda(a)x'$ gesetzt wurde. Aufgrund der Konstruktion gilt

$$\Lambda(ab)x = x'' = \Lambda(a)\Lambda(b)x$$

für alle Punkte x und somit folgt unsere Behauptung.

2. Die Gruppe SL(2,C) ist zusammenhängend, und die Abbildung $a \mapsto \Lambda(a)$ ist stetig. Folglich ist das Bild der Gruppe SL(2,C) eine zusammenhängende Untergruppe der Gruppe $\mathcal{L}$ aller Lorentz-Transformationen. Eine Analyse (siehe die Übungen) zeigt, daß man alle Elemente der *eigentlichen orthochronen Lorentz-Gruppe* erreicht. Es handelt dabei um Lorentz-Transformationen Λ mit $\mathrm{Det}\Lambda = 1$ und ${\Lambda^0}_0 > 0$. Diese Gruppe wird mit $\mathcal{L}_+^\uparrow$ bezeichnet.

3. Die Abbildung
$$\mathrm{SL(2,C)} \to \mathcal{L}_+^\uparrow, \quad a \mapsto \Lambda(a)$$
ist 2:1. Genauer: Die Matrizen a und $-a$ haben das gleiche Bild $\Lambda(a)$. Zur Erinnerung: Die Abbildung $u \mapsto R(u)$ ist auch 2:1. Denn $R(-u) = R(u)$.

4. Die Gruppe SL(2,C) ist einfach zusammenhängend (jeder geschlossene Weg in der Gruppe läßt sich stetig auf einen Punkt – die Einheit – zusammenziehen). Die Gruppe $\mathcal{L}_+^\uparrow$ ist jedoch nicht einfach zusammenhängend (es gibt zwei Klassen homotoper Wege). Die Gruppe SL(2,C) heißt die *universelle Überlagerungsgruppe* von $\mathcal{L}_+^\uparrow$. Sie hat doppelt so viele Gruppenelemente und hebt so den nicht einfachen Zusammenhang auf. Umgekehrt kann man durch die Äquivalenzrelation $a \sim -a$ in SL(2,C) eine zweifach zusammenhängende Gruppe gewinnen (die zu $\mathcal{L}_+^\uparrow$ äquivalent ist).

Zweidimensionale Darstellungen D der Gruppe SL(2,C) sind leicht zu finden. Sei $a \in$ SL(2,C) beliebig.

- Die Vorschrift $D(a) = \bar{a}$ definiert eine Darstellung. Sie entsteht durch komplexe Konjugation aller Matrixelemente.
- Die Vorschrift $D(a) = (a^{-1})^* = (a^*)^{-1}$ definiert ebenfalls eine Darstellung. Sie entsteht durch Invertieren und Übergang zur adjungierten Matrix.

Satz. *Die beiden vorgenannten Darstellungen sind äquivalent, d.h. es gilt*

$$a^{*-1} = \epsilon \bar{a} \epsilon^{-1}, \qquad \epsilon = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{137}$$

Die Matrix ϵ ist unitär, und die Pauli-Matrizen erfüllen die Beziehung

$$-\sigma_i = \epsilon \bar{\sigma}_i \epsilon^* \qquad (i = 1, 2, 3) \tag{138}$$

Die Aussagen bestätigt man durch einfaches Nachrechnen. Die letzte Aussage kann man auch so fassen:

$$x^0 \mathbb{1} - \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \epsilon \overline{(x^0 \mathbb{1} - \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{\sigma})} \epsilon^* = \epsilon \bar{\underline{x}} \epsilon^* \tag{139}$$

Führen wir in der Transformationsformel $\underline{x}' = a \underline{x} a^*$ an allen Matrixelementen die komplexe Konjugation aus, so ergibt sich:

$$\overline{\underline{x}'} = \bar{a} \bar{\underline{x}} \bar{a}^* \tag{140}$$

Die Beziehung (134) können wir nun so schreiben:

$$\not{x} = \begin{pmatrix} 0 & \underline{x} \\ \epsilon\bar{\underline{x}}\epsilon^* & 0 \end{pmatrix}$$

Ziel unserer Bemühungen sollte sein, die Transformationsmatrix $S(a)$ zu finden, die die Bedingungen

$$S(a)\not{x}S(a)^{-1} = \not{x}', \qquad x' = \Lambda(a)x \tag{141}$$

für alle Punkte x erfüllt. Es zeigt sich, daß die Matrix

$$S(a) = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & a^{*-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & \epsilon\bar{a}\epsilon^* \end{pmatrix} \tag{142}$$

dies leistet. Denn

$$\begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & \epsilon\bar{a}\epsilon^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \underline{x} \\ \epsilon\bar{\underline{x}}\epsilon^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon\bar{a}^*\epsilon^* & 0 \\ 0 & a^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \underline{x}' \\ \epsilon\bar{\underline{x}}'\epsilon^* & 0 \end{pmatrix}$$

Die Bedingungen (141) sind in der Tat nichts anderes als eine basisunabhängige Formulierung von

$$S(a)\gamma^\nu S(a)^{-1} = (\Lambda(a)^{-1})^\nu{}_\mu \gamma^\mu$$

(Beachte: $\Lambda^{-1} = g\Lambda^T g$, d.h. $(\Lambda^{-1})^\mu{}_\nu = \Lambda_\nu{}^\mu$, gültig für jede Lorentz-Transformation Λ).

Die Matrizen $S(a)$ sind block-diagonal. Dies legt nahe, den Dirac-Spinor ψ nach zweikomponentigen Spinoren zu zerlegen:

$$\psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}$$

Die Vorschrift $\psi'(x') = S(a)\psi(x)$, $x' = \Lambda(a)x$, gewinnt damit eine sehr einfache Gestalt:

$$\phi'(x') = a\phi(x), \qquad \chi'(x') = a^{*-1}\chi(x)$$

Man sagt deshalb: Die Darstellung $S : a \mapsto S(a)$ der SL(2,C) zerfällt in die Teildarstellungen $a \to a$ und $a \to a^{*-1}$. Sie ist damit *reduzibel* und *direkte Summe* dieser Teildarstellungen.

Fazit: Die Dirac-Theorie ist relativistisch kovariant und benutzt eine reduzible 4-dimensionale Darstellung der SL(2,C) *zur Transformation ihrer Zustände. Die Darstellung ist nicht unitär.*

Um zu ergründen, warum vier Dimensionen notwendig sind, erweitern wir die Gruppe $\mathcal{L}_+^\uparrow$ der Lorentz-Transformationen um die Raumspiegelung:

$$x = \{x^0, \boldsymbol{x}\} \quad \to \quad x' = \{x^0, -\boldsymbol{x}\} \tag{143}$$

Die so entstehende größere Gruppe $\mathcal{L}^\uparrow$ heißt die orthochrone Lorentz-Gruppe. Ihr gehören alle Matrizen $\Lambda \in \mathcal{L}$ an mit $\Lambda^0{}_0 > 0$. Kovarianz der Dirac-Theorie im erweiterten Sinne liegt vor, falls es eine Matrix gibt, die eine Raumspiegelung an den γ-Matrizen ausführt (im Sinne einer Ähnlichkeitstransformation). Tatsächlich gilt

$$\gamma^0\gamma^\mu\gamma^0 = \begin{cases} \gamma^0 & \text{für } \mu = 0 \\ -\gamma^i & \text{für } \mu = i = 1,2,3 \end{cases} \tag{144}$$

und die Raumspiegelung ist durch

$$\psi'(x') = \gamma^0 \psi(x) \tag{145}$$

realisiert. Nach Zerlegung in zweikomponentige Spinoren (s. oben) bedeutet dies aber eine Vertauschung der Rollen von ϕ und χ:

$$\phi'(x') = \chi(x), \qquad \chi'(x') = \phi(x) \tag{146}$$

Die Darstellung der größeren Gruppe ist somit irreduzibel, d.h. eine Zerlegung ist nicht mehr möglich.

2.7 Einfache Konsequenzen der Kovarianz

Wir wenden uns nun der Untergruppe SU(2) zu, deren Elemente u wir mit Drehungen $\Lambda(u)$ verknüpfen. Wir sehen sofort, daß

$$S(u) = \begin{pmatrix} u & 0 \\ 0 & u \end{pmatrix}$$

unitär ist. Folglich transformiert sich die Dichte $\rho = \psi^* \psi$ unter Drehungen wie ein Skalar: $\rho'(x') = \rho(x)$. Den Spin-Operator gewinnen wir wie üblich durch Übergang zur Lie-Algebra der SU(2) in der hier vorliegenden Darstellung. Die Lie-Algebra der SU(2) selbst wird ja durch die Pauli-Matrizen σ_i erzeugt. Folglich wird die Lie-Algebra der Darstellung $S(u)$ durch eine Verdopplung der Pauli-Matrizen gewonnen. Dies zeigt uns, daß der Spin-Operator der Dirac-Theorie durch

$$\Sigma = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \tag{147}$$

gegeben ist. Diese Form ist korrekt nicht nur bei Verwendung der van-der-Waerden-Darstellung der γ-Matrizen sondern auch für die Dirac-Darstellung.

Sodann bemühen wir uns um eine kompakte Schreibweise für den Strom

$$j^\mu = \{c\rho, \boldsymbol{j}\}, \quad \rho = \psi^* \psi, \quad \boldsymbol{j} = c\psi^* \boldsymbol{\alpha} \psi$$

Da $\gamma^0 \gamma^\mu = \{\mathbb{1}, \boldsymbol{\alpha}\}$ gilt, können wir

$$j^\mu = c\overline{\psi}\gamma^\mu \psi, \qquad \overline{\psi} = \psi^* \gamma^0 \tag{148}$$

schreiben. Dieser Schreibweise liegt eine veränderte Vorschrift zur Konstruktion des „adjungierten“ Spinors zugrunde. Man liest $\overline{\psi}$ allgemein als „psi-quer“, muß sich allerdings hüten, darunter eine bloße komplexe Konjugation zu verstehen.

In Erweiterung dieser Konstruktion definieren wir für jede 4×4-Matrix A die adjungierte Matrix als

$$\overline{A} = \gamma^0 A^* \gamma^0$$

während für jeden Skalar $\overline{\lambda}$ die komplexe Konjugation bezeichnet. Dann gelten die offensichtlichen Regeln:

$$\begin{array}{rcll} \overline{\lambda\psi} &=& \overline{\psi}\,\overline{\lambda} & (\lambda \text{ Skalar, } \psi \text{ Spinor}) \\ \overline{A\psi} &=& \overline{\psi}\,\overline{A}, & (A \text{ Matrix, } \psi \text{ Spinor}) \\ \overline{AB} &=& \overline{B}\,\overline{A}, & (A, B \text{ Matrizen}) \\ \overline{\overline{\psi_1}\psi_2} &=& \overline{\psi_2}\psi_1 & (\psi_1,\ \psi_2 \text{ Spinoren}) \end{array}$$

Nun folgt unmittelbar:

$$\overline{\gamma^\mu} = \gamma^\mu, \qquad \overline{S(a)} = S(a)^{-1} \tag{149}$$

Wir sagen deshalb, die γ-Matrizen seien pseudo-hermitesch und die Darstellung $S(a)$ der SL(2,C) sei pseudo-unitär. Aufgrund der obigen Regeln ist $\overline{\psi}\gamma^\mu\psi$ reell und transformiert sich wie ein Vektor (genauer: wie ein Vektorfeld):

$$\begin{array}{rcl} \overline{\psi'(x')}\gamma^\mu\psi'(x') &=& \overline{S(a)\psi(x)}\gamma^\mu S(a)\psi(x) \\ &=& \overline{\psi(x)}\ \overline{S(a)}\gamma^\mu S(a)\psi(x) \\ &=& \overline{\psi(x)}\, S(a)^{-1}\gamma^\mu S(a)\psi(x) \\ &=& [\Lambda(a)]^\mu{}_\nu\, \overline{\psi(x)}\gamma^\nu\psi(x) \end{array}$$

Der Strom der Dirac-Theorie hat somit das korrekte Verhalten:

$$j'^\mu(x') = \Lambda^\mu{}_\nu\, j^\nu(x), \qquad x' = \Lambda x$$

Diese Formel gilt auch dann, wenn $\Lambda \in \mathcal{L}^\uparrow$. Dazu hat man nur den Spezialfall einer Raumspiegelung zu untersuchen, was trivial ist.

Da die Darstellung $S(a)$ reduzibel ist, gibt es Matrizen, die mit ihr vertauschen. Diese Matrizen bilden notwendig eine Algebra, und man erkennt sofort, daß sie zweidimensional ist:

$$\begin{pmatrix} \alpha\mathbb{1} & 0 \\ 0 & \beta\mathbb{1} \end{pmatrix} = \tfrac{1}{2}(\alpha+\beta)\begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & \mathbb{1} \end{pmatrix} + \tfrac{1}{2}(\alpha-\beta)\begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \tag{150}$$

$(\alpha, \beta \in \mathbb{C})$. Mit anderen Worten: Die Algebra wird erzeugt durch die Einheit und die Matrix

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \tag{151}$$

Die γ_5-Matrix hat bemerkenswerte Eigenschaften:

- Sie antivertauscht mit allen anderenγ-Matrizen :

$$\gamma_5\gamma^\mu + \gamma^\mu\gamma_5 = 0$$

- Insbesondere gilt $\gamma^0\gamma_5\gamma^0 = -\gamma_5$, d.h. während sich $\bar{\psi}\psi$ wie ein Skalar transformiert, ist $\bar{\psi}\gamma_5\psi$ eine Pseudo-Skalar (erhält ein Vorzeichen unter einer Raumspiegelung). Während sich $\bar{\psi}\gamma^\mu\psi$ wie ein Vektor transformiert, ist $\bar{\psi}\gamma^\mu\gamma_5\psi$ ein Axialvektor (erhält ein extra Vorzeichen unter einer Raumspiegelung).

- Die Matrizen $\frac{1}{2}(\mathbb{1}+\gamma_5)$ und $\frac{1}{2}(\mathbb{1}-\gamma_5)$ sind Projektoren im Spinorraum: Sie projizieren auf die beiden (unter $S(a)$) invarianten Unterräume.
- Es liege irgendeine Darstellung der γ-Matrizen vor. Dann kann man die für diese Darstellung spezifische γ_5-Matrix in jedem Fall durch die Gleichung

  $$\gamma_5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$$

  erhalten.

Schließlich begegnet man gelegentlich den Matrizen

$$\sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu] \tag{152}$$

Sie sind antisymmetrisch in den Indices μ und ν. Die Bilinearform $\bar{\psi}\sigma^{\mu\nu}\psi$ ist reell und transformiert sich wie ein antisymmetrischer Tensor (analog dem Feldstärke-Tensor $F^{\mu\nu}$ der Maxwell-Theorie). Der Spin-Operator kann (unabhängig von der gewählten Realisierung der γ-Matrizen) durch die Vorschrift

$$\Sigma = \frac{\hbar}{2}\{\sigma^{23}, \sigma^{31}, \sigma^{12}\} \tag{153}$$

konstruiert werden.

3 Elektronen und Positronen

Wir werden von nun an eine Vereinfachung aller Formeln vornehmen, indem wir Maßeinheiten so einführen, daß $\hbar = c = 1$ gilt. Die Dirac-Gleichung lautet nun $(i\not{\partial} - m)\psi = 0$.

3.1 Zerlegung nach ebenen Wellen

In einem ersten Schritt zerlegen wir die allgemeine Lösung der Dirac-Gleichung nach positiven und negativen Frequenzen:

$$\psi(x) = \psi^{(+)}(x) + \psi^{(-)}(x) \tag{154}$$

Dies ist möglich, weil alle Komponenten des Dirac-Spinors der Klein-Gordon-Gleichung genügen. Sodann können wir schreiben:

$$\psi^{(+)}(x) = (2\pi)^{-3/2} \int \frac{d^3p}{2E}\, u(p) e^{-ipx} \qquad \text{(Elektronen)} \tag{155}$$

$$\psi^{(-)}(x) = (2\pi)^{-3/2} \int \frac{d^3p}{2E}\, v(p) e^{ipx} \qquad \text{(Positronen)} \tag{156}$$

Hier bezeichnen $u(p)$ und $v(p)$ Spinoren, die vom Impuls p abhängen. Wie früher gilt $p = (p^\mu) = \{E, \boldsymbol{p}\}$ und $E = \sqrt{m^2 + \boldsymbol{p}^2}$. Aus der Dirac-Gleichung folgen die beiden Bedingungen

$$(\not{p} - m)u(p) = 0, \qquad (\not{p} + m)v(p) = 0 \tag{157}$$

Setzen wir $m > 0$ voraus, so existiert ein ausgezeichnetes Bezugssystem, das Ruhsystem des Teilchens. Dies bedeutet: Es gibt eine spezielle Lorentz-Transformation L_p, die dem Teilchen den Impuls p erteilt (englisch: *boost*):

$$L_p p_R = p, \qquad p_R = \{m, 0, 0, 0\} \tag{158}$$

Der Transformation L_p entspricht eine Matrix $l_p \in$SL(2,C), so daß $L_p = \Lambda(l_p)$ und

$$l_p\, \underline{p_R}\, l_p^* = \underline{p} \qquad \text{d.h.} \qquad l_p l_p^* = \underline{p}/m \tag{159}$$

Die Lösung wird eindeutig, wenn wir $l_p = (\underline{p}/m)^{1/2}$ setzen. In der Tat, für physikalische Impulse p ist die hermitesche Matrix $\underline{p}$ positiv definit, und so ist die Wurzel l_p. Auf die Ebene der Dirac-Matrizen übertragen bedeutet dies:

$$S(l_p)\not{p}_R = \not{p} S(l_p) \tag{160}$$

Daraus folgt: Lösen $u(p_R)$ und $v(p_R)$ die Gleichungen

$$(\not{p}_R - m)u(p_R) = 0, \qquad (\not{p}_R + m)v(p_R) = 0 \tag{161}$$

so lösen

$$u(p) = S(l_p)u(p_R), \qquad v(p) = S(l_p)v(p_R)$$

die Gleichungen (157). In der Dirac-Darstellung der γ-Matrizen nehmen die Bedingungen (161) die Gestalt

$$2m \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} u(p_R) = 0, \qquad 2m \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} v(p_R) = 0$$

an. Die vier unabhängigen Lösungen entsprechen dem Resultat, das wir schon früher (Seite 19) fanden:

$$u(p_R, \tfrac{1}{2}) = \begin{bmatrix} \sqrt{2m} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad u(p_R, -\tfrac{1}{2}) = \begin{bmatrix} 0 \\ \sqrt{2m} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$v(p_R, \tfrac{1}{2}) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \sqrt{2m} \\ 0 \end{bmatrix} \qquad v(p_R, -\tfrac{1}{2}) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \sqrt{2m} \end{bmatrix}$$

Wir definieren Standard-Lösungen zu gegebenen Impuls p durch

$$u(p, \sigma) = S(l_p) u(p_R, \sigma), \qquad v(p, \sigma) = S(l_p) v(p_R, \sigma) \qquad (\sigma = \pm\tfrac{1}{2}) \tag{162}$$

wobei σ aufgrund unserer Konstruktion die Spin-Polarisation im Ruhsystem charakterisiert.

Wir treffen nun eine immer wiederkehrende Vereinbarung. Gegeben zwei beliebige Dirac-Spinoren u und v, es soll $u\bar{v}$ als eine Matrix (vom Rang 1), dagegen $\bar{v}u$ als ein Skalar (komplexe Zahl) aufgefaßt werden. Dies erspart uns das Schreiben von vielen Indices.

Die Vollständigkeitsrelationen

$$\sum_\sigma u(p_R, \sigma)\bar{u}(p_R, \sigma) = 2m \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \not{p}_R + m$$

$$\sum_\sigma v(p_R, \sigma)\bar{v}(p_R, \sigma) = 2m \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} = \not{p}_R - m$$

gehen über – nach Transformation vom Ruhsystem in das aktuelle Bezugssystem – in die Relationen

$$\sum_\sigma u(p, \sigma)\bar{u}(p, \sigma) = \not{p} + m \tag{163}$$

$$\sum_\sigma v(p, \sigma)\bar{v}(p, \sigma) = \not{p} - m \tag{164}$$

In völlig analoger Weise erhalten wir die Orthogonalitätsrelationen

$$\bar{u}(p, \sigma) u(p, \sigma') = 2m\delta_{\sigma\sigma'} \tag{165}$$

$$\bar{v}(p, \sigma) v(p, \sigma') = -2m\delta_{\sigma\sigma'} \tag{166}$$

Aus den Standard-Lösungen konstruieren wir die allgemeinste Lösung:

$$u(p) = \sum_\sigma a_\sigma(p) u(p,\sigma), \qquad v(p) = \sum_\sigma b_\sigma(p) v(p,\sigma) \tag{167}$$

Die hier auftretenden komplexen Amplituden $a_\sigma(p)$ und $b_\sigma(p)$ sind unabhängig und frei wählbar. Sie sind Wellenfunktionen für Elektronen und Positronen in der Impulsdarstellung. Die Spin-Polarisation bezieht sich auf das Ruhsystem.

Um einen Hilbertraum zu erhalten, benötigen wir ein Skalarprodukt für Lösungen der Dirac-Gleichung. Es genügt jedoch, eine Definition der Norm zu haben. Wir benutzen das von Dirac vorgeschlagene Integral

$$\|\psi\|^2 = \int d^3x \, \psi(x)^* \psi(x), \tag{168}$$

Bei dem Versuch, die Norm durch die Fourier-Amplituden auszudrücken stoßen wir auf das Problem, bestimmte Produkte der u's und v's auszuwerten. Es gilt – wie man leicht nachweist –

$$\bar{u}(p,\sigma)\gamma^\mu u(p,\sigma') = \bar{v}(p,\sigma)\gamma^\mu v(p,\sigma') = 2p^\mu \delta_{\sigma\sigma'}, \tag{169}$$

Speziell für $\mu = 0$:

$$u(p,\sigma)^* u(p,\sigma') = v(p,\sigma)^* v(p,\sigma') = 2E\,\delta_{\sigma\sigma'}, \tag{170}$$

dagegen

$$u(p,\sigma)^* v(p',\sigma') = v(p,\sigma)^* u(p',\sigma') = 0, \qquad p' = \{E, -\boldsymbol{p}\} \tag{171}$$

Diese Relationen benutzend findet man die Gleichung

$$\|\psi\|^2 = \|a\|^2 + \|b\|^2, \tag{172}$$

falls für die Fourier-Amplituden a und b geeignete Normen eingeführt werden:

$$\text{Elektronen } e^-: \qquad \|a\|^2 = \int \frac{d^3p}{2E} \sum_\sigma |a_\sigma(p)|^2$$

$$\text{Positronen } e^+: \qquad \|b\|^2 = \int \frac{d^3p}{2E} \sum_\sigma |b_\sigma(p)|^2$$

Wir erhalten somit einen Hilbertraum, der direkte Summe zweier Einteilchen-Räume ist: $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{e^-} \oplus \mathcal{H}_{e^+}$. Daß diese Definition der Normen $\|a\|$ und $\|b\|$ korrekt ist (in dem Sinne, daß Lorentz-Transformationen auf dem Hilbertraum *unitär* dargestellt werden) wurde von E. Wigner erkannt. Die Unitarität überrascht, weil die Darstellungsmatrizen $S(c)$ keineswegs unitär sind. Der nächste Abschnitt soll die Argumente von Wigner erläutern.

3.2 Wigner-Rotationen

Die Aufspaltung von ψ in $\psi^{(+)} + \psi^{(-)}$ ist unabhängig vom Bezugssystem: Elektronen- und Positronen-Anteile werden nicht gemischt. Dies gilt sogar unter Einbeziehung der Raumspiegelung. Wir erhalten in der Impulsdarstellung die folgende Vorschrift für einen Wechsel des Bezugssystems:

$$\begin{aligned} u'(p') &= S(c)u(p), \qquad && c \in \mathrm{SL(2,C)} \\ v'(p') &= S(c)v(p), \qquad && p' = \Lambda(c)p \end{aligned}$$

Dies ist eine unmittelbare Folge der Fourier-Transformation. Die Spinoren im veränderten Bezugssystem können wie gewohnt zerlegt werden:

$$u'(p') = \sum_{\sigma'} a'_{\sigma'}(p')\, u(p', \sigma')$$

$$v'(p') = \sum_{\sigma'} b'_{\sigma'}(p')\, v(p', \sigma')$$

Die Orthogonalitätsrelationen (165)(166) benutzend erhalten wir sofort die Transformationsgesetze

$$a'_{\sigma'}(p') = \sum_{\sigma} U_{\sigma'\sigma}\, a_\sigma(p), \qquad U = U(c,p) \in \mathrm{SU}(2) \tag{173}$$

$$b'_{\sigma'}(p') = \sum_{\sigma} V_{\sigma'\sigma}\, b_\sigma(p), \qquad V = V(c,p) \in \mathrm{SU}(2) \tag{174}$$

wobei wir definierten:

$$2m\, U(c,p)_{\sigma'\sigma} = \bar{u}(p', \sigma')S(c)u(p,\sigma), \qquad c \in \mathrm{SL(2,C)} \tag{175}$$

$$-2m\, V(c,p)_{\sigma'\sigma} = \bar{v}(p', \sigma')S(c)v(p,\sigma), \qquad p' = \Lambda(c)p \tag{176}$$

Weiter unten werden wir zeigen, daß $U = V$ gilt. Wir richten unser Interesse deshalb auf U. Daß es sich bei U tatsächlich um eine unitäre 2×2-Matrix handelt, folgt aus den leicht zu beweisenden Relationen

$$U(c^{-1}, p')U(c,p) = \mathbb{1}, \qquad U(c,p)^* = U(c^{-1}, p')$$

mit dem Ergebnis $U(c,p)^* = U(c,p)^{-1}$, d.h. $U \in$U(2). Schließlich kann U stetig in die Einheit deformiert werden (etwa durch $c \to \mathbb{1}$). Also liegt U in der Gruppe SU(2).

Etwas allgemeiner sind die Relationen

$$U(c', p')U(c,p) = U(c'c, p), \qquad p' = \Lambda(c)p, \qquad c, c' \in \mathrm{SL(2,C)} \tag{177}$$

$$c \in \mathrm{SU}(2) \quad \Rightarrow \quad U(c,p) = c \tag{178}$$

Man bestätigt sie durch eine direkte Rechnung.

Wir wollen nun den Hintergrund unserer Konstruktion ein wenig beleuchten. Die Unitarität der Matrizen U und V garantiert die Gültigkeit von

$$\sum_{\sigma'} |a'_{\sigma'}(p')|^2 = \sum_{\sigma} |a_\sigma(p)|^2, \qquad \sum_{\sigma'} |b'_{\sigma'}(p')|^2 = \sum_{\sigma} |b_\sigma(p)|^2$$

mit der Konsequenz, daß die Normen erhalten bleiben:

$$\|a'\| = \|a\|, \qquad \|b'\| = \|b\|.$$

Mehr noch, die Transformation $a \mapsto a'$ (bzw. $b \mapsto b'$) beschreibt eine unitäre Darstellung der SL(2,C) auf dem Hilbertraum der Elektronen-(bzw. Positronen-)Zustände. Man sagt, sie sei *induziert* durch die Darstellung $D(c) = c \in$SU(2) der *kleinen Gruppe* SU(2): Dies ist diejenige Untergruppe von Elementen $c \in$SL(2,C) mit der Eigenschaft

$$\Lambda(c)p_R = p_R.$$

Wigner erklärte die Rückführung auf die Gruppe SU(2) (bzw. die Gruppe SO(3)) darstellungstheoretisch. Verkürzt lautet sein Argument so: Jeder Lorentz-Transformation Λ und jedem Impuls p ist in natürlicher Weise eine Rotation $R(\Lambda, p)$, die *Wigner-Rotation*, zugeordnet:

$$R(\Lambda, p) = L_{p'}^{-1}\Lambda L_p, \qquad p' = \Lambda p \tag{179}$$

Denn

$$p_R \xrightarrow{L_p} p \xrightarrow{\Lambda} \Lambda p = p' \xrightarrow{L_{p'}^{-1}} p_R$$

Da das Produkt der drei Transformationen den Vektor p_R invariant läßt, muß das Ergebnis eine Rotation sein.

Auf die Gruppe SL(2,C) übertragen, heißt dies: Jedem Element $c \in$SL(2,C) und jedem Impuls p ist ein Element $U(c,p) \in$SU(2) zugeordnet:

$$U(c,p) = l_{p'}^{-1} c\, l_p, \qquad p' = \Lambda(c)p \tag{180}$$

Man bestätigt leicht, daß diese Konstruktion von U mit der vorigen, auf der Basis der Dirac-Gleichung gewonnenen übereinstimmt. Dazu hat man zweierlei zu beachten. Erstens erhalten wir direkt aus der Definition (175)

$$\begin{aligned} 2mU(c,p)_{\sigma'\sigma} &= \bar{u}(p_R, \sigma')\bar{S}(l_{p'})S(c)S(l_p)u(p_R, \sigma) \\ &= \bar{u}(p_R, \sigma')S(l_{p'}^{-1} c\, l_p)u(p_R, \sigma) \end{aligned}$$

Zweitens: In der Dirac-Darstellung der γ-Matrizen gilt

$$S(U) = \begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & U \end{pmatrix}$$

für jedes $U \in$ SU(2) und damit

$$\bar{u}(p_R, \sigma')S(U)u(p_R, \sigma) = 2mU_{\sigma'\sigma}$$

$$\bar{v}(p_R, \sigma')S(U)v(p_R, \sigma) = -2mU_{\sigma'\sigma}$$

Ganz nebenbei haben wir somit auch gezeigt, daß die Matrizen U und V – wie in (173)(174) definiert – identisch sind.

3.3 Das relativistische H-Atom

Wir kehren zurück zur Dirac-Gleichung im Ortsraum mit Ankopplung des Elektrons (oder Positrons) an ein elektromagnetisches Potential:

$$(i\partial\!\!\!/ - eA\!\!\!/ - m)\psi = 0$$

Indem wir von den Definitionen

$$\mathcal{D}_\pm = \mathbb{P}\!\!\!/ \pm m\mathbb{1}, \qquad \mathbb{P}_\mu = i\partial_\mu - eA_\mu \tag{181}$$

Gebrauch machen, können wir die Dirac-Gleichung so schreiben: $\mathcal{D}_-\psi = 0$. Hieraus folgt $\mathcal{D}_+\mathcal{D}_-\psi = 0$ mit

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_+\mathcal{D}_- &= \mathbb{P}\!\!\!/^2 - m^2\mathbb{1} \\ &= \gamma^\mu\gamma^\nu\mathbb{P}_\mu\mathbb{P}_\nu - m^2\mathbb{1} \\ &= (g^{\mu\nu}\mathbb{P}_\mu\mathbb{P}_\nu - m^2)\mathbb{1} - i\sigma^{\mu\nu}\mathbb{P}_\mu\mathbb{P}_\nu \\ &= (\mathbb{P}^2 - m^2)\mathbb{1} + \tfrac{1}{2}e\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu} \end{aligned}$$

Hier benutzten wir $[\mathbb{P}_\mu, \mathbb{P}_\nu] = ieF_{\mu\nu}$ und

$$\begin{aligned} \gamma^\mu\gamma^\nu &= \tfrac{1}{2}(\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu) + \tfrac{1}{2}(\gamma^\mu\gamma^\nu - \gamma^\nu\gamma^\mu) \\ &= g^{\mu\nu} - i\sigma^{\mu\nu} \end{aligned}$$

Wir betrachten nun Ein-Elektronen-Atome der Kernladungszahl Z. Dies bedeutet die Wahl

$$eA_0 = -\frac{Z\alpha}{r}, \qquad A_k = 0 \qquad (k = 1,2,3)$$

Für das hierdurch erzeugte elektrische Feld $\boldsymbol{E}$ gilt

$$e\boldsymbol{E} = \frac{Z\alpha}{r^2}\boldsymbol{n}, \qquad \boldsymbol{x} = r\boldsymbol{n}$$

In Komponenten: $E_k = -\partial_k A_0 = F_{k0} = -F_{0k}$, $\quad (k = 1,2,3)$, so daß

$$\mathcal{D}_+\mathcal{D}_- = (\mathbb{P}^2 - m^2)\mathbb{1} + \sigma^{k0}eE_k \tag{182}$$

(Summation über k). Wir wählen nun die vdW-Darstellung der γ-Matrizen , weil darin die Matrizen σ^{k0} blockdiagonal sind:

$$\sigma^{k0} = \begin{pmatrix} -i\sigma_k & 0 \\ 0 & i\sigma_k \end{pmatrix}$$

Wir erhalten entkoppelte Gleichungen für zweikomponentige Spinoren:

$$(\mathbb{P}^2 - m^2 \mp iZ\alpha r^{-2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})\phi_\pm = 0, \qquad \psi = \begin{pmatrix} \phi_+ \\ \phi_- \end{pmatrix} \tag{183}$$

Es gilt ferner

$$\mathbb{P}^2 = -\left(\frac{\partial}{\partial t} - i\frac{Z\alpha}{r}\right)^2 + \Delta, \qquad \Delta = \frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r - \frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2}, \qquad \boldsymbol{L} = \boldsymbol{x} \times (-i\nabla)$$

Für stationäre Zustände mit der Energie E setzen wir (vgl. Abschnitt 2.2)

$$\phi_\pm(\boldsymbol{x},t) = f_\pm(\boldsymbol{x})\, e^{-iEt}, \qquad k^2 = m^2 - E^2$$

so daß

$$\mathbb{P}^2\phi_\pm = e^{-iEt}\left\{\left(E + \frac{Z\alpha}{r}\right)^2 + \Delta\right\} f_\pm$$

und

$$\left[-\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r + \frac{\boldsymbol{L}^2 - (Z\alpha)^2 \pm iZ\alpha\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}}{r^2} - \frac{2Z\alpha}{r} + k^2\right] f_\pm(\boldsymbol{x}) = 0 \tag{184}$$

Noch können wir hier nicht von Radialwellengleichungen sprechen; denn die Differentialoperatoren hängen noch von der Richtung $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{x}/r$ ab. Wir wissen aber im voraus, daß die beiden Gleichungen das gleiche Spektrum ergeben; denn sie gehen durch den algebraischen Automorphismus $\boldsymbol{\sigma} \to -\boldsymbol{\sigma}$ ineinander über. Wir können uns aus diesem Grund auf die Gleichung für f_+ beschränken. Beachte: f_+ ist ein Spinor mit zwei Komponenten.

Invarianz gegenüber Rotationen ist dennoch gegeben, wenn der Ortsvektor und die Spinpolarisation gleichzeitig „gedreht“ werden. Dies bedeutet, daß der Gesamtdrehimpuls

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S} = \boldsymbol{L} + \tfrac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$$

eine Erhaltungsgröße darstellt. Der Bahndrehimpuls $\boldsymbol{L}$ ist keine Erhaltungsgröße. Dennoch gilt $[\boldsymbol{J}, \boldsymbol{L}^2] = 0$, so daß wir eine Basis von Spin-Kugelfunktionen $|jms\rangle$ wählen können, in der die Operatoren $\boldsymbol{J}^2$, J_3 und $\boldsymbol{L}^2$ diagonal sind, d.h. die folgenden Eigenwerte annehmen:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{J}^2 &= j(j+1), && j = \tfrac{1}{2}, \tfrac{3}{2}, \tfrac{5}{2}, \ldots \\ J_3 &= m, && m = -j, -j+1, \ldots, j \\ \boldsymbol{L}^2 &= \ell(\ell+1), && \ell + s = j, \quad s = \pm\tfrac{1}{2} \end{aligned}$$

Der Wert $s = \frac{1}{2}$ bedeutet, daß Spin und Bahndrehimpuls parallel stehen; $s = -\frac{1}{2}$, daß sie antiparallel stehen. In der so gewählten Basis hat der Operator $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ zwangsläufig die Gestalt

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}|jms\rangle = \sum_{s'} n_{ss'}|jms'\rangle \tag{185}$$

weil er ja rotationsinvariant konstruiert ist. Die beiden Zustände $|jm\frac{1}{2}\rangle$ und $|jm-\frac{1}{2}\rangle$ haben entgegengesetzte Parität, die ja durch $(-1)^\ell$ gegeben ist. Sie sind Spinoren mit je zwei Komponenten, auf die die Pauli-Matrizen wirken. Zugleich sind sie Funktionen des Einheitsvektors $\boldsymbol{x}$, d.h. sie hängen von den Winkeln θ und ϕ ab, wenn wir zu Kugelkoordinaten r, θ, ϕ übergehen.

Der Operator $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ verändert die Parität. Somit verschwinden die Diagonalelemente der Matrix $n = (n_{ss'})$. Da $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ hermitesch ist, muß auch die Matrix n hermitesch sein. Da $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})^2 = \mathbb{1}$ gilt, muß auch $n^2 = \mathbb{1}$ gelten. Die allgemeine Lösung dieses Problems lautet:

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}|jms\rangle = e^{is\lambda}|jm-s\rangle, \qquad s = \pm\tfrac{1}{2} \tag{186}$$

In Worten, $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ klappt den Spin um: Die parallele Stellung geht über in antiparallele Stellung und umgekehrt. Durch eine geeignete Wahl der relativen Phase der beiden Zustände können wir erreichen, daß $\lambda = 0$ gilt. Dies setzen wir im folgenden voraus.

Der Spinor $f_+(\boldsymbol{x})$ zu vorgegebenen Werten j und m besitzt eine Zerlegung der Form

$$f_+ = \sum_s u_{js}|jms\rangle \tag{187}$$

wobei die Koeffizienten u_{js} als gewöhnliche Funktionen von r aufzufassen sind und den Radialwellenfunktionen der nichtrelativistischen Quantenmechanik entsprechen. Sie genügen den Gleichungen

$$\left[-\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r + \frac{M}{r^2} - \frac{2Z\alpha}{r} + k^2\right]\begin{pmatrix} u_{j-1/2} \\ u_{j+1/2} \end{pmatrix} = 0 \tag{188}$$

mit der Matrix

$$M = \begin{pmatrix} (j+\frac{1}{2})(j+\frac{3}{2}) - (Z\alpha)^2 & iZ\alpha \\ iZ\alpha & (j-\frac{1}{2})(j+\frac{1}{2}) - (Z\alpha)^2 \end{pmatrix} \tag{189}$$

deren Eigenwerte wir zu $L(L\pm 1)$ berechnen mit

$$L = \sqrt{(j+\tfrac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2} \tag{190}$$

Obwohl die Matrix M nicht hermitesch ist, sind ihre Eigenwerte reell, falls $Z\alpha \le 1$ erfüllt ist. Eine Zerlegung von u_j nach Eigenvektoren führt auf zwei entkoppelte Radialgleichungen. Für $Z\alpha \ll 1$ sind die beiden Eigenlösungen nahezu mit $u_{j\pm 1/2}$ identisch. Sie entsprechen damit nahezu den Quantenzahlen $\ell = j \mp \frac{1}{2}$.

Durch unsere Analyse haben wir Gleichungen gefunden, wie sie bereits bei dem Coulomb-Problem für spinlose Teilchen auftraten (vgl. S.15), und wir können die Bedingung für gebundene Zustände von dort her übernehmen:

$$\frac{E\,Z\alpha}{\sqrt{m^2 - E^2}} = \begin{cases} L + 1 + n_+ & \text{mit } n_+ = 0, 1, 2, \ldots \\ L + n_- & \text{mit } n_- = 0, 1, 2, \ldots \end{cases} \tag{191}$$

Die beiden Bedingungen entsprechen den beiden entkoppelten Radialgleichungen: Die zweite geht aus der ersten durch die Ersetzung $L \to L - 1$ hervor. Jede der beiden Radialgleichungen beschreibt ein System von gebundenen Zuständen. Die zugehörigen Bedingungen (191) lauten gleich, wenn wir die Hauptquantenzahl n (mit den Werten $1, 2, 3, \ldots$) einführen:

$$\frac{E\,Z\alpha}{\sqrt{m^2 - E^2}} = n - (j + \tfrac{1}{2}) + L \tag{192}$$

Auflösung nach E führt zu der Feinstrukturformel:

$$E = m\left[1 + \left(\frac{Z\alpha}{n - (j+\frac{1}{2}) + \sqrt{(j+\frac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2}}\right)^2\right]^{-1/2} \tag{193}$$

Für $Z\alpha \ll 1$ ergibt sich näherungsweise

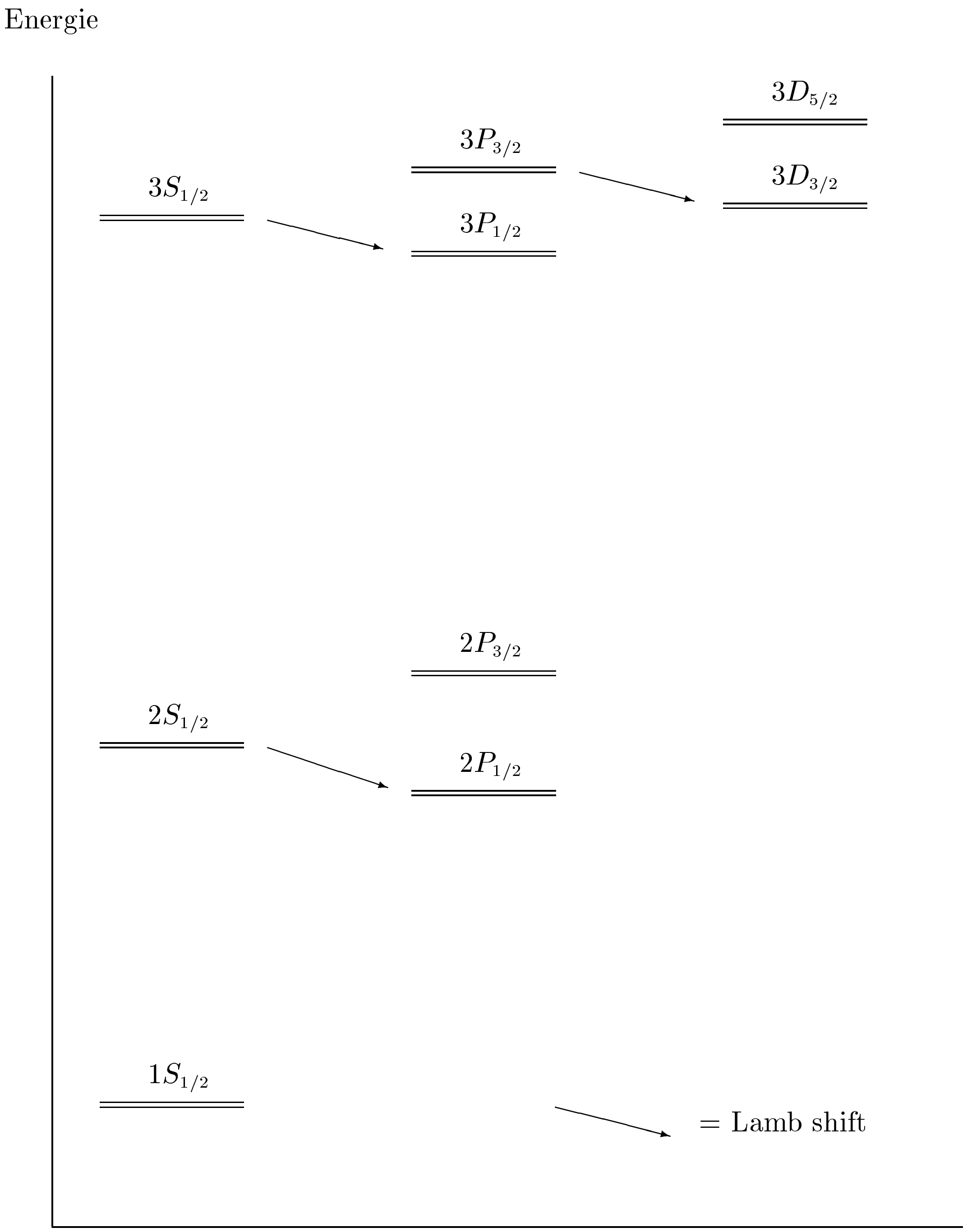
$$E - m = -\frac{(Z\alpha)^2 m}{2n^2}\left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n}\left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right)\right] + O\big((Z\alpha)^6\big)$$

Für $Z\alpha > 1$ fehlt uns eine physikalische Interpretation der Lösung.

Die Energieniveaus, nur abhängig von n und j, bestimmen die Feinstruktur der wasserstoff-ähnlichen Atome. Insbesondere wird durch die Formel eine $4j$-fache Entartung aller Niveaus (mit Ausnahme des Grundniveaus, das zweifach entartet ist) vorhergesagt: Niveaus mit $\ell = j + \frac{1}{2}$ und $\ell = j - \frac{1}{2}$ besitzen die gleiche Energie, und jedes dieser Niveaus hat die übliche $2j$-fache Entartung bezüglich der magnetischen Quantenzahl m.

Das Ergebnis stimmt in guter Näherung mit der Beobachtung überein. Die korrekte Lage der Niveaus wird allerdings durch den Lamb-shift (eine Energieverschiebung aufgrund der Quantenelektrodynamik) modifiziert. Insbesondere wird die zweifache Entartung bezüglich ℓ aufgehoben (wie erläutert ist ℓ nur *in Näherung* eine gute Quantenzahl). Hinzu kommt eine Hyperfeinstruktur, hervorgerufen durch die Wechselwirkung des Elektronenspins mit dem Kernspin (bei dem H-Atom führt dies zu einer Dublettstruktur aller Niveaus).

spektroskop. Bezeichnung	n	ℓ	j	E/m
$1S_{1/2}$	1	0	1/2	$\sqrt{1-(Z\alpha)^2}$
$2S_{1/2}$	2	0	1/2	$\sqrt{\frac{1}{2}\big(1+\sqrt{1-(Z\alpha)^2}\big)}$
$2P_{1/2}$	2	1	1/2	$\sqrt{\frac{1}{2}\big(1+\sqrt{1-(Z\alpha)^2}\big)}$
$2P_{3/2}$	2	1	3/2	$\sqrt{1-(Z\alpha/2)^2}$



Feinstruktur, Lamb shift und Hyperfeinstruktur des H-Atoms

3.4 Die Foldy-Wouthuysen-Transformation

Wir kehren zurück zu der Frage, wie die Pauli-Gleichung für zweikomponentige Spinoren ϕ aus der Dirac-Gleichung für vierkomponentige Spinoren ψ hervorgeht. Unter nicht-relativistischen Bedingungen haben wir bereits im Abschnitt 2.4 eine Antwort gegeben. Sobald wir jedoch relativistische Korrekturen in die Pauli-Gleichung einbeziehen wollen, haben wir bislang keine systematische Methode vorgestellt, die uns solche Korrekturen zu berechnen gestattet. Dies soll nun nachgeholt werden.

Es bietet sich an, von der ursprünglichen Form der Dirac-Gleichung auszugehen:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi, \qquad H = \beta m + \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{P} + A_0 \mathbb{1}, \qquad \boldsymbol{P} = \frac{1}{i}\nabla - e\boldsymbol{A} \tag{194}$$

wobei

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \qquad \psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \tag{195}$$

Wir wissen, daß bei ruhenden (Anti-)Teilchen eine Entkopplung stattfindet, derart, daß ϕ das Elektron und χ das Positron beschreibt. Wir fragen, ob für genügende schwache Felder A_0 und $\boldsymbol{A}$ ebenfalls eine Entkopplung erzielt werden kann, und zwar durch eine unitäre Transformation:

$$\psi' = e^{iS}\psi, \qquad i\frac{\partial}{\partial t}\psi' = H'\psi' \tag{196}$$

(S ein hermitescher Operator). Die Forderung besteht nun darin, daß der transformierte Hamilton-Operator *blockdiagonal* sein soll:

$$H' = \begin{pmatrix} H_+ & 0 \\ 0 & -H_- \end{pmatrix} \tag{197}$$

Dann würde H_+ die Energie eines Elektrons, H_- die Energie eines Positrons beschreiben (im äußeren Feld). Wir erwarten, daß H' eine Entwicklung nach Potenzen von m^{-1} (besser: von der Compton-Wellenlänge $h/(mc)$) besitzt,

$$H' = \beta m + eA_0\mathbb{1} + Q_1 m^{-1} + Q_2 m^{-2} + \dots \tag{198}$$

wobei es gilt, die unbekannten (Differential-)Operatoren Q_n zu bestimmen.

Es kann nicht erwartet werden, daß H' selbst ein Differentialoperator ist, wenn wir alle Terme in (198) aufsummiert haben, so wenig wie e^{iS} eine lokale Transformation ist. Auch über Existenz und Eindeutigkeit wird nichts ausgesagt. Man erhält einen Eindruck von der Art der Foldy-Wouthuysen-Transformation, wenn man das einfache Beispiel $A_0 = \boldsymbol{A} = 0$ betrachtet.

3.4.1 Die FW-Transformation für freie Teilchen

Für freie Teilchen ist es zweckmäßig, die Impulsdarstellung zu wählen. Darin hat die Energie die Form $H = m\beta + \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}$. Wir zerlegen den Impuls nach Betrag und Richtung, $\boldsymbol{p} = p\boldsymbol{n}$, machen den Ansatz

$$iS = \theta\beta\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{n} \qquad (\theta \in \mathbb{R}) \tag{199}$$

und beachten, daß die Matrizen $\beta\boldsymbol{\alpha}_k = \gamma^k$ antihermitesch sind. Wir finden:

$$S^2 = -\theta^2\gamma^j\gamma^k n_j h_k = \theta^2\delta^{jk}n_j n_k \mathbb{1} = \theta^2\mathbb{1}$$

d.h.

$$S^n = \begin{cases} \theta^{2k}\mathbb{1} & \text{falls } n = 2k \\ \theta^{2k}S & \text{falls } n = 2k+1 \end{cases}$$

Hieraus folgt

$$\begin{aligned} e^{iS} = \sum_{n=0} \frac{i^n}{n!}S^n &= \cos\theta\,\mathbb{1} + i\frac{\sin\theta}{\theta}S \\ &= \cos\theta\,\mathbb{1} + \sin\theta\,\beta\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{n} \end{aligned}$$

Der transformierte Hamilton-Operator hat die Gestalt

$$\begin{aligned} H' &= e^{iS}He^{-iS} \\ &= (\cos\theta\,\mathbb{1} + \sin\theta\,\beta\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{n})(m\beta + p\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{n})(\cos\theta\,\mathbb{1} - \sin\theta\,\beta\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{n}) \\ &= \beta(\cos\theta\,\mathbb{1} - \sin\theta\,\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{n})(m\mathbb{1} + p\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{n})(\cos\theta\,\mathbb{1} - \sin\theta\,\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{n}) \\ &= \beta(A\mathbb{1} + B\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{n}) \\ &= A\beta + B\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{n} \end{aligned}$$

(beachte $(\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{n})^2 = -\mathbb{1}$) mit

$$\begin{aligned} A &= 2p\sin\theta\cos\theta + m(\cos^2\theta - \sin^2\theta) \\ &= p\sin 2\theta + m\cos 2\theta \\ B &= p(\cos^2\theta - \sin^2\theta) - 2m\sin\theta\cos\theta \\ &= p\cos 2\theta - m\sin 2\theta \end{aligned}$$

Damit H' blockdiagonal wird, muß $B = 0$ gelten. Dies bestimmt den Winkel θ:

$$\tan 2\theta = \frac{p}{m} \qquad \text{d.h.} \qquad \sin 2\theta = \frac{p}{E}, \quad \cos 2\theta = \frac{m}{E}, \qquad A = E \tag{200}$$

mit $E = \sqrt{m^2 + p^2}$ und dem Ergebnis

$$H' = A\beta = E\beta = \begin{pmatrix} E\mathbb{1} & 0 \\ 0 & -E\mathbb{1} \end{pmatrix} \tag{201}$$

Wie zu erwarten war, gilt $H_\pm = E\mathbb{1}$, d.h. sowohl Elektronen wie Positronen haben die Energie E.

Kehren wir zur Ortsdarstellung zurück, so ist E durch den Pseudo-Differentialoperator

$$\sqrt{m^2 - \Delta} = m - \frac{1}{2m}\Delta - \frac{1}{8m^3}\Delta^2 + \ldots$$

representiert, der eine $1/m$-Entwicklung besitzt. Brechen wir diese ab, so entsteht ein lokaler Operator als Näherung von H'. Ähnlich haben wir uns das Verhalten von H' vorzustellen, wenn das Elektron (Positron) sich in einem schwachen äußeren Feld bewegt.

3.4.2 Die FW-Transformation im allgemeinen Fall

Wir setzen voraus, daß die Potentiale A_0 und $\boldsymbol{A}$ zeitunabhängig sind. Das erlaubt uns, einen t-unabhängigen Operator S zu wählen, so daß

$$H' = e^{iS} H e^{-iS} = H + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} [iS, [iS, \cdots [iS, H \underbrace{] \cdots]]}_{n}$$

Wir zerlegen die Hamilton-Operatoren geeignet:

$$H = m\beta + G + U, \qquad H' = m\beta + G' + U'$$

indem die Terme G und G' als „gerade" angesprochen werden, weil sie blockdiagonal sind. Hingegen haben die „ungeraden" Terme U und U' nur Eintragungen in den Nebenblöcken (sie transformieren ϕ in χ und umgekehrt). Naturgemäß beginnen wir mit

$$G = eA_0 \mathbb{1}, \qquad U = \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{P}$$

Ziel der FW-Transformation ist es, $U' = 0$ zu erreichen bis auf Terme hoher Ordnung in $1/m$. Die Transformation vollziehen wir in drei Schritten.

1. Schritt. Wir bestimmen den Operator S in einer Weise, daß er von der Ordnung m^{-1} ist und sein Kommutator mit $m\beta$ den ungeraden Anteil von H zum verschwinden bringt:

$$H' = H + [iS, H] + \ldots = m\beta + G + U + [iS, m\beta] + \ldots$$

d.h. $U + [iS, m\beta] = 0$ oder

$$iS = \frac{1}{2m} \beta U = \frac{1}{2m} \beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{P}$$

Sodann berechnen wir die nötigen Korrekturen:

$$\begin{aligned} U + [iS, H] &= \frac{1}{2m} \beta [U, G] + \frac{1}{m} \beta U^2 \\ \tfrac{1}{2} [iS, [iS, H]] &= -\frac{1}{2m} \beta U^2 - \frac{1}{8m^2} [U, [U, G]] - \frac{1}{2m^2} U^3 \\ \frac{1}{6} [iS, [iS, [iS, H]]] &= \frac{1}{6m^2} U^3 + \ldots \end{aligned}$$

und erhalten (durch Abbruch der Reihenentwicklung)

$$\begin{aligned} G' &= G + \frac{1}{2m} \beta U^2 - \frac{1}{8m^2} [U, [U, G]] + \ldots \\ U' &= \frac{1}{2m} \beta [U, G] - \frac{1}{3m^2} U^3 + \ldots \end{aligned}$$

Das Ergebnis des ersten Schrittes ist, daß U' nunmehr die Ordnung m^{-1} besitzt.

2. Schritt. Wir führen eine zweite unitäre Transformation durch, diesmal mit dem erzeugenden Operator (der Ordnung m^{-2})

$$iS' = \frac{1}{2m}\beta U'$$

und erhalten den neuen Energie-Operator als

$$H'' = m\beta + G'' + U'' = e^{iS'}H'e^{-iS'} = m\beta + G' + U' + [iS', H'] + \dots$$

wobei wir auch hier auf höhere Terme verzichten. Ergebnis:

$$G'' = G' + \dots, \qquad U'' = \frac{1}{2m}\beta[U', G'] + \dots$$

Das Ergebnis des zweiten Schrittes ist, daß U'' nunmehr die Ordnung m^{-2} besitzt.

3. Schritt. Schließlich führen wir eine dritte unitäre Transformation durch mit dem erzeugenden Operator (der Ordnung m^{-3})

$$iS'' = \frac{1}{2m}\beta U''$$

mit dem Ergebnis

$$H''' = m\beta + G''' + U''' = e^{iS''}H''e^{-iS''} = m\beta + G' + \dots$$

indem $U'' + [iS'', m\beta] = 0$ genutzt wurde. Das heißt: In der von uns gewählten Näherung gilt $G''' = G'' = G'$ und $U''' = 0$. Wir haben somit nur noch die Terme in G' zu analysieren:

$$\begin{aligned}
U^2 &= (\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{P})^2 = \mathbb{1}(\tfrac{1}{i}\nabla - e\boldsymbol{A})^2 - 2e\Sigma\cdot\boldsymbol{B}\\
[U, G] &= -ie\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla A_0 = ie\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{E}\\
[U,[U,G]] &= ie[\alpha\cdot\boldsymbol{P}, \alpha\cdot\boldsymbol{E}]\\
&\approx e[\alpha\cdot\nabla, \alpha\cdot\boldsymbol{E}]\\
&= e\sum_{jk}\alpha_j\alpha_k(\partial_j E_k) + 4e\Sigma\cdot(\boldsymbol{E}\times\tfrac{1}{i}\nabla)\\
&= e\mathbb{1}\,\mathrm{div}\,\boldsymbol{E} + 4e\Sigma\cdot(\boldsymbol{E}\times\tfrac{1}{i}\nabla)
\end{aligned}$$

Terme, die bilinear in den Komponenten des Potential A_μ sind, wurden hierbei vernachlässigt. Ebenso wurde benutzt, daß $\nabla\times\boldsymbol{E} = 0$ gilt.

Der transformierte Hamilton-Operator ist in der gewünschten Näherung blockdiagonal und hat die Form

$$\begin{aligned}
H''' &= \beta\Big(m + \frac{1}{2m}(\tfrac{1}{i}\nabla - e\boldsymbol{A})^2 - \frac{e}{m}\Sigma\cdot\boldsymbol{B}\Big) + eA_0\\
&\quad -\frac{e}{8m^2}\Big(\mathrm{div}\,\boldsymbol{E} + 4\Sigma\cdot(\boldsymbol{E}\times\tfrac{1}{i}\nabla)\Big)
\end{aligned} \tag{202}$$

Die letzten beiden Terme beschreiben relativistische Korrekturen zur Pauli-Theorie.

Schreiben wir H''' in der Form (197), so erhalten wir die beiden Hamilton-Operatoren, H_+ für das Elektron, H_- für das Positron:

$$
\begin{aligned}
H_\pm &= \Big(m + \frac{1}{2m}(\tfrac{1}{i}\nabla - e\boldsymbol{A})^2 \pm eA_0\Big)\mathbb{1} - \frac{e}{m}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B} \\
&\quad \mp \frac{e}{8m^2}\Big(\operatorname{div}\boldsymbol{E} + 4\boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{E}\times\tfrac{1}{i}\nabla)\Big) \qquad (203)
\end{aligned}
$$

mit dem Spin-Operator $\boldsymbol{S} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$. Der Operator H_- geht aus dem Operator H_+ durch eine dreifache Operation hervor:

$$
\begin{array}{lcll}
i & \to & -i & \text{komplexe Konjugation} \\
e & \to & -e & \text{Ladungsumkehr} \\
\boldsymbol{S} & \to & -\boldsymbol{S} & \text{Spinumkehr}
\end{array}
$$

Wir stellen somit fest, daß Teilchen und Antiteilchen die entgegengesetzte Ladung tragen. Eine letztlich befriedigende Begründung der drei genannten Operationen jenseits der Störungstheorie erhalten wir durch Rückkehr zur Dirac-Theorie. Dort werden die drei Operationen zu *einer* Operation zusammengefaßt, die man *Ladungskonjugation* nennt (siehe hierzu den nächsten Abschnitt).

Gehen wir von einem Zentralpotential $V(r) = eA_0(r)$ aus, so erhalten wir

$$
e\boldsymbol{E} = -\frac{dV}{dr}\frac{\boldsymbol{x}}{r}\,, \qquad \boldsymbol{S}\cdot(e\boldsymbol{E}\times\tfrac{1}{i}\nabla) = -\frac{e}{r}\frac{dV}{dr}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}, \qquad \boldsymbol{L} = \boldsymbol{x}\times\tfrac{1}{i}\nabla
$$

und somit

$$
\begin{aligned}
H_+ &= \Big(m + \frac{1}{2m}(\tfrac{1}{i}\nabla - e\boldsymbol{A})^2 + eA_0\Big)\mathbb{1} - \frac{e}{m}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B} \\
&\quad + \underbrace{\frac{e}{2m^2 r}\frac{dV}{dr}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}}_{\text{Spin-Bahn-Kopplung}} - \underbrace{\frac{e}{8m^2}\mathbb{1}\operatorname{div}\boldsymbol{E}}_{\text{Darwin-Term}} \qquad (204)
\end{aligned}
$$

In dem Coulomb-Potential eines wasserstoffähnlichen Atoms gilt

$$
\frac{e}{r}\frac{dV}{dr} = \frac{Z\alpha}{r^3}, \qquad e\operatorname{div}\boldsymbol{E} = -4\pi Z\alpha\,\delta^3(\boldsymbol{x})
$$

Der Darwin-Term wirkt also wie ein δ-förmiger Beitrag zum $1/r$-Potential. In einer näherungsweisen Berechnung der Feinstruktur von Atomen geht man von der approximativen Gestalt (204) der Energie aus. Nur für kleine Werte von $Z\alpha$ ist ein solches Vorgehen gerechtfertigt.

3.5 Die Ladungskonjugation

Es soll nun gezeigt werden, wie eine Transformation $\psi \mapsto \psi^c$ des Dirac-Spinors ausgeführt werden kann, so daß ψ^c einer Dirac-Gleichung mit entgegengesetzter Ladung genügt:

$$
(i\partial\!\!\!/ - eA\!\!\!/ - m)\psi = 0 \qquad (205)
$$

$$
(i\partial\!\!\!/ + eA\!\!\!/ - m)\psi^c = 0 \qquad (206)
$$

Zunächst folgt aus (205) die Gleichung

$$(-i\partial\!\!\!/^T - eA\!\!\!/^T - m)\bar{\psi}^T = 0$$

(ein hochgestelltes T bezeichnet die transponierte Spinoren bzw. Matrizen). Falls wir eine Matrix C finden mit

$$C\gamma^{\mu T} = -\gamma^\mu C \ , \tag{207}$$

so leistet die Transformation

$$\psi^c(x) = C\overline{\psi(x)}^T \tag{208}$$

das Gewünschte. Wir nennen dann ψ^c den *ladungskonjugierten Spinor*. Zur Konstruktion von C beachten wir, daß sowohl in der Dirac- als auch in der van-der-Waerden-Darstellung der γ-Matrizen die Relationen

$$\gamma^{\mu T} = \begin{cases} \gamma^\mu & \text{falls } \mu = 0, 2 \\ -\gamma^\mu & \text{falls } \mu = 1, 3 \end{cases} \tag{209}$$

gelten, die Matrix C also die Relationen

$$C\gamma^\mu = \begin{cases} -\gamma^\mu C & \text{falls } \mu = 0, 2 \\ \gamma^\mu C & \text{falls } \mu = 1, 3 \end{cases}$$

zu erfüllen hat. Eine mögliche Wahl ist $C = i\gamma^2\gamma^0$, so daß man in der Dirac-Darstellung die folgende Matrix erhält:

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{210}$$

In jedem Fall gelten die Beziehungen

$$C^{-1} = C^* = C^T = -C, \qquad \bar{C} = C \tag{211}$$

und

$$C\gamma_5 = \gamma_5 C, \qquad C\gamma^\mu\gamma^\nu = \gamma^\mu\gamma^\nu C. \tag{212}$$

Da C unitär ist, ändert die Ladungskonjugation die Normierung nicht:

$$\psi^{c*}\psi^c = (\bar{\psi}^T)^*\bar{\psi}^T = \bar{\psi}\bar{\psi}^* = \psi^*\gamma^0\gamma^{0*}\psi = \psi^*\psi$$

Da die Ladungskonjugation $\psi \to \psi^c$ antilinear und normerhaltend ist, sagen wir, sie sein *antiunitär*. Sie läßt sich ausdehnen zu einer Operation, die auf komplexe Zahlen, Spinoren und Matrizen wirkt:

- Ist $\lambda \in \mathbb{C}$, so bezeichnet λ^c die konjugiert komplexe Zahl.
- Ist $u \in \mathbb{C}^4$, so ist $u^c = C\bar{u}^T$.
- Ist $A \in \mathbb{C}^{4\times 4}$, so setzen wir $A^c = C\bar{A}^T C^{-1}$

Man überzeugt sich leicht, daß die Operation *Ladungskonjugation* zweifach angewandt die identische Abbildung ergibt.

Insbesondere finden wir $(\gamma^\mu)^c = -\gamma^\mu$ und

$$(\sigma^{\mu\nu})^c = -\sigma^{\mu\nu}$$

Dies rechtfertigt unsere frühere Behauptung, daß die Ladungskonjugation auch den Spin umkehrt.

Wir betrachten die ebene Welle eines Elektrons mit dem Impuls p:

$$\psi(x) = u(p)\, e^{-ipx}, \qquad u(p) = \sum_\sigma u(p,\sigma) a_\sigma(p)$$

Dann hat die ladungskonjugierte Welle die Form $\psi^c(x) = v(p)\, e^{ipx}$ mit

$$v(p) = u(p)^c = C\overline{u(p)}^T$$

und beschreibt somit ein Positron. Da die Normierung, wie gezeigt, unter der Ladungskonjugation erhalten bleibt und der Spin sein Vorzeichen ändert, müssen die Basis-Spinoren $v(p,-\sigma)$ und $u(p,\sigma)^c$ bis auf eine Phase übereinstimmen. Im Lichte der gefundenen Symmetrie zwischen Teilchen und Antiteilchen, ist es sinnvoll, eine Umdefinition der Basis-Spinoren $v(p,\sigma)$ vorzunehmen:

$$v(p,\sigma) = u(p,\sigma)^c = C\overline{u(p,\sigma)}^T, \quad \sigma = \pm\tfrac{1}{2} \tag{213}$$

Denn diese Definition berücksichtigt die Spinumkehrung. Folgerichtig schreiben wir den Anteil negativer Frequenz einer Lösung der freien Dirac-Gleichung

$$\psi^{(-)}(x) = (2\pi)^{-3/2} \int \frac{d^3p}{2E}\, v(p) e^{ipx}, \qquad v(p) = \sum_\sigma b^*_\sigma(p) v(p,\sigma) \tag{214}$$

und nennen $b_\sigma(p)$ die Wellenfunktion eines Positrons (vgl. die Änderung gegenüber (167)). Denn diese Definition berücksichtigt die komplexe Konjugation als wesentliches Merkmal der Ladungskonjugation.

Die allgemeine Lösung der freien Dirac-Gleichung hat nun die Form

$$\psi(x) = (2\pi)^{-3/2} \int \frac{d^3p}{2E} \sum_\sigma \Big(a_\sigma(p) u(p,\sigma) e^{-ipx} + b^*_\sigma(p) v(p,\sigma) e^{ipx} \Big) \tag{215}$$

und eine Ladungskonjugation vertauscht lediglich die Rollen von $a_\sigma(p)$ und $b_\sigma(p)$:

$$\psi^c(x) = (2\pi)^{-3/2} \int \frac{d^3p}{2E} \sum_\sigma \Big(b_\sigma(p) u(p,\sigma) e^{-ipx} + a^*_\sigma(p) v(p,\sigma) e^{ipx} \Big) \tag{216}$$

Wir betrachten nun die *chirale Zerlegung* des Dirac-Spinors,

$$\psi = \psi_R + \psi_L, \qquad \psi_R = \tfrac{1}{2}(\mathbb{1} + \gamma_5)\psi, \quad \psi_L = \tfrac{1}{2}(\mathbb{1} - \gamma_5)\psi \tag{217}$$

(R steht für rechtshändig, L für linkshändig). Wegen $\partial\!\!\!/\gamma_5 = -\gamma_5\partial\!\!\!/$ gilt

$$\begin{aligned}(i\partial\!\!\!/ - eA\!\!\!/)\psi_R &= m\psi_L\\ (i\partial\!\!\!/ - eA\!\!\!/)\psi_L &= m\psi_R\end{aligned}$$

Solange $m > 0$ gilt, koppelt die Dirac-Gleichung links- und rechtshändige Anteile miteinander. Auch der Dirac-Strom verknüpft rechts mit links:

$$\bar{\psi}\gamma^\mu\psi = \bar{\psi}_L\gamma^\mu\psi_R + \bar{\psi}_R\gamma^\mu\psi_L \tag{218}$$

Aus $\gamma_5^c = -\gamma_5$ folgt

$$(\psi^c)_R = (\psi_L)^c, \qquad (\psi^c)_L = (\psi_R)^c \tag{219}$$

Unter Ladungskongugation werden somit linkshändige Spinoren zu rechtshändigen Spinoren und umgekehrt. Auch das Verhalten der Zerlegung $\psi = \psi^{(+)} + \psi^{(-)}$ für Lösungen der freien Dirac-Gleichung sagt uns, daß unter einer Ladungskonjugation Teilchen und Antiteilchen miteinander vertauscht werden:

$$(\psi^{(\pm)})^c = (\psi^c)^{(\mp)} \tag{220}$$

Eine Theorie, die rechts- und linkshändige Spinoren nicht gleichbehandelt (schwache Wechselwirkung) ist also weder invariant unter Raumspiegelung (P) noch unter Ladungskonjugation (C), möglicherweise aber invariant unter dem Produkt (PC).

3.6 Neutrinos

Die Chiralität, d.h. der Unterschied zwischen rechts- und linkshändigen Spinoren, wird besonders deutlich im Fall der Neutrinos, also von Spin-1/2-Teilchen mit Masse Null. Die Dirac-Gleichung freier Neutinos reduziert sich auf $\partial\!\!\!/\psi = 0$. Wegen $\partial\!\!\!/\gamma_5 = -\gamma_5\partial\!\!\!/$, folgt hieraus

$$\partial\!\!\!/\psi_R = \partial\!\!\!/\psi_L = 0 \tag{221}$$

Mit anderen Worten, bei dem Übergang $m \to 0$ (äquivalent bei hochenergetischen Elektronen) tritt eine Entkopplung der Spinoren verschiedener Chiralität ein.

Aus $\gamma_5 S(a) = S(a)\gamma_5$ für jedes $a \in$SL(2,C) folgt das Transformationsgesetz

$$\begin{aligned}\psi'_R(x') &= S(a)\psi_R(x), \qquad x' = \Lambda(a)x\\ \psi'_L(x') &= S(a)\psi_L(x)\end{aligned}$$

d.h. auch ein Wechsel des Bezugssystems mischt die Spinoren verschiedener Chiralität nicht. Erst wenn wir eine Raumspiegelung vornehmen, sehen wir, daß sie ihre Rolle vertauschen:

$$\begin{aligned}\psi'_R(x') &= \gamma^0\psi_L(x), \qquad x' = \{x^0, -\boldsymbol{x}\}\\ \psi'_L(x') &= \gamma^0\psi_R(x)\end{aligned}$$

Ähnliches gilt für die Ladungskonjugation (hier besser Teilchen-Antiteilchen-Konjugation genannt), wie wir im vorigen Abschnitt sahen.

Benutzen wir die vdW-Darstellung der γ-Matrizen , so gilt ganz einfach

$$\psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}, \qquad \psi_R = \begin{pmatrix} \phi \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \psi_L = \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix}$$

und es folgen die Weyl-Gleichungen

$$\frac{\partial}{\partial t}\phi = -\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla\phi, \qquad \frac{\partial}{\partial t}\chi = \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla\chi \tag{222}$$

Man sieht es diesen Gleichungen nicht an, daß sie relativistisch kovariant sind. Aufgrund unserer Analyse ist dies aber sichergestellt.

Wir betrachten nun eine ebene Welle mit rechtshändiger Polarisation:

$$\phi(x) = \phi_0 \, e^{-ipx}, \qquad p = \{|\boldsymbol{p}|, \boldsymbol{p}\}, \quad \phi_0 \in \mathbb{C}^2$$

Die Weil-Gleichung sagt uns, daß $p_0\phi_0 = \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p}\phi_0$ gilt. Schreiben wir $\boldsymbol{p} = |\boldsymbol{p}|\boldsymbol{n}$, so folgt die Gleichung

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} = 1$$

auf allen rechtshändigen Zuständen: Spin und Impuls sind parallel.

Wir betrachten nun eine ebene Welle mit linkshändiger Polarisation:

$$\chi(x) = \chi_0 \, e^{-ipx}, \qquad p = \{|\boldsymbol{p}|, \boldsymbol{p}\}, \quad \chi_0 \in \mathbb{C}^2$$

Die Weil-Gleichung sagt uns, daß $p_0\chi_0 = -\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p}\chi_0$ gilt. Es folgt

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} = -1$$

auf allen linkshändigen Zuständen: Spin und Impuls sind antiparallel.

Man nennt allgemein die Projektion des Spins auf die Impulsrichtung die *Helizität* einer ebenen Welle. Die theoretisch möglichen Werte für das Neutrino sind $\pm\frac{1}{2}$. Die Helizität eines masselosen Teilchens (Neutrino, Photon, Graviton etc.) ist Lorentz-invariant; die Helizität eines massiven Teilchens (Elektron, Proton, Neutron etc.) ist abhängig vom Bezugssystem.

Die Natur hat sich entschieden. Diejenigen Teilchen, die wir *Neutrinos* nennen, sind linkshändig (haben Helizität $-\frac{1}{2}$). Deren Antiteilchen, die Antineutrinos, sind folglich rechtshändig (haben Helizität $\frac{1}{2}$), weil die Ladungskonjugation die Helizität umkehrt. Was wir Neutrino nennen, was Antineutrino, unterliegt einer Konvention.

Beide Teilchen, Neutrino und Antineutrino einer Sorte, werden durch *einen* Dirac-Spinor ψ mit $(\mathbb{1} + \gamma_5)\psi = 0$ beschrieben. Genauer: Nach der Zerlegung $\psi = \psi^{(+)} + \psi^{(-)}$ beschreibt $\psi^{(+)}$ das Neutrino und $(\psi^{(-)})^c = (\psi^c)^{(+)}$ das zugehörige Antineutrino. Wir kennen heute drei Sorten von Neutrinos: ν_e, ν_μ, ν_τ.

4 Greensche Funktionen

Partielle Differentialgleichungen beherrschen die theoretische Physik. Lösungen zu gegebenen Randbedingungen beschreibt man am besten durch die zugehörige Greensche Funktion. Bevor diese Methode auf die Dirac-Gleichung angewandt wird, soll das Prinzip an anderen Beispielen erläutert werden.

4.1 Die Poisson-Gleichung

In der Elektrostatik sucht man die Lösung der Poisson-Gleichung

$$\Delta\Phi = -\rho \tag{223}$$

(geeignete Einheiten vorausgesetzt) für ein Potential $\Phi(\boldsymbol{x})$ zu gegebener Ladungsdichte $\rho(\boldsymbol{x})$ und Randbedingungen (z.B. $\Phi = 0$ an einer Metalloberfläche). Für den einfachsten Fall des unendlich ausgedehnten Raumes und Verschwinden des Potentials im Unendlichen lautet die Lösung bekanntlich

$$\Phi(\boldsymbol{x}) = \int d^3x' \, \frac{\rho(\boldsymbol{x}')}{4\pi|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|} \tag{224}$$

Hier ist

$$G(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{x}') = (4\pi|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|)^{-1} \tag{225}$$

die Greensche Funktion, die den genannten Randbedingungen zugeordnet wird. Sie erfüllt die Differentialgleichung

$$-\Delta G(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{x}') = \delta^3(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') \tag{226}$$

4.2 Die inhomogene Wellengleichung

Die Maxwellschen Gleichungen führen bekanntlich auf die inhomogene Wellengleichung

$$\Box A^\mu = j^\mu \tag{227}$$

für ein Viererpotential $A^\mu(x)$ zu gegebener Stromverteilung $j^\mu(x)$. Zwei Lösungen der inhomogenen Gleichung unterscheiden sich stets um eine Lösung der homogenen Wellengleichung $\Box A^\mu = 0$, also um eine freie elektromagnetische Welle. Spezielle Potentiale sind durch

$$\begin{aligned} A^\mu_{\mathrm{av}}(x) &= \int d^3x' \, \frac{j^\mu(x')}{4\pi|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|} \,, \qquad t' = t + |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'| \\ A^\mu_{\mathrm{ret}}(x) &= \int d^3x' \, \frac{j^\mu(x')}{4\pi|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|} \,, \qquad t' = t - |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'| \end{aligned}$$

gegeben. Man nennt sie die avancierte bzw. retardierte Lösung. Aus Gründen der Kausalität bevorzugt man das retardierte Potential bei Problemen der Abstrahlung von einer bewegten Ladung.

Es gibt jedoch keinen Grund, die avancierte Lösung zu verwerfen. Denn, mathematisch gesehen, stellt jede Lösung (also auch die avancierte) sich dar als eine Superposition der retardierten Lösung mit einer freien *einlaufenden* Welle:

$$A^\mu(x) = A^\mu_{\text{ein}}(x) + A^\mu_{\text{ret}}(x) \tag{228}$$

Die Interpretation der beiden Terme ist wie folgt: Während $A^\mu_{\text{ein}}(x)$ eine Welle beschreibt, die in der fernen Vergangenheit bereits da war, hat das retardierte Potential seine Ursache in der Stromverteilung. Andererseits können wir die gleiche Lösung – durch Vertauschung von Zukunft und Vergangenheit – als eine Superposition der avancierten Lösung mit einer freien *auslaufenden* Welle darstellen:

$$A^\mu(x) = A^\mu_{\text{aus}}(x) + A^\mu_{\text{av}}(x) \tag{229}$$

Aus der Gleichheit der rechten Seiten von (228) und (229) folgt die Beziehung

$$A^\mu_{\text{aus}}(x) - A^\mu_{\text{ein}}(x) = A^\mu_{\text{ret}}(x) - A^\mu_{\text{av}}(x), \tag{230}$$

wobei die rechte Seite eine freie Welle beschreibt, die durch Abstrahlung von der Quelle entsteht.

Die Bedingung $t' = t - |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|$ bei der Definition des retardierten Potentials kann durch ein zusätzliches Zeitintegral

$$\int_\infty^\infty dt'\,\delta(t - t' - |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|)\{\cdots\}$$

erzwungen werden. Es ist auf diese Weise möglich, die retardierte Lösung durch ein vierdimensionales Integral auszudrücken:

$$A^\mu_{\text{ret}}(x) = \int d^4x'\,D_{\text{ret}}(x - x')j^\mu(x'), \tag{231}$$

mit der retardierten Greenschen Funktion

$$D_{\text{ret}}(x) = \frac{\delta(t-r)}{4\pi r} = \frac{1}{2\pi}\Theta(t)\delta(t^2 - r^2), \qquad x = \{t, \boldsymbol{x}\},\ r = |\boldsymbol{x}| \tag{232}$$

Bei der Umformung haben wir von der Identität

$$\delta(t^2 - r^2) = \frac{1}{2r}\Big(\delta(t-r) + \delta(t+r)\Big)$$

Gebrauch gemacht. Die retardierte Greensche Funktion erfüllt die Gleichung

$$\Box D_{\text{ret}}(x) = \delta^4(x) \tag{233}$$

In ähnlicher Weise schreiben wir

$$A^\mu_{\text{av}}(x) = \int d^4x'\,D_{\text{av}}(x - x')j^\mu(x'), \tag{234}$$

mit der avancierten Greenschen Funktion

$$D_{\mathrm{av}}(x)=\frac{\delta(t+r)}{4\pi r}=\frac{1}{2\pi}\Theta(-t)\delta(t^2-r^2), \tag{235}$$

Es gilt $D_{\mathrm{av}}(x)=D_{\mathrm{ret}}(-x)$, $\Box D_{\mathrm{av}}(x)=\delta^4(x)$ und

$$D_{\mathrm{ret}}(x)-D_{\mathrm{av}}(x)\equiv D(x)=\frac{1}{2\pi}\epsilon(t)\delta(t^2-r^2),\qquad \epsilon(t)=\Theta(t)-\Theta(-t) \tag{236}$$

Die hierdurch eingeführte D-Funktion ist eine Lösung der homogenen Wellengleichung, und (230) kann nun so geschrieben werden:

$$A^\mu_{\mathrm{aus}}(x)=A^\mu_{\mathrm{ein}}(x)+\int d^4x'\,D(x-x')j^\mu(x') \tag{237}$$

Das rechts auftretende Integral bestimmt die von einer bewegten Ladung abgestrahlte elektromagnetische Welle. Die Funktion D sowie die Greenschen Funktionen D_{av} und D_{ret} sind Distributionen, die ihren Träger auf dem Lichtkegel $t^2-r^2=0$ haben.

4.3 Die Schrödinger-Gleichung

In der Quantenmechanik suchen wir Lösungen der Schrödinger-Gleichung

$$i\frac{d}{dt}\psi=H\psi,\qquad H=H_0+V \tag{238}$$

($\hbar=1$). Wir schreiben diese Lösung als $\psi_t=e^{-itH}\psi_0$ und suchen eine Umformung zu einer Integralgleichung. Hierzu definieren wir den Operator

$$A(t)=e^{-itH}-e^{-itH_0}$$

und finden für dessen Ableitung:

$$\begin{aligned} i\frac{d}{dt}A(t) &= He^{-itH}-H_0e^{-itH_0}\\ &= He^{-itH}-H_0\Big(e^{-itH}-A(t)\Big)\\ &= Ve^{-itH}+H_0A(t)\end{aligned}$$

Diese Differentialgleichung für $A(t)$ können wir auch so schreiben:

$$e^{-itH_0}i\frac{d}{dt}\Big(e^{itH_0}A(t)\Big)=Ve^{-itH}$$

Mit der Anfangsbedingung $A(0)=0$ läßt sie sich formal lösen:

$$iA(t)=\int_0^t dt_1\,e^{-i(t-t_1)H_0}\,V\,e^{-it_1H}$$

Indem wir den Anfangszeitpunkt t_0 beliebig wählen, erhalten wir

$$iA(t-t_0)=\int_{t_0}^t dt_1\,e^{-i(t-t_1)H_0}\,V\,e^{-i(t_1-t_0)H} \tag{239}$$

Wir setzen $t > t_0$ voraus. Die Begrenzung der Integrationsvariable t_1 auf das Intervall $[t_0, t]$ läßt sich durch Einführung von Θ-Funktionen beschreiben:

$$\int_{t_0}^{t} dt_1 \{\cdots\} = \int_{-\infty}^{\infty} dt_1\, \Theta(t - t_1)\Theta(t_1 - t_0)\{\cdots\}$$

Dies wiederum legt nahe, die folgenden Operatoren einzuführen:

$$\Gamma(t) = -i\Theta(t)e^{-itH} \tag{240}$$
$$\Gamma_0(t) = -i\Theta(t)e^{-itH_0} \tag{241}$$

Offenbar führt (239) zu einer Integralgleichung für $\Gamma(t)$:

$$\Gamma(t - t_0) = \Gamma_0(t - t_0) + \int_{-\infty}^{\infty} dt_1\, \Gamma_0(t - t_1)\, V\, \Gamma(t_1 - t_0) \tag{242}$$

Wir betrachten speziell die Situation eines einzelnen Teilchens der Masse m, das sich in einem Potential V bewegt. Zu einer Gleichbehandlung von Raum und Zeit gelangen wir durch Einführung der *retardierten Greenschen Funktionen* als Integralkerne der Operatoren $\Gamma(t)$ und $\Gamma_0(t)$ in der Ortsdarstellung (wir schreiben wieder $x = \{t, \boldsymbol{x}\}$ und $x' = \{t', \boldsymbol{x}'\}$):

$$G_{\rm ret}(x; x') = \langle \boldsymbol{x}|\Gamma(t - t')|\boldsymbol{x}'\rangle = -i\Theta(t - t')\langle \boldsymbol{x}|e^{-i(t-t')H}|\boldsymbol{x}'\rangle \tag{243}$$
$$G^0_{\rm ret}(x; x') = \langle \boldsymbol{x}|\Gamma_0(t - t')|\boldsymbol{x}'\rangle = -i\Theta(t - t')\langle \boldsymbol{x}|e^{-i(t-t')H_0}|\boldsymbol{x}'\rangle \tag{244}$$

Es ergibt sich somit die Integralgleichung

$$G_{\rm ret}(x; x_0) = G^0_{\rm ret}(x; x_0) + \int d^4x_1\, G^0_{\rm ret}(x; x_1)V(x_1)G_{\rm ret}(x_1; x_0) \tag{245}$$

(sogar gültig, wenn $V(x_1)$ von t_1 abhängig ist, obwohl unsere Ableitung diese Möglichkeit nicht vorsah), wobei

$$G^0_{\rm ret}(x; x') = -i\Theta(t - t')\left(\frac{m}{2\pi i(t - t')}\right)^{3/2} \exp\left\{-\frac{m|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|^2}{2i(t - t')}\right\} \tag{246}$$

die sog. *freie retardierte Greensche Funktion* darstellt.

Aus $d\Theta(t)/dt = \delta(t)$ folgt

$$\left(i\frac{d}{dt} - H\right)\Theta(t)e^{-itH} = i\delta(t)I$$

(I=Identität) und somit

$$\langle \boldsymbol{x}|\left(i\frac{d}{dt} - H\right)\Gamma(t - t')|\boldsymbol{x}'\rangle = \delta(t - t')\delta^3(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') = \delta^4(x - x')$$

Die retardierte Greensche Funktion erfüllt also die partielle Differentialgleichung

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2m}\Delta - V(\boldsymbol{x})\right)G_{\rm ret}(x; x') = \delta^4(x - x') \tag{247}$$

Die freie Funktion $G^0_{\text{ret}}(x;x')$ erfüllt die analoge Gleichung mit $V(\boldsymbol{x}) = 0$.

Die Gleichung (245) gestattet – gemäß dem Prozeß der sukzessiven Approximation – eine Reihenentwicklung nach Potenzen des Potentials:

$$
\begin{aligned}
G_{\text{ret}}(x;x_0) &= G^0_{\text{ret}}(x;x_0) \\
&\quad + \int d^4x_1\, G^0_{\text{ret}}(x;x_1)V(x_1)G^0_{\text{ret}}(x_1;x_0) \\
&\quad + \int d^4x_2 \int d^4x_1\, G^0_{\text{ret}}(x;x_2)V(x_2)G^0_{\text{ret}}(x_2;x_1)V(x_1)G^0_{\text{ret}}(x_1;x_0) \\
&\quad + \cdots
\end{aligned}
\tag{248}
$$

Diese Formeln begründen die Störungstheorie für die retardierte Greensche Funktion. Man kann die Entwicklung anschaulich interpretieren als eine Summe über über Ereignisse und jedes Ereignis graphisch darstellen. Die Konvergenz der Reihe bleibt jedoch ein wichtiges (hier ungelöstes) Problem.

Die retardierte Greensche Funktion löst das Problem der Zeitentwicklung einer Wellenfunktion ψ in dem Sinne, daß

$$
\psi(t,\boldsymbol{x}) = \int d^3x_0\, iG_{\text{ret}}(t,\boldsymbol{x};t_0,\boldsymbol{x}_0)\psi(t_0,\boldsymbol{x}_0) \qquad (t > t_0) \tag{249}
$$

gilt, äquivalent mit

$$
\begin{aligned}
\psi(t,\boldsymbol{x}) &= \int d^3x_0\, iG^0_{\text{ret}}(t,\boldsymbol{x};t_0,\boldsymbol{x}_0)\psi(t_0,\boldsymbol{x}_0) \\
&\quad + \int d^3x_0 \int d^4x_1\, G^0_{\text{ret}}(t,\boldsymbol{x};x_1)V(x_1)iG_{\text{ret}}(x_1;t_0,\boldsymbol{x}_0)\psi(t_0,\boldsymbol{x}_0)
\end{aligned}
$$

Durch Vertauschung der Integrationsreihenfolge erhält man eine einfachere Relation, die $\psi(x)$ erfüllt (für $t > t_0$):

$$
\psi(x) = \int d^3x_0\, iG^0_{\text{ret}}(x;t_0,\boldsymbol{x}_0)\psi(t_0,\boldsymbol{x}_0) + \int_{t_1 \geq t_0} d^4x_1\, G^0_{\text{ret}}(x;x_1)V(x_1)\psi(x_1) \tag{250}
$$

Sie beschreibt $\psi(x)$ als Summe einer freien Welle und einer Streuwelle. Zur Erinnerung: Ein Streuexperiment ist dadurch charakterisiert, daß eine einlaufende *freie* Welle existiert, die in der fernen Vergangenheit (Zeit $t_0 = -\infty$) mit der Lösung $\psi(t,\boldsymbol{x})$ übereinstimmt. Diese freie Welle ist gerade durch den ersten Term in (250) charakterisiert, so daß dem Streuproblem die folgende Integralgleichung entspricht:

$$
\psi(x) = \psi_{\text{ein}}(x) + \int d^4x_1\, G^0_{\text{ret}}(x;x_1)V(x_1)\psi(x_1) \tag{251}
$$

Die Wahl von $\psi_{\text{ein}}(x)$ ist uns freigestellt und entspricht einer Randbedingung für die Lösung $\psi(x)$ der Schrödinger-Gleichung. Andererseits hat *jede* Lösung die Form (251), wie wir sahen. Wenn wir in unserer Argumentation Vergangenheit und Zukunft vertauschen, so gelangen wir zu der analogen Darstellung

$$
\psi(x) = \psi_{\text{aus}}(x) + \int d^4x_1\, G^0_{\text{av}}(x;x_1)V(x_1)\psi(x_1) \tag{252}
$$

mit einer freien auslaufenden Welle $\psi_{\text{aus}}(x)$. Sie ist nun nicht mehr beliebig wählbar, da wir über $\psi(x)$ bereits verfügt haben. Vielmehr ist sie durch die einlaufende freie Welle $\psi_{\text{ein}}(x)$ und das Potential V festgelegt. Die Definition der freien avancierten Greenschen Funktion lautet

$$G^0_{\text{av}}(x;x') = i\Theta(t'-t)\langle \boldsymbol{x}|e^{-itH_0}|\boldsymbol{x}'\rangle \tag{253}$$

Die Durchführung eines Streuexperimentes geschieht gewöhnlich so, daß die einlaufende Welle einen festen Impuls $\boldsymbol{p}$ hat und daß die auslaufende Welle wiederum nach den darin vorkommmenden Impulsen $\boldsymbol{p}'$ analysiert wird:

$$\begin{aligned}
\psi_{\text{ein}}(0,\boldsymbol{x}) &= (2\pi)^{-3/2}e^{i\boldsymbol{p}\boldsymbol{x}} \\
\psi_{\text{aus}}(0,\boldsymbol{x}) &= (2\pi)^{-3/2}\int d^3p'\, e^{i\boldsymbol{p}'\boldsymbol{x}}\langle \boldsymbol{p}'|S|\boldsymbol{p}\rangle
\end{aligned}$$

Man spricht in diesem Zusammenhang von der S-Matrix und nennt $\langle \boldsymbol{p}'|S|\boldsymbol{p}\rangle$ das S-Matrixelement zu gegebenen Anfangs- und Endimpuls.

Die Gleichungen (251) und (252) erlauben nun die Darstellung

$$\psi_{\text{aus}}(x) = \psi_{\text{ein}}(x) + \int d^4x_1\, G^0(x;x_1)V(x_1)\psi(x_1) \tag{254}$$

mit

$$G^0(x;x') = G^0_{\text{ret}}(x;x') - G^0_{\text{av}}(x;x') = -i\langle \boldsymbol{x}|e^{-i(t-t')H_0}|\boldsymbol{x}'\rangle$$

Man schreibt daher (mit $E = \boldsymbol{p}^2/(2m)$ und $E' = \boldsymbol{p}'^2/(2m)$)

$$\langle \boldsymbol{p}'|S|\boldsymbol{p}\rangle = \delta^3(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}) + \frac{i}{2m\pi}\delta(E-E')f(\boldsymbol{p}',\boldsymbol{p})$$

und nennt $f(\boldsymbol{p}',\boldsymbol{p})$ die *Streuamplitude*. Die Darstellung ist gültig nur für zeitunabhängige Potentiale. Die Quantenmechanik lehrt, daß $d\sigma/d\Omega = |f(\boldsymbol{p}',\boldsymbol{p})|^2$ der differentielle Wirkungsquerschnitt ist, den man in einem Experiment bestimmt. Vergleiche hierzu den Abschnitt 4.5.

In erster Ordnung der Störungstheorie setzen wir $\psi = \psi_{ein}$ in (254) und erhalten nach einer einfachen Rechnung die sogenannte Bornsche Näherung

$$f_{\text{Born}}(\boldsymbol{p}',\boldsymbol{p}) = -\frac{m}{2\pi}\int d^3x\, e^{i(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\boldsymbol{x}}V(\boldsymbol{x}) \tag{255}$$

Von einem konstanten Faktor abgesehen, ist die Streuamplitude mit dem Fourier-transformierten Potential identisch.

Es soll nicht verschwiegen werden, daß die Existenz der Streumatrix (besser: Streuoperator) S und dessen Unitarität ein mathematisches Problem darstellt und die Entscheidung darüber von den Eigenschaften des Potentials (Abfall im Unendlichen) abhängig ist. Wir sehen dieses Problem besser, indem wir schreiben:

$$\begin{aligned}
\psi(t,\boldsymbol{x}) &= e^{-itH}\phi(\boldsymbol{x}) \\
\psi_{\text{ein}}(t,\boldsymbol{x}) &= e^{-itH_0}\phi_{\text{ein}}(\boldsymbol{x}) \\
\psi_{\text{aus}}(t,\boldsymbol{x}) &= e^{-itH_0}\phi_{\text{aus}}(\boldsymbol{x})
\end{aligned}$$

Ein Zustand $\phi(\boldsymbol{x})$ heißt *Streuzustand*, wenn für ihn die beiden Asymptotenbedingungen

$$\lim_{t\to-\infty} \|e^{-itH}\phi - e^{-itH_0}\phi_{\text{ein}}\| \equiv \lim_{t\to-\infty} \|e^{itH_0}e^{-itH}\phi - \phi_{\text{ein}}\| = 0$$

und

$$\lim_{t\to\infty} \|e^{-itH}\phi - e^{-itH_0}\phi_{\text{aus}}\| \equiv \lim_{t\to\infty} \|e^{itH_0}e^{-itH}\phi - \phi_{\text{aus}}\| = 0$$

erfüllt sind, d.h. wenn $e^{itH_0}e^{-itH}\phi$ in beiden Zeitrichtungen konvergiert. In diesem Fall existieren die Møller-Operatoren

$$\Omega_\pm = \lim_{t\to\pm\infty} e^{itH_0}e^{-itH}$$

auf dem Unterraum $\mathcal{H}_{\text{Str}}$ der Streuzustände, und es gilt

$$\Omega_\pm\Omega_\pm^* = I, \qquad \Omega_\pm^*\Omega_\pm = P_{\text{Str}}$$

wenn P_{Str} den Projektor auf $\mathcal{H}_{\text{Str}}$ bezeichnet. Aus der Definition der Møller-Operatoren folgt unmittelbar

$$e^{itH_0}\Omega_\pm e^{-itH} = \Omega_\pm$$

und somit

$$H_0\Omega_\pm = \Omega_\pm H$$

Der Streuoperator $S = \Omega_+\Omega_-^*$ hat dann die Eigenschaft $H_0S = SH_0$ (Erhaltung der Energie). Das *Vollständigkeitsproblem* besteht nun darin, nachzuweisen, daß der Wertebereich der Møller-Operatoren der gesamte Hilbertraum $\mathcal{H}$ ist. In diesem Fall ist der Streuoperator unitär.

4.4 Der Feynman-Propagator

4.4.1 Der freie Propagator

Die Dirac-Theorie erlaubt ebenfalls die Konstruktion einer Reihe von Greenschen Funktionen. Sie sind alle als Matrixfunktionen aufzufassen, d.h. sie ergeben für jeden Wert ihrer Argumente eine 4×4-Matrix. Darunter ist eine Funktion ausgezeichnet, die man den Feynmanschen Propagator nennt. Diesen wollen wir nur für den Fall konstruieren, wo wir es mit freien Teilchen zu tun haben.

Der Feynmansche Propagator $S_{\text{F}}(x)$ ist durch zwei Bedingungen charakterisiert:

1. Er erfüllt die Differentialgleichung

$$(i\partial\!\!\!/ - m)S_{\text{F}}(x) = \delta^4(x)\mathbb{1}$$

2. Für $t = x_0 > 0$ besitzt $S_{\text{F}}(x)$ nur positive Frequenzen, für $t = x_0 < 0$ nur negative Frequenzen.

Die erste Bedingung charakterisiert alle Greenschen Funktionen der freien Dirac-Gleichung, während die zweite (Feynmansche Rand-)Bedingung eine physikalisch motivierte Forderung darstellt, die zu einer eindeutigen Lösung führt.

Um die Feynmansche Funktion zu konstruieren, führen wir eine Fourier-Transformation aus:

$$S_{\mathrm{F}}(x) = (2\pi)^{-4} \int d^4p \, e^{-ipx} \tilde{S}_{\mathrm{F}}(p) \tag{256}$$

und erhalten aus der 1. Bedingung:

$$(\not{p} - m)\tilde{S}_{\mathrm{F}}(p) = \mathbb{1},$$

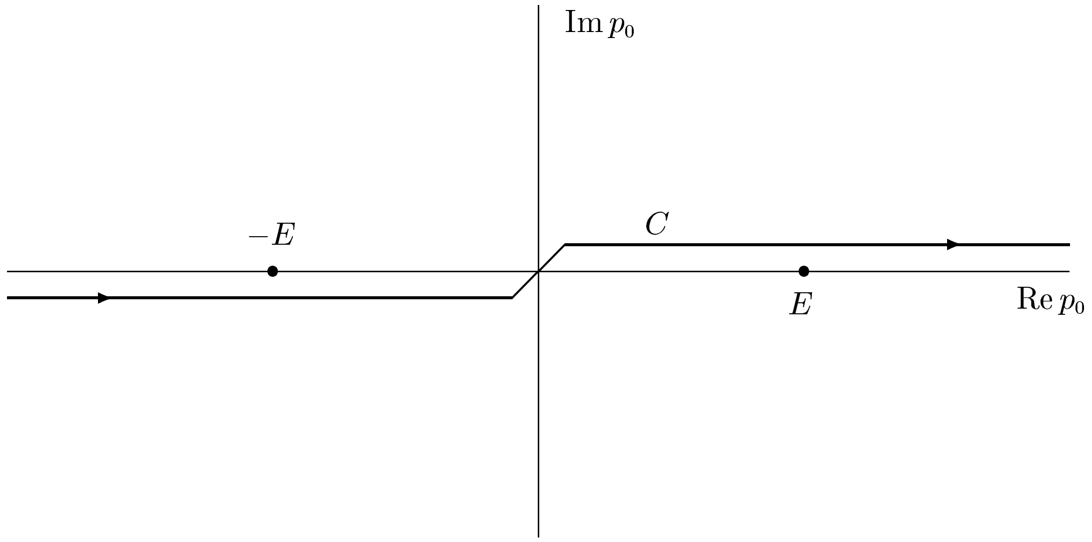
also

$$\tilde{S}_{\mathrm{F}}(p) = \frac{1}{\not{p} - m} = \frac{\not{p} + m}{p^2 - m^2}$$

In (256) eingesetzt führt dies zu einem Integral mit singulärem Integranden. Wir denken uns die p_0-Integration zuerst (also bei festem $\boldsymbol{p}$) ausgeführt und schreiben

$$p^2 - m^2 = p_0^2 - E^2, \qquad E = \sqrt{m^2 + \boldsymbol{p}^2}$$

Der Integrand ist eine meromorphe Funktion in der komplexen Variablen p_0 mit zwei einfachen Polen auf der reellen Achse, nämlich bei $p_0 = \pm E$. Jeder Integrationsweg C von $p_0 = -\infty$ nach $p_0 = +\infty$, der diese Pole vermeidet, definiert eine bestimmte Greensche Funktion. Um die 2. Bedingung – die Feynmansche Randbedingung – zu erfüllen, muß der Weg so gelegt werden, wie in der Abbildung gezeigt:



Grund: Für $t > 0$ ist der Integrand eine für $\mathrm{Im}\, p_0 < 0$ (untere Halbebene) abfallende Funktion. Wir können somit den Integrationsweg C schließen durch Hinzunahme eines halbkreisförmigen Weges in der unteren Halbebene mit großem Radius, ohne den Wert des Integrals zu verändern. Das so entstandene Integral werten wir mit Hilfe des

Residuensatzes aus; denn es schließt genau einen Pol ein, den Pol bei $p_0 = E$:

$$
\begin{aligned}
t > 0: \qquad S_{\mathrm{F}}(x) &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\, e^{i\boldsymbol{px}} \int_C \frac{dp_0}{2\pi}\, e^{-ip_0t}\, \frac{p_0\gamma^0 - \boldsymbol{p\gamma} + m}{(p_0 - E)(p_0 + E)} \\
&= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\, e^{i\boldsymbol{px} - iEt}\, \frac{E\gamma^0 - \boldsymbol{p\gamma} + m}{2iE} \\
&= \frac{-i}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3p}{2E}\, e^{-ipx} (\not{p} + m), \qquad p = \{E, \boldsymbol{p}\} \\
&= -i(i\not{\partial} + m)\Delta_+(x)
\end{aligned} \tag{257}
$$

mit der Δ_+-Funktion aus der Klein-Gordon-Theorie:

$$
\Delta_+(x) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3p}{2E}\, e^{-ipx}, \qquad p = \{E, \boldsymbol{p}\} \tag{258}
$$

Nun interessiert die Frage, wie sich $S_{\mathrm{F}}(x)$ für negative Zeiten verhält. Denn dieses Verhalten ist nun festgelegt. Für $t < 0$ ist der Integrand eine für $\mathrm{Im}\, p_0 > 0$ (obere Halbebene) abfallende Funktion. Wir können somit den Integrationsweg C schließen durch Hinzunahme eines halbkreisförmigen Weges in der oberen Halbebene mit großem Radius, ohne den Wert des Integrals zu verändern. Das so entstandene Integral werten wir wieder mit Hilfe des Residuensatzes aus; denn es schließt genau einen Pol ein, den Pol bei $p_0 = -E$:

$$
\begin{aligned}
t < 0: \qquad S_{\mathrm{F}}(x) &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\, e^{i\boldsymbol{px}} \int_C \frac{dp_0}{2\pi}\, e^{-ip_0t}\, \frac{p_0\gamma^0 - \boldsymbol{p\gamma} + m}{(p_0 - E)(p_0 + E)} \\
&= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\, e^{i\boldsymbol{px} + iEt}\, \frac{-E\gamma^0 - \boldsymbol{p\gamma} + m}{2iE} \\
&= \frac{-i}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3p}{2E}\, e^{ipx} (-\not{p} + m), \qquad p = \{E, \boldsymbol{p}\} \\
&= -i(i\not{\partial} + m)\Delta_-(x)
\end{aligned} \tag{259}
$$

Um von der zweiten zur dritten Zeile zu gelangen, haben wir im Integral die Substitution $\boldsymbol{p} \to -\boldsymbol{p}$ vorgenommen. Schließlich führten wir die Δ_--Funktion aus der Klein-Gordon-Theorie ein:

$$
\Delta_-(x) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3p}{2E}\, e^{ipx}, \qquad p = \{E, \boldsymbol{p}\} \tag{260}
$$

Insgesamt erhalten wir so eine für alle Werte von t gültigen Darstellung:

$$
S_{\mathrm{F}}(x) = (i\not{\partial} + m)\Delta_{\mathrm{F}}(x) \tag{261}
$$

$$
i\Delta_{\mathrm{F}}(x) = \Theta(t)\Delta_+(x) + \Theta(-t)\Delta_-(x) \tag{262}
$$

Hierbei ist $\Delta_{\mathrm{F}}(x)$ der Feynman-Propagator der Klein-Gordon-Theorie. Er löst die Gleichung

$$
(\Box + m^2)\Delta_{\mathrm{F}}(x) = -\delta^4(x)
$$

für die Feynmanschen Randbedingungen. Diese Gleichung und (261) zusammen mit $(i\not{\partial} - m)(i\not{\partial} + m) = -(\Box + m^2)$ führen automatisch zu $(i\not{\partial} - m)S_{\mathrm{F}}(x) = \delta^4(x)$.

In der obigen Konstruktion wurde ein bestimmter Weg C vorgeschlagen. Ist er eindeutig, also eine Folge der 2. Bedingung? Man macht sich klar: Jede andere Wahl des Weges C würde nicht den Effekt haben, daß für $t > 0$ ($t < 0$) nur der Pol $p_0 = E$ ($p_0 = -E$) für den Wert des Integrals ausschlaggebend ist und somit nur positive (negative) Frequenzen auftreten. Jede Teilforderung (entweder diejenige für $t > 0$ oder für $t < 0$) reicht nicht aus, den Propagator festzulegen!

Zur Bestimmung von $\Delta_{\mathrm{F}}(x)$ durch ein Integral über Viererimpulse müssen wir – so wie oben geschehen – die komplexe p_0-Ebene betrachten. Dies ist unbequem aber vermeidbar, wenn wir den folgenden Ausdruck einführen:

$$p^2 - m^2 + i0 = p_0^2 - E^2 + i0 = (p_0 - E + i0)(p_0 + E - i0)$$

Unter $i0$ verstehen wir eine kleine positiv-imaginäre Größe, die nach Ausführung aller Integrationen gegen Null strebt. Es ist darum möglich, quadratische (oder höhere Potenzen) dieser Größe zu vernachlässigen, ebenso, $2E \cdot i0$ mit $i0$ zu identifizieren, weil $E > 0$ gilt. Ohne komplexe Integration können wir jetzt schreiben:

$$\Delta_{\mathrm{F}}(x) = (2\pi)^{-4} \int d^4p\, e^{-ipx} \frac{1}{p^2 - m^2 + i0} \tag{263}$$

Die $i0$-Vorschrift führt dazu, daß die Pole ein wenig von der reellen Achse entfernt liegen und zwar bei $E - i0$ bzw. $-E + i0$, so daß der Integrationsweg entlang der reellen p_0-Achse diese Pole in der korrekten Weise passiert.

4.4.2 Der Streuoperator für ein äußeres Potential

Die Dirac-Gleichung mit äußerem Potential schreiben wir so, als ob es sich dabei um eine inhomogene Differentialgleichung handelt:

$$(i\not\partial - m)\psi = e\not A\psi \tag{264}$$

Die allgemeine Lösung hat dann die Gestalt

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \int d^4x'\, S_{\mathrm{F}}(x - x') e\not A(x')\psi(x') \tag{265}$$

wobei $(i\not\partial - m)\psi_0(x) = 0$ gilt und die Wahl von $\psi_0(x)$ einer Randbedingung entspricht.

Nun ist $\psi_0(x)$ i.allg. weder mit der einlaufenden noch mit der auslaufenden Welle identisch. Diese ergeben sich vielmehr aus dem Verhalten von (265) für $t \to \pm\infty$:

$$\psi_{\mathrm{aus}}(x) = \psi_0(x) - \int d^4x'\, iS_+(x - x') e\not A(x')\psi(x') \tag{266}$$

$$\psi_{\mathrm{ein}}(x) = \psi_0(x) - \int d^4x'\, iS_-(x - x') e\not A(x')\psi(x') \tag{267}$$

mit

$$S_\pm(x) = (i\not\partial + m)\Delta_\pm(x), \tag{268}$$

Lösungen von $(i\not\partial - m)S_\pm(x) = 0$. Beide Wellen, ein- wie auslaufend, enthalten i.allg. zugleich positive wie negative Frequenzen. Aufgabe der Funktion $\psi_0(x)$ ist es, die physikalische Randbedingung in einem Streuexperiment festzulegen. Sie läßt sich durch die asymptotischen Zustände ausdrücken. Denn aus (266) folgt die Gleichung $\psi^{(-)}_{\text{aus}} = \psi^{(-)}_0$, ebenso aus (267) die Gleichung $\psi^{(+)}_{\text{ein}} = \psi^{(+)}_0$, so daß gilt:

$$\psi_0(x) = \psi^{(+)}_{\text{ein}}(x) + \psi^{(-)}_{\text{aus}}(x) \tag{269}$$

Die Integralgleichung (265) zur Bestimmung von $\psi(x)$, zur Lösung des Streuproblems also, verlangt, daß wir ψ_0 kennen. Zwei Situationen sind hierbei hervorzuheben:

- Elektronenstreuung: $\psi^{(-)}_{\text{aus}} = 0$, d.h. $\psi_0 = \psi^{(+)}_{\text{ein}}$
- Positronenstreuung: $\psi^{(+)}_{\text{ein}} = 0$, d.h. $\psi_0 = \psi^{(-)}_{\text{aus}}$

Nach Wahl von ψ_0 läßt sich die Lösung formal durch eine Störungsreihe ausdrücken, d.h. als eine formale Potenzreihe nach der Kopplungskonstanten e. Hierzu schreiben wir (265) abkürzend

$$\psi = \psi_0 + eS_{\text{F}}\not{A}\psi$$

und erhalten die gewünschte Reihe als

$$\psi = \psi_0 + eS_{\text{F}}\not{A}\psi_0 + e^2 S_{\text{F}}\not{A}S_{\text{F}}\not{A}\psi_0 + e^3 S_{\text{F}}\not{A}S_{\text{F}}\not{A}S_{\text{F}}\not{A}\psi_0 + \cdots \tag{270}$$

Ist $\psi(x)$ bekannt, so liefern die Gleichungen

$$\psi^{(+)}_{\text{aus}}(x) = \psi^{(+)}_{\text{ein}}(x) - \int d^4x'\, iS_+(x-x')e\not{A}(x')\psi(x') \tag{271}$$

$$\psi^{(-)}_{\text{ein}}(x) = \psi^{(-)}_{\text{aus}}(x) - \int d^4x'\, iS_-(x-x')e\not{A}(x')\psi(x') \tag{272}$$

die für die Analyse des Streuproblems notwendigen Beziehungen zwischen den asymptotischen Zuständen. Die Analyse geht von ebenen Wellen aus.

Die Streuung $(p,\sigma) \to (p',\sigma')$ eines Elektrons führt zu dem folgenden Ansatz:

$$\begin{aligned}\psi^{(+)}_{\text{ein}}(x) &= e^{-ipx}u(p,\sigma)\\ \psi^{(+)}_{\text{aus}}(x) &= \int \frac{d^3p'}{2E'}\, e^{-ip'x}u(p',\sigma')\langle p'\sigma'|S|p\sigma\rangle_{\text{Elektron}}\end{aligned}$$

Die Streuung $(p,\sigma) \to (p',\sigma')$ eines Positrons wird analog beschrieben:

$$\begin{aligned}\psi^{(-)}_{\text{aus}}(x) &= e^{ip'x}v(p',\sigma')\\ \psi^{(-)}_{\text{ein}}(x) &= \int \frac{d^3p}{2E}\, e^{ipx}v(p,\sigma)\langle p'\sigma'|S|p\sigma\rangle_{\text{Positron}}\end{aligned}$$

Im ersten Fall (Elektronstreuung) machen wir Gebrauch von den Formeln

$$\begin{aligned}(2\pi)^{-3}\int d^3x\, e^{ip'x}u(p',\sigma')^*\psi^{(+)}_{\text{aus}}(x) &= \langle p'\sigma'|S|p\sigma\rangle_{\text{Elektron}}\\ (2\pi)^{-3}\int d^3x\, e^{ip'x}u(p',\sigma')^*\psi^{(+)}_{\text{ein}}(x) &= 2E\delta^3(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\delta_{\sigma\sigma'}\\ (2\pi)^{-3}\int d^3x\, e^{ip'x}u(p',\sigma')^*S_+(x-x') &= (2\pi)^{-3}e^{ip'x'}\bar{u}(p',\sigma')\end{aligned}$$

Für die letzte Zeile benutzten wir

$$u(p',\sigma')^*(\not{p}'+m) = u(p',\sigma')^* \sum_\sigma u(p',\sigma)\bar{u}(p',\sigma) = 2E'\bar{u}(p',\sigma')$$

Aus (271) folgt dann die Darstellung

$$\langle p'\sigma'|S|p\sigma\rangle_{\text{Elektron}} = 2E\delta^3(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\delta_{\sigma\sigma'} - i(2\pi)^{-3}\int d^4x\, e^{ip'x}\,\bar{u}(p',\sigma')e\not{A}(x)\psi(x) \tag{273}$$

Beachte: $\psi(x)$ hängt von p und σ ab.

Im zweiten Fall (Positronstreuung) machen wir Gebrauch von den Formeln

$$\begin{aligned}
(2\pi)^{-3}\int d^3x\, e^{-ip'x} v(p,\sigma)^*\psi^{(-)}_{\text{ein}}(x) &= \langle p'\sigma'|S|p\sigma\rangle_{\text{Positron}} \\
(2\pi)^{-3}\int d^3x\, e^{-ip'x} v(p,\sigma)^*\psi^{(+)}_{\text{aus}}(x) &= 2E\delta^3(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\delta_{\sigma\sigma'} \\
(2\pi)^{-3}\int d^3x\, e^{-ip'x} v(p,\sigma)^* S_-(x-x') &= -(2\pi)^{-3}e^{-ip'x'}\,\bar{v}(p,\sigma')
\end{aligned}$$

Für die letzte Zeile benutzten wir

$$v(p,\sigma)^*(-\not{p}+m) = -v(p,\sigma)^* \sum_{\sigma'} v(p,\sigma')\bar{v}(p,\sigma') = -2E\bar{v}(p,\sigma)$$

Aus (272) folgt dann die Darstellung

$$\langle p'\sigma'|S|p\sigma\rangle_{\text{Positron}} = 2E\delta^3(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\delta_{\sigma\sigma'} + i(2\pi)^{-3}\int d^4x\, e^{-ipx}\bar{v}(p,\sigma)e\not{A}(x)\psi(x) \tag{274}$$

Beachte: ψ hängt von p' und σ' ab.

Eine oft benutzte Näherung stellt die *Born-Approximation* dar. Hierzu setzen wir $\psi = \psi^{(+)}_{\text{ein}}$ in (273) bzw. $\psi = \psi^{(-)}_{\text{aus}}$ in (274) und erhalten:

$$\langle p'\sigma'|S-I|p\sigma\rangle_{\text{Elektron}} = -i(2\pi)^{-3}\int d^4x\, e^{i(p'-p)x}\bar{u}(p',\sigma')e\not{A}(x)u(p,\sigma) \tag{275}$$

beziehungsweise

$$\langle p'\sigma'|S-I|p\sigma\rangle_{\text{Positron}} = i(2\pi)^{-3}\int d^4x\, e^{i(p'-p)x}\bar{v}(p,\sigma)e\not{A}(x)v(p',\sigma') \tag{276}$$

4.4.3 Der Propagator für ein äußeres Potential

Wir kehren zurück zu der Reihendarstellung (270) für die Lösung $\psi(x)$ der Dirac-Gleichung in einem äußeren Potential $A_\mu(x)$ in Abhängigkeit von der freien Lösung $\psi_0(x)$, die das asymptotische Verhalten beschreibt. Man erkennt darin die Reihe

$$S'_{\text{F}} = S_{\text{F}} + eS_{\text{F}}\not{A}S_{\text{F}} + e^2S_{\text{F}}\not{A}S_{\text{F}}\not{A}S_{\text{F}} + \cdots \tag{277}$$

deren Terme unabhängig von ψ_0 sind. Während der freie Propagator $S_{\text{F}}(x-x_0)$ wegen Translationsinvarianz nur von der Differenz $x-x_0$ abhängt, gilt dies nicht mehr für

$S'_{\mathrm{F}}(x;x_0)$, den Propagator mit Potential, eine Matrixfunktion, deren Reihenentwicklung so beginnt:

$$S'_{\mathrm{F}}(x;x_0) = S_{\mathrm{F}}(x-x_0) + e\int d^4x_1\, S_{\mathrm{F}}(x-x_1)\not{A}(x_1)S_{\mathrm{F}}(x_1-x_0) + \cdots$$

Ein Blick auf (270) zeigt, daß – die Kenntnis von S'_{F} vorausgesetzt – die Lösung der Dirac-Gleichung wie folgt dargestellt werden kann:

$$\psi = \psi_0 + eS_{\mathrm{F}}\not{A}\psi_0 \tag{278}$$

Ausgeschrieben heißt dies:

$$\psi(x) = \psi_0(x) + e\int d^4x'\, S_{\mathrm{F}}(x-x')\not{A}(x')\psi_0(x')$$

Das Problem, die Dirac-Gleichung für alle asymptotischen Zustände ψ_0 zu lösen, ist damit reduziert auf das Problem, den Propagator S'_{F} bei gegebenen Potential $\boldsymbol{A}_\mu$ zu bestimmen.

Es ist offensichtlich, daß die Reihe (277) aus der Integralgleichung

$$S'_{\mathrm{F}} = S_{\mathrm{F}} + eS_{\mathrm{F}}\not{A}S'_{\mathrm{F}} \tag{279}$$

durch den Vorgang der sukzessiven Approximation entsteht, ferner, daß durch Anwendung des Dirac-Operators auf beide Seiten von (279) die Differentialgleichung

$$(i\not{\partial} - m)S'_{\mathrm{F}}(x;x_0) = \delta^4(x-x_0)\mathbb{1} + e\int d^4y\, \delta^4(x-y)\not{A}(y)S'_{\mathrm{F}}(y;x_0)$$

entsteht, gleichbedeutend mit

$$(i\not{\partial} - e\not{A}(x) - m)S'_{\mathrm{F}}(x;x_0) = \delta^4(x-x_0)\mathbb{1} \tag{280}$$

Die Randbedingungen, die die Lösung dieser Differentialgleichung in einer solchen Weise festlegen, daß der Feynman-Propagator entsteht, sind durch die Integralgleichung (279) festgelegt.

Für Feynman war die Reihe (277) Ausgangspunkt der *Pfadintegralmethode*. Er interpretierte die Summe bzw. die Integrale darin als eine Summe über alle Pfade eines klassischen Punktteilchens (auch Trajektorien oder Weltlinien genannt). Auf dem Weg von x_0 nach x hat ein Elektron die Chance, ohne Streuung vermöge des freien Propagators zum Endpunkt zu gelangen, oder aber auf dem Wege im Punkte x_1 gestreut zu werden (Einfachstreuung), schließlich in Punkten $x_1, x_2, \ldots, x_n$ gestreut zu werden (Mehrfachstreuung). Zwischen den Punkten, in denen das Elektron mit dem äußeren Potential wechselwirkt, bewegt es sich frei, d.h. gemäß dem freien Feynman-Propagator. Über alle diese Möglichkeiten ist zu summieren bzw. zu integrieren.

Diese Sichtweise macht den Streuvorgang sehr anschaulich und ist unproblematisch, solange die Ereignisse $x_1, x_2, \ldots, x_n$ zeitlich *aufsteigend* geordnet sind:

$$x_0^0 < x_1^0 < x_2^0 < \cdots < x_n^0 < x^0$$

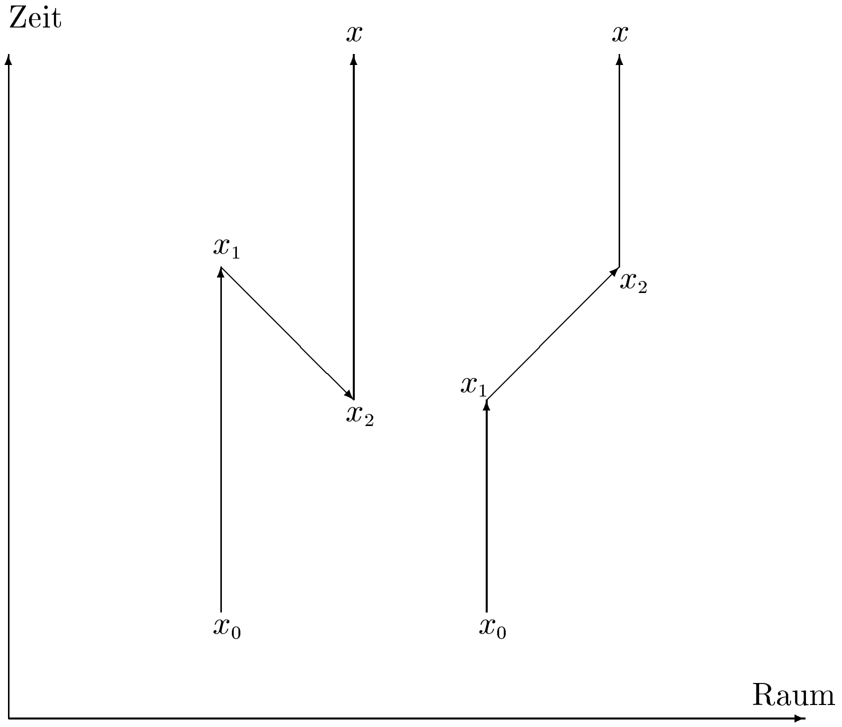


Abbildung 1: Zwei Weltlinien eines Elektrons als Beitrag 2. Ordnung zum vollen Feynman-Propagator $S'_{\mathrm{F}}(x - x_0)$. Links: Zwischen den Wechselwirkungspunkten x_1 und x_2 läuft das Elektron rückwärts in der Zeit. Dies entspricht der Produktion eines virtuellen e^+e^--Paares im Punkte x_2 und einer Paarvernichtung im Punkte x_1. Rechts: Normaler Streuvorgang. Hier ist die Identität des Elektrons zu jedem Zeitpunkt gewahrt. Die durch Pfeile bezeichneten Strecken repräsentieren den freien Propagator S_{F}.

Da bei einer Integration über die Ereignisse auch alle anderen zeitlichen Ordnungen vorkommen, benötigt man eine Interpretation derjenigen Weltlinien, die in Teilbereichen rückläufig sind, d.h. in der Zeit rückwärts laufen. Hier gibt das Elektron zu gewissen Zeitpunkten seine Identität auf, um an anderer Stelle neu zu entstehen (siehe die Figur). Nun haben wir schon früher festgestellt, daß Zeitumkehr und Frequenzumkehr dasselbe bewirken, nämlich den Übergang zum Positron: Ein rückwärts laufendes Elektron (also ein Elektron negativer Frequenz) entspricht einem vorwärts laufenden Positron. Virtuelle Paarerzeugung und Paarvernichtung in den Wechselwirkungspunkten sind die Folge. Nicht die Teilchenzahl ist in Streuprozessen eine Erhaltungsgröße sondern die Ladung. Sie ist zu jedem Zeitpunkt während des Streuvorganges absolut erhalten.

4.5 Der differentielle Wirkungsquerschnitt

Die Verbindung zwischen dem Streuoperator S und dem Streuexperiment erfordert eine gesonderte Überlegung. Zunächst ist klar, daß für *normierte* Zustände die Übergangswahrscheinlichkeit durch $|\langle\psi_{\mathrm{aus}}|S|\psi_{\mathrm{ein}}\rangle|^2$ gegeben ist. Ebene Wellen stellen jedoch keine normierbare Zustände dar, vielmehr gilt die Orthogonalitätsrelation

$$\langle p\sigma|p'\sigma'\rangle = 2E\delta^3(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}')\delta_{\sigma\sigma'} \tag{281}$$

und die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_\sigma \int \frac{d^3p}{2E}\,|p\sigma\rangle\langle p\sigma| = I \tag{282}$$

In einem großem Volumen $V \subset \mathbb{R}^3$ gilt anstelle von (281):

$$\langle p\sigma|p'\sigma'\rangle = 2E(2\pi)^{-3}\int_V d^3x\, e^{i(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\boldsymbol{x}}\,\delta_{\sigma\sigma'}$$

Wir gelangen so zu einer akzeptablen Normierung des einlaufenden Zustandes:

$$\langle p\sigma|p\sigma\rangle = 2E(2\pi)^{-3}|V|$$

($|V|$ ist der Volumeninhalt von V).

Ist das Potential $A_\mu(x)$ zeitunabhängig, so folgt daraus die Energie-Erhaltung im Streuprozeß. Dies berücksichtigen wir durch die Schreibweise

$$\langle p'\sigma'|S-I|p\sigma\rangle = \frac{i}{\pi} f(\boldsymbol{p}'\sigma',\boldsymbol{p}\sigma)\delta(E-E') \tag{283}$$

und nennen $f(\boldsymbol{p}'\sigma', p\sigma)$ die *Streuamplitude*. Auch dieser Formel liegt eine Idealisierung zugrunde: Die verstrichene Zeit T (zwischen Anfang und Ende der Streuprozesses) ist unendlich. Für endliches T haben wir offensichtlich die folgende Ersetzung vorzunehmen:

$$2\pi\delta(E-E') \;\to\; \int_{-T/2}^{T/2} dt\, e^{i(E-E')t} = \frac{2\sin((T/2)(E-E'))}{E-E'}$$

Im Sinne der Distributionen gilt

$$\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\left(\frac{2\sin((T/2)(E-E'))}{E-E'}\right)^2 = 2\pi\delta(E-E')$$

so daß wir – für genügend großes T – zu einer Ratengleichung gelangen:

$$\frac{1}{T}|\langle p'\sigma'|S-I|p\sigma\rangle|^2 = \frac{1}{2\pi^3}|f(\boldsymbol{p}'\sigma',\boldsymbol{p}\sigma)|^2\delta(E-E')$$

Die Lehre, die man daraus zu ziehen hat, lautet: Nur Wahrscheinlichkeiten pro Zeit (also Raten) haben einen Sinn im Limes $T\to\infty$. Beachten wir nun noch die Normierung der ebenen Wellen in einem endlichen Volumen V, so kommen wir zu der Aussage, daß die differentielle Rate für die Streuung von N Teilchens in das Volumenelement d^3p' des Impulsraumes, gültig für $p \neq p'$, durch

$$\begin{aligned} dR &= \frac{N}{T}\frac{d^3p'}{2E'}|\langle p'\sigma'|S-I|p\sigma\rangle|^2\frac{(2\pi)^3}{2E|V|} \\ &= \frac{\rho}{2\pi^3}\frac{d^3p'}{2E'}\frac{(2\pi)^3}{2E}|f(\boldsymbol{p}'\sigma',\boldsymbol{p}\sigma)|^2\delta(E-E') \\ &= \rho v|f(\boldsymbol{p}'\sigma',p\sigma)|^2\delta(E-E')dE'd\Omega \end{aligned} \tag{284}$$

gegeben ist. Um zur letzten Zeile zu gelangen, haben wir die Teilchendichte $\rho = N/|V|$ eingeführt, sind zu Kugelkoordinaten k, θ, ϕ für den auslaufenden Impuls $\boldsymbol{p}'$ übergegangen mit

$$k = |\boldsymbol{p}'|, \qquad d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi, \qquad d^3p' = k^2 dk d\Omega,$$

haben $kdk = E'dE'$ benutzt (eine Folge von $k^2 + m^2 = E'^2$) und die Geschwindigkeit $v = k/E$ eingeführt. Man nennt $d\Omega$ das Raumwinkelelement. Mathematisch gesehen ist es das Oberflächenelement der Einheitssphäre.

Nun erkennt man: Die Streurate dR ist der Stromdichte ρv der einlaufenden Teilchen proportional, was unmittelbar plausibel ist. Der Quotient Streurate/Stromdichte wird als Wirkungsquerschnitt bezeichnet. Im vorliegenden Fall ist es vernünftig, über die Endenergie E' zu integrieren, da sie durch die Anfangsenergie bereits festgelegt ist. Im allgemeinen ist weder der einfallende Strahl polarisiert noch ist der Detektor in der Lage, die Polarisation der gestreuten Teilchen festzustellen. In diesem Fall mittelt man über σ und summiert über σ'.

Als *differentiellen Wirkungsquerschnitt* bezeichnet man den Ausdruck

$$d\sigma = \tfrac{1}{2}\sum_{\sigma,\sigma'} |f(\boldsymbol{p}'\sigma', \boldsymbol{p}\sigma)|^2 d\Omega \tag{285}$$

$$= \frac{\text{Zahl der in } d\Omega \text{ pro Zeit hinein gestreuten Teilchen}}{\text{Stromdichte der einlaufenden Teilchen}}$$

während $\sigma = \int d\sigma$ der *totalen Wirkungsquerschnitt* ist. Die Bezeichnung erklärt sich daraus, daß σ die Dimension einer Fläche besitzt, mithin das Target (Streuzentrum) so wirkt, als ob es dem Teilchenstrahl eine Fläche entgegenstellt, die den Strahl ablenkt.

4.6 Die Mott-Streuformel

Die Formel von Rutherford für die Streuung von geladenen Teilchen (ursprünglich α-Teilchen) an dem Coulomb-Potential eines Kerns (Kernladungszahl Z) erfährt eine Korrektur, wenn es sich bei den gestreuten Teilchen um schnelle Elektronen handelt. Die durch die Dirac-Theorie verursachte relativistische Korrektur führt zur Mott-Streuformel, die wir nun berechnen wollen. Hierzu setzen wir $e\not{A}(x) = -Z\alpha r^{-1}\gamma^0$, so daß

$$(2\pi)^{-3}\int d^4x\, e^{i(p'-p)x}\, e\not{A}(x) = -\frac{Z\alpha}{\pi|\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'|^2}\,\delta(E-E')\,\gamma^0$$

Man nennt allgemein $\boldsymbol{q} = \boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}'$ den *Impulsübertrag*. Doch ist es mitunter sinnvoll, den Vierervektor $q = p - p'$ so zu nennen. Wegen $E = E'$ erweist sich nämlich

$$q^2 = (p - p')^2 = -\boldsymbol{q}^2$$

als eine Lorentz-Invariante.

In der Bornschen Näherung erhalten wir die Streuamplitude

$$f(\boldsymbol{p}'\sigma', \boldsymbol{p}\sigma) = \frac{Z\alpha}{\boldsymbol{q}^2}\bar{u}(p', \sigma')\gamma^0 u(p, \sigma)$$

und hieraus den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Mott}} = \left(\frac{Z\alpha}{\boldsymbol{q}^2}\right)^2 \tfrac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'} |\bar{u}(p',\sigma')\gamma^0 u(p,\sigma)|^2 \tag{286}$$

Die Spinsummation läßt sich ausführen. In einem ersten Schritt führt man die Summe auf eine Spur von Dirac-Matrizen zurück:

$$\begin{aligned} R &:= \sum_{\sigma\sigma'} |\bar{u}(p',\sigma')\gamma^0 u(p,\sigma)|^2 \\ &= \text{Spur} \sum_{\sigma'} u(p',\sigma')\bar{u}(p',\sigma')\gamma^0 \sum_{\sigma} u(p,\sigma)\bar{u}(p,\sigma)\gamma^0 \\ &= \text{Spur}\,(\not{p}' + m)\gamma^0(\not{p} + m)\gamma^0 \\ &= \text{Spur}\,\not{p}'\gamma^0\not{p}\gamma^0 + m^2\text{Spur}\,\gamma^0\gamma^0 \end{aligned}$$

Hierbei verwendeten wir die Vollständigkeitsrelation der u-Spinoren und die Tatsache (vgl. Übungsblatt 4), daß die Spur eines Produktes von drei γ-Matrizen verschwindet. Elementare Algebra führt auf die Identitäten (gültig für Vierervektoren a, b, c, d):

$$\text{Spur}\,\not{a}\not{b} = 4a\cdot b \tag{287}$$

$$\text{Spur}\,\not{a}\not{b}\not{c}\not{d} = 4(a\cdot b\, c\cdot d + a\cdot d\, b\cdot c - a\cdot c\, b\cdot d) \tag{288}$$

Mit $n = \{1, 0, 0, 0\}$ erhalten wir:

$$R = 4(2p\cdot n\, p'\cdot n - p\cdot p' + m^2) = 4(2EE' - p\cdot p' + m^2)$$

Aus $E = E'$ folgt $|\boldsymbol{p}| = |\boldsymbol{p}'|$, also $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}' = \boldsymbol{p}^2\cos\Theta$ und

$$p\cdot p' - m^2 = \boldsymbol{p}^2(1 - \cos\Theta) = 2\boldsymbol{p}^2\sin^2(\Theta/2)$$

wobei Θ den Streuwinkel bezeichnet. Nun setzen wir $\beta = |\boldsymbol{p}|/E$ und erhalten

$$R = 8\frac{\boldsymbol{p}^2}{\beta^2}(1 - \beta^2\sin^2(\Theta/2)) = 8\frac{m^2}{1-\beta^2}(1 - \beta^2\sin^2(\Theta/2))$$

Schließlich schreiben wir für den Impulsübertrag

$$\boldsymbol{q}^2 = 2\boldsymbol{p}^2(1 - \cos\Theta) = 4\boldsymbol{p}^2\sin^2(\Theta/2)$$

setzen die gewonnenen Ausdrücke für R und $\boldsymbol{q}^2$ in $d\sigma/d\Omega = (Z\alpha/\boldsymbol{q}^2)\frac{1}{2}R$ ein und gewinnen so die Endformel

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Mott}} = \frac{Z^2\alpha^2 m^2}{4\boldsymbol{p}^4\sin^4(\Theta/2)}\,\frac{1 - \beta^2\sin^2(\Theta/2)}{1-\beta^2} \tag{289}$$

Auf der rechten Seite bezeichnet der erste Quotient den Wirkungsquerschnitt nach Rutherford, während der zweite Quotient die relativistische Korrektur darstellt, die unter anderem die Tatsache berücksichtigt, daß Elektronen einen Spin haben (obwohl

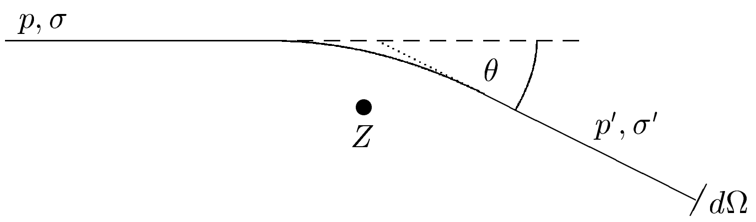


Abbildung 2: Streuung von Elektronen an einem Kern der Kernladungszahl Z

dieser im Streuexperiment nicht beobachtet wird). Der Korrekturfaktor ist stets ≥ 1 und $= 1$ nur für die Rückwärtsstreuung ($\Theta = \pi$).

Was ändert sich, wenn wir Positronen am gleichen Target streuen? Hier gilt in Bornscher Näherung

$$f(\boldsymbol{p}'\sigma', \boldsymbol{p}\sigma) = -\frac{Z\alpha}{\boldsymbol{q}^2}\bar{v}(p,\sigma)\gamma^0 v(p',\sigma')$$

Die Spinsumme führt jedoch auf das gleiche Ergebnis:

$$\begin{aligned} R &:= \sum_{\sigma\sigma'} |\bar{v}(p,\sigma)\gamma^0 v(p',\sigma')|^2 \\ &= \text{Spur} \sum_{\sigma} v(p,\sigma)\bar{v}(p,\sigma)\gamma^0 \sum_{\sigma'} v(p',\sigma')\bar{v}(p',\sigma')\gamma^0 \\ &= \text{Spur}\,(\not{p} - m)\gamma^0(\not{p}' - m)\gamma^0 \\ &= \text{Spur}\,\not{p}\gamma^0\not{p}'\gamma^0 + m^2\text{Spur}\,\gamma^0\gamma^0 \end{aligned}$$

An der Endformel ändert sich nichts. Die Tatsache, daß Positronen die entgegengesetzte Ladung tragen, macht sich erst in der nächsten Ordnung der Störungsreihe bemerkbar:

$$\begin{aligned} |f|^2 &= |\alpha f_1 + \alpha^2 f_2 + \cdots|^2 \\ &= \alpha^2|f_1|^2 + \alpha^3(f_1 f_2^* + f_2 f_1^*) + \cdots \end{aligned}$$

Denn, wenn f_1 das Vorzeichen wechselt, wechselt auch der Interferenzterm $f_1 f_2^* + f_2 f_1^*$ sein Vorzeichen.

Die Mott-Streuformel (289) ist nicht ohne weiteres auf die Streuung von Elektronen an Elektronen anwendbar. Denn die Gültigkeit setzt voraus, daß die Target-Teilchen keine Energie aufnehmen, also unendlich schwer sind.

Die Mott-Streuformel (289) besitzt typische Eigenschaften, die von dem schwachen Abfall des Potentials im Unendlichen (Langreichweitigkeit) herrührt:

- Der differentielle Wirkungsquerschnitt strebt für $\Theta \to 0$ gegen Unendlich.
- Der totale Wirkungsquerschnitt $\sigma = \int (d\sigma/d\Omega) d\Omega$ existiert nicht; denn das Integral divergiert.
- Für $\boldsymbol{p} \to 0$ wächst $d\sigma/d\Omega$ unbegrenzt an: Langsame Elektronen werden besonders stark gestreut.

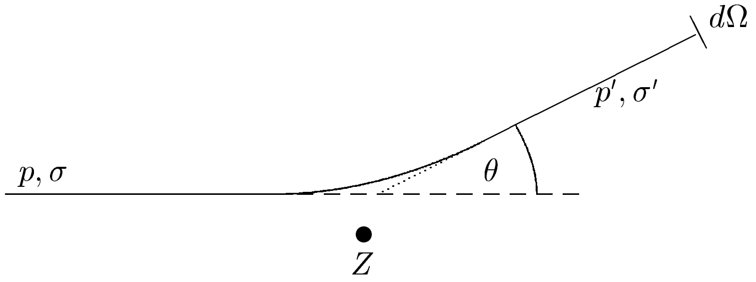


Abbildung 3: Streuung von Positronen an einem Kern der Kernladungszahl Z

Es gilt zu bedenken, daß Atomkerne durch die Elektronen der Hülle abgeschirmt erscheinen und deshalb das Potential in Wirklichkeit exponentiell abklingt. Für die Streuung mit niederenergetischen Elektronen kann man ein neutrales Atom in guter Näherung wie eine statische radialsymmetrische Ladungsverteilung behandeln, die zu einer potentiellen Energie der Form

$$eA_0(x) = -\frac{Z\alpha}{r}\, e^{-2\mu r} \tag{290}$$

Anlaß gibt mit

$$\mu = Z\alpha m = R^{-1} = Z/a_{\text{Bohr}}$$

Hier bezeichnet $a_{\text{Bohr}} = \alpha m$ den Bohrschen Radius und R den Radius des kleinsten Bohrschen Bahn in einem Atom der Kernladungszahl Z. Der Ansatz (290) beruht auf der Vorstellung, daß alle stationären Zustände ψ der Hüllenelektronen asymptotisch wie $e^{-\mu r}$ abfallen, mithin $|\psi|^2$ sich wie $e^{-2\mu r}$ verhält. Eine Anwendung des Satzes von Gauß auf (290) sagt uns, daß die Gesamtladung des Atoms gleich Null ist und daß der Atomkern weiterhin wie ein punktförmiges Gebilde mit der Ladung Ze behandelt wird.

Eine Ersetzung des Coulomb-Potentials durch das abgeschirmte Potential hat die Ersetzung $\boldsymbol{q}^2 \to \boldsymbol{q}^2 + 4\mu^2$ (und sonst nichts) zur Folge. Dies ergibt eine Korrektur des differentiellen Wirkungsquerschnittes:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2\alpha^2 m^2}{4(\boldsymbol{p}^2 \sin^2(\Theta/2) + \mu^2)^2}\, \frac{1 - \beta^2 \sin^2(\Theta/2)}{1 - \beta^2} \tag{291}$$

Hieraus folgt ein endlicher Ausdruck für den totalen Wirkungsquerschnitt σ. Gleichzeitig verschwindet die Singularität bei $\boldsymbol{p} = 0$, und wir erhalten:

$$\sigma_{\boldsymbol{p}=0} = \pi(Z\alpha m)^2\mu^{-4} = \pi\mu^{-2} = \pi R^2 \tag{292}$$

Die rechte Seite stellt gerade den Inhalt die Kreisfläche dar, die durch die kleinste Bohrsche Bahn umfahren wird. Das klassische Bild von Elektronen als Punktteilchen benutzend können wir sagen: Im Grenzfall verschwindender Energie der streuenden Elektronen wirkt ein neutrales Atom so, als ob ein Elektron genau dann gestreut wird, wenn es diese Kreisfläche trifft.

5 Die zweite Quantisierung

Die zweite Quantisierung ist das eigentliche Werkzeug der Feldtheorie und unverzichtbar für die moderne Teilchenphysik. Sie klassifiziert die Teilchen nach ihrer Statistik (Bose- oder Fermi-Statistik) und erlaubt die Beschreibung der Erzeugung und Vernichtung von Teilchen in einem Wechselwirkungsprozeß. Die mathematische Beschreibung geschieht am einfachsten durch die sog. *kanonischen Vertauschungsrelationen*, und wir beginnen hier mit der einfachsten Situation, der eines einzelnen Freiheitsgrades.

5.1 Bose-Teilchen (Bosonen)

5.1.1 Die kanonische Vertauschungsrelation (ein Freiheitsgrad)

Für einen Operator a und dem ihm zugeordneten adjungierten Operator $a^\dagger$ gelte die *kanonische Vertauschungsrelation*:

$$[a, a^\dagger] = 1 \tag{293}$$

Es ist dann leicht, eine Darstellung durch Oszillatorvariablen zu finden. Der harmonische Oszillator mit der Energie

$$H = \tfrac{1}{2}p^2 + \tfrac{1}{2}\omega^2 q^2$$

hat die klassische Frequenz ω, wenn p und q kanonisch konjugierte Variable sind. Quantenmechnisch bedeutet dies, daß die Heisenberg-Relation

$$[q, p] = i$$

erfüllt ist. Diese führt aber gerade dazu, daß die Operatoren

$$a = \sqrt{\tfrac{\omega}{2}}q + i\sqrt{\tfrac{1}{2\omega}}p, \qquad a^\dagger = \sqrt{\tfrac{\omega}{2}}q - i\sqrt{\tfrac{1}{2\omega}}p$$

die Relation (293) erfüllen. Die Energie erhält dann die Form

$$H = \tfrac{1}{2}\omega(a^\dagger a + aa^\dagger) = \omega(a^\dagger a + \tfrac{1}{2})$$

Der Hilbertraum $\mathcal{H}$, auf den die Operatoren wirken, läßt sich rein algebraisch konstruieren, indem man die Eigenzustände der Energie algebraisch charakterisiert und diese zu einer Basis von $\mathcal{H}$ erklärt. Man beginnt die Konstruktion mit dem Grundzustand Φ_0, der durch

$$a\Phi_0 = 0, \qquad \|\Phi_0\| = 1 \tag{294}$$

bis auf eine Phase festgelegt ist, und konstruiert die Anregungen des Oszillators durch

$$\Phi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^\dagger\right)^n \Phi_0, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{295}$$

Man zeigt leicht, daß die so konstruierten Zustände orthonomiert sind:

$$(\Phi_n, \Phi_m) = \delta_{nm}$$

Wir setzen voraus, daß $\mathcal{H}$ minimal ist in dem Sinne, daß das System der Zustände Φ_n vollständig ist, d.h. eine Basis darstellt.

Es gelten die Darstellungsrelationen:

$$a\Phi_n = \sqrt{n}\Phi_{n-1}, \qquad a^\dagger\Phi_n = \sqrt{n+1}\Phi_{n+1} \tag{296}$$

Aus ihnen folgen unmittelbar die Aussagen

$$a^\dagger a\Phi_n = n\Phi_n, \qquad aa^\dagger\Phi_n = (n+1)\Phi_n, \qquad H\Phi_n = E_n\Phi_n$$

mit $E_n = (n+\frac{1}{2})\omega$. Die durch (296) beschriebene Darstellung der kanonischen Vertauschungsrelation (293) ist *irreduzibel* auf dem Raum $\mathcal{H}$: Es gibt keinen echten Unterraum, der invariant unter der Wirkung von a und $a^\dagger$ wäre.

Der Hilbertraum erscheint hier als ein sehr abstraktes Gebilde. Man kann den Raum jedoch sehr konkret durch Funktionen beschreiben, indem man die bekannte Realisierung

$$(q\Phi)(x) = x\Phi, \qquad (p\Phi)(x) = \frac{1}{i}\frac{d}{dx}\Phi(x)$$

wählt, so daß

$$a = \sqrt{\frac{\omega}{2}}x + \sqrt{\frac{1}{2\omega}}\frac{d}{dx}, \qquad a^\dagger = \sqrt{\frac{\omega}{2}}x - \sqrt{\frac{1}{2\omega}}\frac{d}{dx}$$

Der Hilbertraum ist $L^2(\mathbb{R})$ (Raum der quadratintegrablen Funktionen Φ auf $\mathbb{R}$). Der Grundzustand ist darin eine Gauß-Funktion:

$$\Phi_0(x) = (\omega/\pi)^{1/4}e^{-\omega x^2/2}$$

Die anderen Basisfunktionen $\Phi_n(x)$ sind durch Hermite-Funktionen repräsentiert (also durch Hermite-Polynome$\times$Gauß-Funktion).

In allen Anwendungen der kanonischen Vertauschungsrelation (293) übernimmt der harmonische Oszillator nur die Rolle eines Analogmodells. Als Energie-Operator wählt man $H = \omega a^\dagger a$, also den Hamilton-Operator des Oszillators ohne die Nullpunktsenergie $\frac{1}{2}\omega$.

Der Vektor Φ_n beschreibt in konkreten Situationen einen Mehrteilchen-Zustand mit n Bose-Teilchen, alle in dem gleichen Einteilchen-Zustand. Die Natur des Einteilchen-Zustandes ist der jeweiligen Interpretation überlassen und in dem obigen Formalismus unsichtbar. Man sagt, das Bose-Teilchen habe in dieser reduzierten Beschreibung nur einen einzigen Freiheitsgrad.

Der Operator $a^\dagger$ heißt *Erzeugungsoperator*, da er die Zahl der Teilchen in einem Zustand um eins erhöht. Entsprechend heißt a *Vernichtungsoperator*, da er die Teilchenzahl um eins erniedrigt. Man nennt $N = a^\dagger a$ den Teilchenzahloperator, da sein Spektrum mit den möglichen Teilchenzahlen übereinstimmt. Der Grundzustand Φ_0, in dem kein Teilchen vorhanden ist, wird kurz das *Vakuum* genannt. Man schreibt hierfür auch Ω oder $|0\rangle$. Der Hilbertraum realisiert die einfachste Version eines *Fockraumes* für ein Bose-Teilchen.

In der statistischen Quantenphysik begegnet man der Zustandssumme

$$Z(\omega) = \operatorname{Spur} e^{-\beta H} = \sum_{n=0}^{\infty}(\Phi_n, e^{-\beta H}\Phi_n) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\omega n} = \frac{1}{1-e^{-\beta\omega}} \tag{297}$$

Bei Strahlungsproblemen wäre ω die Frequenz eines Photons.

5.1.2 Die kanonischen Vertauschungrelationen (viele Freiheitsgrade)

Im allgemeinen ist die Zahl der linear unabhängigen Einteilchen-Zustände abzählbar unendlich. Jedem Basiszustand entspricht dann einem Freiheitsgrad des Systems, den wir durch den Index $i \in \mathbb{N}$ kennzeichnen. Die kanonischen Vertauschungsrelationen lauten in diesem Fall:

$$[a_i, a_k^\dagger] = \delta_{ik} \;, \qquad [a_i, a_k] = [a_i^\dagger, a_k^\dagger] = 0 \tag{298}$$

$(i, k = 1, 2, 3, \ldots)$. Mehrteilchenzustände liegen im Fockraum, den wir rein algebraisch konstruieren. Die Konstruktion beginnt mit der Charakterisierung des Vakuums $|0\rangle$:

$$a_i|0\rangle = 0, \qquad \langle 0|0\rangle = 1 \tag{299}$$

aus dem Zustände mit den Besetzungszahlen n_i konstruiert werden:

$$|n_1 n_2 \ldots n_k\rangle = (n_1! n_2! \cdots n_k!)^{-1/2} a_1^{\dagger\, n_1} a_2^{\dagger\, n_2} \cdots a_k^{\dagger\, n_k} |0\rangle \tag{300}$$

Sie sind normiert und orthogonal („orthonormiert“): Dies folgt aus den kanonischen Vertauschungsrelationen (298). Die Zustände $|n_1 n_2 \ldots n_k\rangle$ bilden definitionsgemäß eine Basis für den Fockraum eines Teilchens mit Bose-Statistik. Wir sehen auf diese Weise, daß jede Basis des Einteilchen-Raumes in kanonischer Weise zu einer Basis des Fockraumes führt. Als Teilchenzahl bezeichnet man den Operator

$$N = \sum_i a_i^\dagger a_i$$

mit der Eigenschaft

$$N|n_1 n_2 \ldots n_k\rangle = (n_1 + n_2 + \cdots n_k)|n_1 n_2 \ldots n_k\rangle$$

Kann man dem Freiheitsgrad i einen Energie-Eigenwert ω_i zuordnen, so kann man den Energie-Operator auf dem Fockraum unmittelbar angeben:

$$H = \sum_i \omega_i a_i^\dagger a_i$$

Man rechtfertigt dies durch den Nachweis, daß

$$H|n_1 n_2 \ldots n_k\rangle = (n_1\omega_1 + n_2\omega_2 + \cdots n_k\omega_k)|n_1 n_2 \ldots n_k\rangle$$

gilt. Insbesondere erhält das Vakuum die Energie Null.

Die Zustandssumme errechnet man wie folgt:

$$Z = \mathrm{Spur}\, e^{-\beta H} = \lim_{k\to\infty} \langle n_1 n_2 \ldots n_k | e^{-\beta H} | n_1 n_2 \ldots n_k \rangle = \prod_{i=1}^{\infty} Z(\omega_i) \tag{301}$$

wobei $Z(\omega)$ durch (297) gegeben ist. Streben die Energien ω_i für $i \to \infty$ rasch gegen $+\infty$, so existiert das unendliche Produkt. Man schreibt dann $Z = e^{-\beta F}$ und nennt F die *freie Energie*. Wir erhalten

$$F = \beta^{-1} \sum_{i=1}^{\infty} \log(1 - e^{-\beta\omega_i}) \tag{302}$$

Als *innere Energie U* bezeichnet man den Erwartungswert des Energie-Operators in dem kanonischen Ensemble:

$$U = \langle H \rangle = \frac{\mathrm{Spur}\, H e^{-\beta H}}{\mathrm{Spur}\, e^{-\beta H}}$$

Sie läßt sich aus der freien Energie berechnen:

$$U = \frac{d}{d\beta}(\beta F) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\omega_i}{e^{\beta\omega_i} - 1} \tag{303}$$

Diese Formel hat nun eine unmittelbare Anwendung auf das freie Photongas (Hohlraumstrahlung). In einem endlichen Volumen $V \subset \mathbb{R}^3$ ist das Energiespektrum diskret. Im thermodynamischen Limes, d.h. für $V \to \mathbb{R}^3$, wird es dagegen kontinuierlich in einer solchen Weise, daß für jede Funktion $f(\omega)$ (hinreichend glatt und rasch abfallend) gilt

$$\lim_{V\to\mathbb{R}^3} \frac{1}{|V|} \sum_i f(\omega_i) = 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, f(|\boldsymbol{k}|) = \frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty \omega^2 d\omega\, f(\omega) \tag{304}$$

Hier bezeichnet $\boldsymbol{k}$ den Impuls eines Photons und $\omega = |\boldsymbol{k}|$ seine Energie. Der Faktor 2 vor dem Integral berücksichtigt die beiden Polarisationszustände des Photons bei gegebenem Impuls. Die Vorschrift (304) führt dazu, daß die innere Energie pro Volumen einen Limes in Form eines Integrals besitzt, das man auswerten kann:

$$\lim_{V\to\mathbb{R}^3} \frac{U}{|V|} = \int_0^\infty d\omega\, u(\omega) = \frac{\pi^2}{15}\beta^{-4} \tag{305}$$

Hierin bezeichnet $u(\omega)$ die Spektraldichte, gegeben durch

$$u(\omega) = \frac{\pi^{-2}\omega^3}{e^{\beta\omega} - 1} \tag{306}$$

(Plancksche Strahlungsformel). Mit der Messung der Spektraldichte der Hohlraumstrahlung oder auch der Schwarzkörperstrahlung wurde bestätigt, daß Photonen der Bose-Statistik unterworfen sind.

5.1.3 Eine basisfreie Formulierung

Es soll nun eine Formulierung der kanonischen Vertauschungsrelationen vorgestellt werden, die ohne die Wahl einer Basis für den Einteilchenraum $\mathcal{H}$ auskommt. Die Grundannahme hierbei ist, daß für jeden Zustand $\phi \in \mathcal{H}$ Operatoren $a(\phi)$ und $a^\dagger(\phi)$ existieren, die zueinander adjungiert sind. Sie sollen die Relationen

$$[a(\phi), a^\dagger(\phi')] = (\phi, \phi'), \qquad [a(\phi), a(\phi')] = [a^\dagger(\phi), a^\dagger(\phi')] = 0 \tag{307}$$

erfüllen, für deren Formulierung die Kenntnis des Skalarproduktes in $\mathcal{H}$ genügt. Die Operatoren sollen den folgenden zusätzlichen Forderungen gehorchen:

- Die Abbildung $\phi \mapsto a^\dagger(\phi)$ ist *linear*.

- Die Abbildung $\phi \mapsto a(\phi)$ ist *antilinear*[2].

Anschaulich: Der Operator $a^\dagger(\phi)$ erzeugt ein Teilchen mit dem Zustand ϕ, der Operator $a(\phi)$ vernichtet ein Teilchen. Der Zusammenhang mit der Beschreibung im vorigen Abschnitt ist dann wie folgt. Sei $\{\phi_i,\ i = 1, 2, 3, \ldots\}$ eine Basis in $\mathcal{H}$ und $a_i = a(\phi_i)$ sowie $a_i^\dagger = a^\dagger(\phi_i)$, so folgen aus der Entwicklung eines beliebigen Zustandes

$$\phi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2 + c_3\phi_3 + \cdots \qquad (c_i \in \mathbb{C})$$

die Relationen (298) und

$$\begin{aligned} a(\phi) &= \bar{c}_1 a_1 + \bar{c}_2 a_2 + \bar{c}_3 a_3 + \cdots \\ a^\dagger(\phi) &= c_1 a_1^\dagger + c_2 a_2^\dagger + c_3 a_3^\dagger + \cdots \end{aligned}$$

Auch hier verlangen wir die Existenz des Vakuumzustandes $|0\rangle$, d.h. für alle $\phi \in \mathcal{H}$ soll gelten

$$a(\phi)|0\rangle = 0, \qquad \langle 0|0\rangle = 1. \tag{308}$$

Zustände mit n Teilchen entstehen durch Anwendung der Erzeugungsoperatoren auf das Vakuum:

$$|\phi_1\phi_2\ldots\phi_n\rangle = a^\dagger(\phi_1)a^\dagger(\phi_2)\cdots a^\dagger(\phi_n)|0\rangle \tag{309}$$

Solche Zustände sind nicht normiert. Vielmehr gilt

$$\langle \phi_1\phi_2\ldots\phi_n|\phi_1\phi_2\ldots\phi_n\rangle = \mathrm{Perm}\,(\phi_i, \phi_k) \tag{310}$$

Als *Permanente* einer $n \times n$-Matrix $A = (a_{ik})$ bezeichnet man den Ausdruck

$$\mathrm{Perm}\,A = \sum_\pi a_{1\pi(1)}a_{2\pi(2)}\cdots a_{n\pi(n)}$$

wobei über alle Permutationen π der Zahlen $1, 2, \ldots, n$ summiert wird (in Analogie zur Konstruktion der Determinante). Die Formel (310) folgt allein aus den kanonischen Vertauschungsrelationen und den definierenden Eigenschaften des Vakuums. Der Beweis geschieht durch Induktion nach n.

Die so eingeführten Mehrteilchenzustände sind *symmetrisch* unter der Vertauschung der Einteilchenzustände ϕ_i. Diese Eigenschaft ist charakteristisch für die Bose-Statistik identischer Teilchen. Der Raum aller Zustände dieser Art – konstruiert über dem Einteilchenraum $\mathcal{H}$ – heißt der *Fockraum über* $\mathcal{H}$ und wird mit $F_+(\mathcal{H})$ bezeichnet. Der Index $+$ weist darauf hin, daß die Zustände darin symmetrisch sind.

Konkreter wird die Beschreibung, wenn wir annehmen, daß es sich bei $\mathcal{H}$ um den Einteilchenraum eines skalaren Teilchens handelt, eines Teilchens also ohne Spin, beschrieben durch die Klein-Gordon-Gleichung. In diesem Fall lautet das Skalarprodukt:

$$(\phi, \phi') = \int \frac{d^3p}{2E}\,\overline{\phi(p)}\phi'(p) \tag{311}$$

[2]Es gilt $a(\lambda\phi + \lambda'\phi') = \bar{\lambda}a(\phi) + \bar{\lambda}'a(\phi')$ für $\lambda, \lambda' \in \mathbb{C}$.

Man schreibt demgemäß (allerdings rein formal):

$$a(\phi) = \int \frac{d^3p}{2E}\,\overline{\phi(p)}a(p) \tag{312}$$

$$a^\dagger(\phi) = \int \frac{d^3p}{2E}\,a^\dagger(p)\phi(p) \tag{313}$$

mit

$$[a(p), a^\dagger(p')] = 2E\delta^3(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}'), \qquad [a(p), a(p')] = [a^\dagger(p), a^\dagger(p')] = 0 \tag{314}$$

Man kann $a^\dagger(p)$ als einen Operator ansehen, der ebene Wellen mit dem Impuls $p = \{E, \boldsymbol{p}\}$ erzeugt: $a^\dagger(p)|0\rangle = |p\rangle$. Solche Zustände haben dann die übliche Normierung:

$$\langle p|p'\rangle = 2E\delta^3(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}')$$

Auf dem Fockraum $F_+(\mathcal{H})$ läßt sich der Energie-Impuls-Operator P^μ entweder durch das formale Integral

$$P^\mu = \int \frac{d^3p}{2E}\,p^\mu a^\dagger(p)a(p) \tag{315}$$

einführen, oder äquivalent durch die Relationen

$$[a(p), P^\mu] = p^\mu a(p), \qquad [P^\mu, a^\dagger(p)] = p^\mu a^\dagger(p), \qquad P^\mu|0\rangle = 0. \tag{316}$$

5.1.4 Die Quantisierung des Skalarfeldes

Es sei $\Phi(x)$ ein reelles Skalarfeld, das der Klein-Gordon-Gleichung $(\Box + m^2)\Phi(x) = 0$ genügt. Als klassische Feldtheorie betrachtet, handelt es sich hierbei um ein dynamisches System mit unendlich vielen Freiheitsgraden. Für eine solche Auffassung wird es notwendig, die Gleichbehandlung von Raum und Zeit aufzugeben und $\Phi(t, \boldsymbol{x})$ zu schreiben. Gewissermaßen tritt die kontinuierliche Variable $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3$ an die Stelle eines Index i, mit dem man in gewöhnlichen mechanischen Systemen die Freiheitsgrade durchnumeriert.

Wir können eine Lagrange-Funktion

$$L = \int d^3x\,\mathcal{L}(\Phi(x), \partial\Phi(x))$$

angeben, so daß die Feldgleichung – in unserem Fall die KG-Gleichung – mit der Euler-Lagrangeschen Gleichung des Variationsproblems

$$\int dt\,L = \text{stationär}$$

(siehe Hamiltonsches Prinzip der Mechanik) übereinstimmt. Man bezeichnet $\mathcal{L}$ als die *Lagrange-Dichte* und $W = \int d^4x\,\mathcal{L} = \int dt\,L$ als die *Wirkung*. Wir setzen

$$\mathcal{L} = \tfrac{1}{2}(\partial\Phi)^2 - \tfrac{1}{2}m^2\Phi^2 \tag{317}$$

und fassen das Integral $L = \int d^3x\,\mathcal{L}$ als ein Funktional auf von $\Phi(t,\cdot)$ und $\dot\Phi(t,\cdot)$ bei festem $t = x^0$. Funktionalableitungen von L berechnet man nach den üblichen Regeln. Zu diesen Regeln gehört:

$$\frac{\delta}{\delta\Phi(t,\boldsymbol{y})}\int d^3x\,\tfrac{1}{2}[\nabla\Phi(t,\boldsymbol{x})]^2 = -\Delta\Phi(t,\boldsymbol{y}).$$

Insbesondere erhalten wir den kanonisch konjugierten Impuls zu den Feldvariablen $\Phi(t,\boldsymbol{x})$, $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^3$, als

$$\pi(t,\boldsymbol{x})=\frac{\delta L}{\delta\dot\Phi(t,\boldsymbol{x})}=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial[\dot\Phi(x)]}=\dot\Phi(x) \tag{318}$$

und die Lagrangeschen Gleichungen

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\delta L}{\delta\dot\Phi(t,\boldsymbol{x})}-\frac{\delta L}{\delta\Phi(t,\boldsymbol{x})}=0$$

sind in der Tat mit der Klein-Gordon-Gleichung identisch:

$$\frac{\partial}{\partial t}\dot\Phi(x)-(\Delta+m^2)\Phi(x)=0.$$

Indem wir das freie Feld wie ein mechanisches System behandeln, können wir es nach den Vorschriften der Quantenmechanik quantisieren:

$$[\Phi(t,\boldsymbol{x}),\pi(t,\boldsymbol{x}')]=i\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'). \tag{319}$$

Dies geschieht zu einer festen Zeit, etwa $t=0$, und wird ergänzt durch

$$[\Phi(t,\boldsymbol{x}),\Phi(t,\boldsymbol{x}')]=[\pi(t,\boldsymbol{x}),\pi(t,\boldsymbol{x}')]=0.$$

Wir gelangen so zu den kanonischen Vertauschungsrelationen (im Ortsraum):

$$[\Phi(x),\dot\Phi(x')]_{t=t'}=i\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \tag{320}$$

$$[\Phi(x),\Phi(x')]_{t=t'}=[\dot\Phi(x),\dot\Phi(x')]_{t=t'}=0 \tag{321}$$

Ist das klassische Feld reell, so ist das quantisierte Feld hermitesch. Die Fourier-Zerlegung nimmt so die Form an:

Es ist nun ohne weiteres möglich, die Fourier-Amplituden durch Φ und $\dot\Phi$ bei $t=0$ auszudrücken:

$$\begin{aligned}
a(p) &= (2\pi)^{-3/2}\int d^3x\, e^{-i\boldsymbol{px}}\Big\{E\Phi(x)+i\dot\Phi(x)\Big\}_{t=0}\\
a^\dagger(p) &= (2\pi)^{-3/2}\int d^3x\, e^{i\boldsymbol{px}}\Big\{E\Phi(x)-i\dot\Phi(x)\Big\}_{t=0}
\end{aligned}$$

so daß aus den kanonischen VR im Ortsraum die kanonischen VR im Impulsraum folgen. Diese sind mit den im vorigen Abschnitt diskutierten VR der Operatoren $a(p)$ und $a^\dagger(p)$ identisch. Man erkennt: Der Formalismus der zweiten Quantisierung, der zur Konstruktion des Fockraumes führt, ist äquivalent der kanonischen Quantisierung einer Feldtheorie (freier Felder) im Ortsraum.

Die Analogie mit einem mechanischen System läßt sich fortsetzen. Durch eine Legendre-Transformation gelangen wir von der Lagrange-Funktion L zu der Hamilton-Funktion H:

$$H=\int d^3x\,\pi\dot\Phi-L=\int d^3x\,\tfrac{1}{2}[\pi^2+(\nabla\Phi)^2+m^2\Phi^2] \tag{322}$$

Klassisch ist H ein Funktional von $\pi(t,\cdot)$ und $\Phi(t,\cdot)$, quantenmechanisch jedoch ein bestimmter Operator, für den wir den Ausdruck

$$H = \int \frac{d^3p}{2E}\, E\tfrac{1}{2}[a^\dagger(p)a(p) + a(p)a^\dagger(p)] = \int \frac{d^3p}{2E}\, E[a^\dagger(p)a(p) + E\delta^3(0)] \tag{323}$$

erhalten. Er unterscheidet sich von dem gewünschten Ausdruck (siehe (310))

$$H = \int \frac{d^3p}{2E}\, Ea^\dagger(p)a(p) \tag{324}$$

um die „Nullpunktsenergie“ oder „Vakuumenergie“

$$E_0 = \tfrac{1}{2}\delta^3(0) \int d^3p\, E$$

Sie ist aus zwei Gründen divergent:

1. Der Ortsraum ist unendlich: $\delta^3(0) = (2\pi)^{-3}\int d^3x$.

2. Der Impulsraum ist unendlich, d.h. es existiert keine obere Schranke für die Einteilchen-Energie.

Für einen endlichen Phasenraum Ω würde gelten:

$$E_0 = \tfrac{1}{2}\int_\Omega \frac{d^3x d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\, E \;<\; \infty$$

Ist die Größe des Phasenraumes in einem Experiment veränderlich, so kann die Vakuumenergie beobachtbar werden (Casimir-Effekt). Ist der Phasenraum in keiner Richtung beschränkt, so betrachten wir die Vakuumenergie als unbeobachtbar; sie wird dann einfach ignoriert, wie in (324) geschehen. In eine anderen Sprechweise wurde H durch die Forderung *renormiert*, daß das Vakuum die Energie Null bekommt.

Der Schritt von (323) nach (324) entspricht einer formalen Vorschrift, genannt *Wick-Ordnung*: Man ersetze (im Bose-Fall) Ausdrücke der Art $aa^\dagger$ grundsätzlich durch $a^\dagger a$.

Es bleibt zu prüfen, welche Änderungen eintreten, wenn wir von einem *komplexen* Skalarfeld $\Phi(x)$ ausgehen. Dies läßt sich im Prinzip auf die vorige Situation zurückführen durch Zerlegung nach Real- und Imaginärteil:

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\Phi_1(x) + i\Phi_2(x)\Big)$$

Indem wir schreiben

$$\begin{aligned} a(p) &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\Big(a_1(p) + ia_2(p)\Big) \qquad & b(p) &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\Big(a_1(p) - ia_2(p)\Big) \\ a^\dagger(p) &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\Big(a_1^\dagger(p) - ia_2^\dagger(p)\Big) \qquad & b^\dagger(p) &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\Big(a_1^\dagger(p) + ia_2^\dagger(p)\Big), \end{aligned}$$

gilt

$$[a(p), a^\dagger(p')] = [b(p), b^\dagger(p')] = 2E\delta^3(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}') \tag{325}$$

Alle anderen VR der Operatoren $a, a^\dagger, b, b^\dagger$ verschwinden.

Die Fourier-Zerlegung folgt unmittelbar:

$$\Phi(x) = (2\pi)^{-3/2} \int \frac{d^3p}{2E} \left\{ e^{-ipx} a(p) + e^{ipx} b^\dagger(p) \right\} \tag{326}$$

Ein komplexes Skalarfeld beschreibt – nach Quantisierung – zwei Sorten von Teilchen gleicher Masse und gleichem Spin (hier $s = 0$):

- $a^\dagger(p)$ erzeugt ein Teilchen mit dem Impuls p.
- $b^\dagger(p)$ erzeugt ein Antiteilchen mit dem Impuls p.

Wir überprüfen den Ausdruck für die Energie

$$H = \int d^3x \, [\dot\Phi^* \dot\Phi + (\nabla\Phi)^* \cdot \nabla\Phi + m^2 \Phi^* \Phi]$$

wobei wir bereits eine bestimmte Reihenfolge der Faktoren gewählt haben, die gewährleistet, daß H hermitesch ist. Aus dieser Reihenfolge ergibt sich:

$$H = \int \frac{d^3p}{2E} E \Big(a^\dagger(p) a(p) + b(p) b^\dagger(p) \Big) \tag{327}$$

Erst durch Wick-Ordnung bekommt man einen Energie-Operator mit dem korrekten Spektrum:

$$H = \int \frac{d^3p}{2E} E \Big(a^\dagger(p) a(p) + b^\dagger(p) b(p) \Big) \tag{328}$$

Wir überprüfen auch den Operator für die Ladung (siehe (52), wir messen Ladung in Einheiten von e oder $-e$):

$$Q = \int d^3x \, j^0(x), \qquad j^0 = i(\Phi^* \dot\Phi - \dot\Phi^* \Phi) \tag{329}$$

Auf die Reihenfolge der Feldoperatoren ist auch hier zu achten, damit j^0 ein hermitescher Ausdruck wird. Es folgt

$$Q = \int \frac{d^3p}{2E} \Big(a^\dagger(p) a(p) - b(p) b^\dagger(p) \Big) \tag{330}$$

Auch hier läßt sich durch Anwendung der Wick-Ordnung ein günstigeres Verhalten erzielen:

$$Q = \int \frac{d^3p}{2E} \Big(a^\dagger(p) a(p) - b^\dagger(p) b(p) \Big) = N - \bar N \tag{331}$$

Die Operatoren

$$N = \int \frac{d^3p}{2E} \, a^\dagger(p) a(p), \qquad \bar N = \int \frac{d^3p}{2E} \, b^\dagger(p) b(p) \tag{332}$$

zählen Teilchen bzw. Antiteilchen, die erwartungsgemäß die entgegengesetzte Ladung tragen. Das Spektrum von Q besteht aus allen ganzen Zahlen: $\mathrm{spec}(Q) = \mathbb{Z}$.

Bose-Statistik verlangt *Kommutatoren* in den Grundgleichungen, die die Eigenschaften von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren festlegen, Fermi-Statistik verlangt im Gegensatz dazu *Antikommutatoren*. Wollten wir das Skalarfeld nach den Regeln der Fermi-Statistik quantisieren, so erhalten wir unsinnige Ergebnisse, wie die Ausdrücke (322) und (325) für H und Q zeigen. Dies ist ein erster Hinweis auf das Spin-Statistik-Theorem: Teilchen mit ganzzahligen Spin sind Bosonen.

5.2 Fermi-Teilchen (Fermionen)

5.2.1 Die kanonische Antivertauschungsrelation (ein Freiheitsgrad)

Angenommen, für einen Operator a und den ihm zugeordneten adjungierten Operator $a^\dagger$ gelten die kanonischen Antivertauschungsrelationen (AVR)

$$\{a, a^\dagger\} = 1, \qquad \{a, a\} = \{a^\dagger, a^\dagger\} = 0 \tag{333}$$

äquivalent mit

$$aa^\dagger + a^\dagger a = 1, \qquad a^2 = {a^\dagger}^2 = 0$$

Darüberhinaus möge die Energie durch $H = \omega a^\dagger a$ dargestellt sein. Es existiert ein denkbar einfache Darstellung der AVR durch 2×2-Matrizen:

$$a = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad a^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

so daß

$$a^\dagger a = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad aa^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

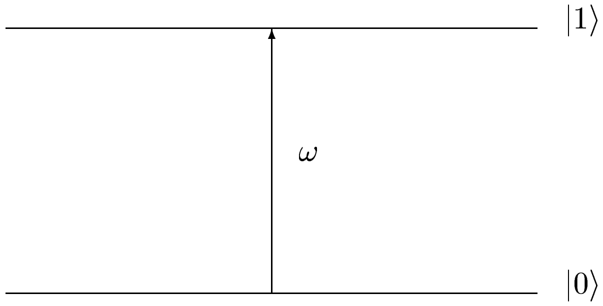
Die gleiche Darstellung kann durch Pauli-Matrizen beschrieben werden:

$$a = \tfrac{1}{2}(\sigma_1 + i\sigma_2), \qquad a^\dagger = \tfrac{1}{2}(\sigma_1 - i\sigma_2)$$

Der Grundzustand (Vakuum) ist auch hier durch die Bedingung $a|0\rangle = 0$ charakterisiert. Er ist durch einen Spinor gegeben, ebenso wie der Einteilchenzustand $|1\rangle = a^\dagger|0\rangle$:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Diese beiden Zustände bilden bereits eine Basis. Mit anderen Worten: Der Hilbertraum (= Darstellungsraum der Operatoren a und $a^\dagger$) ist zweidimensional. Er wird allgemein mit $\mathbb{C}^2$ bezeichnet. Gewissermaßen hat das Fermion darin nur einen Freiheitsgrad, der entweder besetzt oder unbesetzt sein kann. Mehrfache Besetzung ist nicht möglich ($\rightarrow$ Paulisches Ausschließungsprinzip); denn es gilt $(a^\dagger)^2 = 0$. Der mathematische Formalismus ähnelt somit dem eines Zwei-Niveau-Systems, bei dem die Niveaus durch eine Energie ω getrennt sind:



Da diese Situation sehr häufig in der Physik anzutreffen ist (Spin im Magnetfeld, Laser, Gitterfehlstelle etc.), ist es verständlich, daß die kanonischen AVR in sehr unterschiedlichen Situationen eine Rolle spielen.

Da es nur zwei unabhängige Zustände gibt, ist die Zustandssumme für einen Freiheitsgrad sehr einfach zu berechnen:

$$Z(\omega) = \mathrm{Spur}\, e^{-\beta H} = \sum_{n=0}^{1} \langle n|e^{-\beta H}|n\rangle = 1 + e^{-\beta\omega} \tag{334}$$

5.2.2 Die kanonischen Antivertauschungsrelationen (viele Freiheitsgrade)

Wir gehen nun über zu dem Fall, bei dem die Zahl der Freiheitsgrade abzählbar unendlich ist, und schreiben die kanonischen AVR in der Form

$$\{a_i, a_k^\dagger\} = \delta_{ik}, \qquad \{a_i, a_k\} = \{a_i^\dagger, a_k^\dagger\} = 0 \tag{335}$$

$(i, k = 1, 2, 3, \ldots)$. Der Vakuumzustand ist wie üblich durch

$$a_i|0\rangle = 0, \qquad \langle 0|0\rangle = 1$$

charakterisiert. Mehrteilchenzustände werden durch die Anwendung der Erzeugungsoperatoren $a_i^\dagger$ konstruiert:

$$|n_1 n_2 \ldots n_k\rangle = a_1^{\dagger\, n_1} a_2^{\dagger\, n_2} \cdots a_k^{\dagger\, n_k}|0\rangle \qquad (n_i = 0, 1 \text{ und } k = 1, 2, 3, \ldots) \tag{336}$$

Diese Zustände sind orthonormiert und bilden eine Basis im Fockraum mit Fermi-Statistik: Jeder Freiheitsgrad (Index i) kann höchstens einfach besetzt sein; denn es gilt $(a_i^\dagger)^2 = 0$ als Folge der kanonischen AVR. Wäre die Zahl der Freiheitsgrade endlich, sagen wir $i = 1, \ldots, n$, so hätte der Fockraum eine endliche Dimension $d = 2^n$ und könnte mit

$$\mathbb{C}^d = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{C}^2 \qquad (n \text{ Faktoren})$$

identifiziert werden.

Als *Teilchenzahl* bezeichnet man den Operator

$$N = \sum_i a_i^\dagger a_i \tag{337}$$

mit der Eigenschaft

$$N|n_1 n_2 \ldots n_k\rangle = (n_1 + n_2 + \cdots n_k)|n_1 n_2 \ldots n_k\rangle \qquad (k = 1, 2, 3, \ldots)$$

Wir nehmen nun an, jedem Freiheitsgrad i sei ein Eigenwert ω_i zugeordnet. Dann ist es möglich, den Energie-Operator auf dem Fockraum als

$$H = \sum_i \omega_i a_i^\dagger a_i \tag{338}$$

zu schreiben. Die Zustandssumme errechnet sich daraus wie folgt:

$$Z = \mathrm{Spur}\, e^{-\beta H} = \prod_{i=1}^{\infty} Z(\omega_i) \tag{339}$$

unter Benutzung von (334). Für die Konvergenz des Produktes ist es wiederum notwenig, daß die Energien ω_i für $i \to \infty$ rasch gegen $+\infty$ streben.

Die freie Energie erhalten wir als

$$F = -\beta^{-1} \log Z = -\beta^{-1} \sum_{i=1}^{\infty} \log \left(1 + e^{-\beta\omega_i}\right)$$

um daraus die innere Energie zu berechnen:

$$U = \frac{d}{d\beta}(\beta F) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\omega_i}{e^{\beta\omega_i} + 1} \tag{340}$$

Die innere Energie U für Fermionen unterscheidet sich von dem entsprechenden Ausdruck (298) für Bosonen lediglich um ein Vorzeichen.

Das großkanonische Ensemble benutzt die Teilchenzahl N und das chemische Potential N als ein neues Paar konjugierter Variablen. Die Ersetzung $H \to H - \mu N$ führt auf die großkanonische Zustandssumme und einem thermodynamischen Potential[3] K:

$$Z = \text{Spur}\, e^{-\beta(H-\mu N)} = e^{-\beta K}$$

Die innere Energie $U = \langle H \rangle$ und die mittlere Teilchenzahl $\langle N \rangle$ ergeben sich durch partielle Ableitungen: Ableitungen:

$$\langle U \rangle - \mu \langle N \rangle = \frac{\partial}{\partial\beta}(\beta K), \qquad \langle N \rangle = -\frac{\partial}{\partial\mu} K$$

Man erhält so die Ergebnisse

$$U = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\omega_i}{e^{\beta(\omega_i - \mu)} + 1}, \qquad \langle N \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\omega_i - \mu)} + 1} \tag{341}$$

Die Formeln haben eine Anwendung in der Theorie des freien Elektronengases (nichtrelativistisch im Metall, relativistisch in einem Plasma oder in der Sternmaterie). Für die relativistische Energie-Impuls-Relation $E = \sqrt{m^2 + \boldsymbol{p}^2}$ finden wir im thermodynamischen Limes die Energiedichte

$$\lim_{V \to \mathbb{R}^3} \frac{U}{|V|} = 2 \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{E}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} = \frac{1}{\pi^2} \int_m^{\infty} dE\, \frac{E^2 \sqrt{E^2 - m^2}}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} \tag{342}$$

Der Faktor 2 vor dem Integral berücksichtigt die zwei Freiheitsgrade des Elektronenspins.

5.2.3 Der Dirac-See

Die kanonischen AVR haben eine bemerkenswerte Symmetrie: Vertauscht man darin a_i mit $a_i^\dagger$, so bleiben die Relationen der Form nach erhalten. Dies legt nahe, einen Zustand $|\bar{0}\rangle$ zu suchen – wir wollen ihn das Antivakuum nennen – , für den gilt:

$$a_i^\dagger |\bar{0}\rangle = 0, \qquad \langle \bar{0} | \bar{0} \rangle = 1 \tag{343}$$

[3] Das Potential K ist verschieden von der freien Energie. Es trägt keinen besonderen Namen. Der Zusammenhang ist durch $K = F - \mu\langle N \rangle$ gegeben.

Offenbar bedeuten diese Forderungen gerade, daß jeder Freiheitsgrad i bereits besetzt ist. Formal:

$$|\bar{0}\rangle = |11111\ldots\rangle \tag{344}$$

Macht diese Schreibweise einen Sinn? Hierzu muß man zwei Situationen unterscheiden:

1. Die Zahl der Freiheitsgrade ist endlich. In $|11111\ldots\rangle$ steht eine endliche Zahl von Einsen, und das Antivakuum liegt im Fockraum, konstruiert über dem Vakuum. Das Antivakuum definiert zwar eine neue Darstellung der kanonischen AVR. Sie ist jedoch der Vakuum-Darstellung *äquivalent*.

2. Die Zahl der Freiheitsgrade ist unendlich. Der Zustand $|11111\ldots\rangle$ mit n Einsen konvergiert nicht für $n \to \infty$ als Vektor im Fockraum, der das Vakuum enthält; denn ein solcher Limesvektor wäre orthogonal zu allen Basisvektoren $|n_1 n_2 \ldots n_k\rangle$ $(k = 0, 1, 2, \ldots)$, was unmöglich ist. In diesem Fall definiert das Antivakuum eine völlig neue Darstellung der kanonischen AVR. Wir bezeichnen sie als "neu", weil sie *inäquivalent* zur Vakuum-Darstellung ist.

Dirac machte zuerst Gebrauch vom Antivakuum. Deshalb nennt man diesen Zustand auch den *Dirac-See*. Zum Antivakuum gehört der Anti-Fockraum. Eine Basis darin konstruiert man, indem man Teilchen aus dem Dirac-See entfernt:

$$|\overline{n_1 n_2 \ldots n_k}\rangle = a_1^{n_1} a_2^{n_2} \cdots a_k^{n_k} |\bar{0}\rangle \qquad (n_i = 0, 1) \tag{345}$$

Solche Zustände, die „Löcher" im vollbesetzten Dirac-See beschreiben, benehmen sich wieder wie Teilchen. Im Anti-Fockraum gilt:

- a_i erzeugt ein Loch mit dem Freiheitsgrad i.
- $a_i^\dagger$ vernichtet ein Loch mit dem Freiheitsgrad i.

Die Zahl der Löcher $(0, -1, -2, -3, \ldots)$ zählt der Operator

$$\bar{N} = -\sum_i a_i a_i^\dagger$$

Er unterscheidet sich von der Teilchenzahl $N = \sum_i a_i^\dagger a_i$ um eine Konstante, nämlich um die (i.allg. divergente) Summe $\sum_i 1$ (= Zahl der Freiheitsgrade). Dies sagt, wie zu erwarten, daß N und $\bar{N}$ nicht auf dem gleichen Hilbertraum operieren, wenn die Zahl der Freiheitsgrade unendlich ist.

Die Energie $\bar{H}$ muß für Löcher ebenfalls neu definiert werden. Sie erhält dadurch ein anderes Vorzeichen. Aus dem positiven Ausdruck $H = \sum_i \omega_i a_i^\dagger a_i$ wird durch Anwendung der kanonischen AVR

$$H = \bar{H} + \sum_i \omega_i, \qquad \bar{H} = -\sum_i \omega_i a_i a_i^\dagger$$

Auch hier unterscheiden sich H und $\bar{H}$ um eine Konstante, nämlich um die (i.allg. divergente) Summe $\sum_i \omega_i$.

Ähnliche Aussagen gelten für andere Observable (Impuls, Drehimpuls, Ladung etc.). Ob man in einer konkreten Situation die Vakuum-Darstellung oder der Antivakuum-Darstellung der kanonischen AVR wählt, hängt von dem angestrebten Energie-Spektrum ab: Gilt $H \leq 0$ bei Wahl der Vakuum-Darstellung, so gilt $\bar{H} \geq 0$ in der Antivakuum-Darstellung und umgekehrt.

5.2.4 Eine basisfreie Beschreibung

Die Formulierung der kanonischen AVR, die ohne die Wahl einer Basis im Einteilchenraum $\mathcal{H}$ auskommt, nimmt an, daß für jeden Vektor $\phi \in \mathcal{H}$ Operatoren $a(\phi)$ und $a^\dagger(\phi)$ existieren mit den Relationen

$$\{a(\phi), a^\dagger(\phi')\} = (\phi, \phi'), \qquad \{a(\phi), a(\phi')\} = \{a^\dagger(\phi), a^\dagger(\phi')\} = 0, \tag{346}$$

für deren Formulierung die Kenntnis des Skalarproduktes in $\mathcal{H}$ genügt. Die Operatoren sollen den folgenden zusätzlichen Forderungen gehorchen:

- Die Abbildung $\phi \mapsto a^\dagger(\phi)$ ist *linear*.
- Die Abbildung $\phi \mapsto a(\phi)$ ist *antilinear*

Auch hier gilt: Der Operator $a^\dagger(\phi)$ erzeugt ein Teilchen mit dem Zustand ϕ, der Operator $a(\phi)$ vernichtet ein Teilchen. Der Zusammenhang mit der Beschreibung im Abschnitt 5.2.2 ist dann wie folgt. Sei $\{\phi_i,\ i = 1, 2, 3, \ldots\}$ eine Basis in $\mathcal{H}$ und $a_i = a(\phi_i)$ sowie $a_i^\dagger = a^\dagger(\phi_i)$, so folgen aus der Entwicklung eines beliebigen Zustandes $\phi = \sum_i c_i \phi_i$ mit $c_i \in \mathbb{C}$ die Relationen (335) und

$$a(\phi) = \sum_i \bar{c}_i a_i \qquad a^\dagger(\phi) = \sum_i c_i a_i^\dagger \tag{347}$$

Auch in diseser Formulierung verlangen wir die Existenz des Vakuumzustandes $|0\rangle$, d.h. für alle $\phi \in \mathcal{H}$ soll gelten

$$a(\phi)|0\rangle = 0, \qquad \langle 0|0\rangle = 1. \tag{348}$$

Zustände mit n Teilchen entstehen durch Anwendung der Erzeugungsoperatoren auf das Vakuum:

$$|\phi_1\phi_2 \ldots \phi_n\rangle = a^\dagger(\phi_1) a^\dagger(\phi_2) \cdots a^\dagger(\phi_n)|0\rangle \tag{349}$$

Solche Zustände sind *antisymmetrisch* unter Permutationen ihrer Argumente. Es gilt

$$\langle \phi_1\phi_2 \ldots \phi_n|\phi_1'\phi_2' \ldots \phi_n'\rangle = \mathrm{Det}\,(\phi_i, \phi_k') \tag{350}$$

wobei rechts die Determinante einer $n \times n$-Matrix steht, die aus den Skalarprodukten zu bilden ist. Diese Formel folgt allein aus den kanonischen Vertauschungsrelationen und den definierenden Eigenschaften des Vakuums. Der Beweis geschieht durch Induktion nach n.

Der Raum aller Zustände dieser Art – konstruiert über dem Einteilchenraum $\mathcal{H}$ – heißt auch *Fockraum über* $\mathcal{H}$ und wird mit $F_-(\mathcal{H})$ bezeichnet. Der Index - weist darauf hin, daß die Zustände darin antisymmetrisch sind.

Konkreter wird die Beschreibung, wenn wir annehmen, daß es sich bei $\mathcal{H}$ um den Einteilchenraum eines Dirac-Teilchens handelt, eines Teilchens also mit Spin $\frac{1}{2}$, beschrieben durch die Dirac-Gleichung. In diesem Fall lautet das Skalarprodukt:

$$(\phi, \phi') = \int \frac{d^3p}{2E} \sum_\sigma \overline{\phi_\sigma(p)} \phi_\sigma'(p) \tag{351}$$

($\sigma = \pm\frac{1}{2}$). Man schreibt formal:

$$a(\phi) = \int \frac{d^3p}{2E} \sum_\sigma \overline{\phi_\sigma(p)} a_\sigma(p) \tag{352}$$

$$a^\dagger(\phi) = \int \frac{d^3p}{2E} \sum_\sigma a^\dagger_\sigma(p) \phi_\sigma(p) \tag{353}$$

mit

$$\{a_\sigma(p), a^\dagger_{\sigma'}(p')\} = 2E\delta^3(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\delta_{\sigma\sigma'}, \qquad \{a_\sigma(p), a_{\sigma'}(p')\} = \{a^\dagger_\sigma(p), a^\dagger_{\sigma'}(p')\} = 0 \tag{354}$$

Man kann $a^\dagger_\sigma(p)$ als einen Operator ansehen, der ebene Wellen mit dem Impuls $p = \{E, \boldsymbol{p}\}$ und der Polarisation σ erzeugt: $a^\dagger_\sigma(p)|0\rangle = |p\sigma\rangle$. Solche Zustände haben dann die übliche Normierung:

$$\langle p\sigma|p'\sigma'\rangle = 2E\delta^3(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\delta_{\sigma\sigma'}$$

Auf dem Fockraum $F_-(\mathcal{H})$ läßt sich der Energie-Impuls-Operator P^μ entweder durch das formale Integral

$$P^\mu = \int \frac{d^3p}{2E}\, p^\mu \sum_\sigma a^\dagger_\sigma(p) a_\sigma(p) \tag{355}$$

einführen, oder – besser noch – durch die Relationen

$$[a_\sigma(p), P^\mu] = p^\mu a_\sigma(p), \qquad [P^\mu, a^\dagger_\sigma(p)] = p^\mu a^\dagger_\sigma(p), \qquad P^\mu|0\rangle = 0. \tag{356}$$

Was über Teilchen hier gesagt wurde, gilt sinngemäß auch für Antiteilchen. Nur ist es notwendig, den Einteilchenraum $\mathcal{H}$ der Teilchen von dem Einteilchenraum $\overline{\mathcal{H}}$ der Antiteilchen zu unterscheiden, obwohl beide Räume ihrer Struktur nach völlig gleich sind. So haben wir also einen Fockraum $F_-(\mathcal{H})$ der Teilchen und einen Fockraum $F_-(\overline{\mathcal{H}})$ der Antiteilchen. Derjenige Fockraum, der alle Mehrteilchenzustände (gleich ob Teilchen oder Antiteilchen) enthält ist $F_-(\mathcal{H} \oplus \overline{\mathcal{H}})$. Dies verlangt, daß wir die Unterscheidung zwischen Teilchen und Antiteilchen wie einen neuen Freiheitsgrad behandeln (beschrieben durch einen Index mit zwei Werten), und daß die Operatoren $a(\phi)$ and $a^\dagger(\phi)$ für Teilchen mit den Operatoren $b(\phi)$ und $b^\dagger(\phi)$ für Antiteilchen *antivertauschen*.

5.2.5 Die Quantisierung des Dirac-Feldes

Es sei $\psi(x)$ ein Dirac-Feld, das der Dirac-Gleichung $(i\partial\!\!\!/ - m)\psi = 0$ genügt. Es ist auch in dieser Situation möglich, eine Wirkung

$$W = \int dt\, L$$

und eine Lagrange-Funktion

$$L = \int d^3x\, \mathcal{L}\Big(\psi(x), \bar\psi(x), \partial\psi(x), \overline{\partial\psi}(x)\Big)$$

zu finden mit der Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L} = \mathrm{Re}\,\Big(\bar\psi(x)(i\partial\!\!\!/ - m)\psi(x)\Big) \tag{357}$$

so daß die Dirac-Gleichung mit der Euler-Lagrangeschen Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\delta L}{\delta\dot{\bar\psi}(t,\boldsymbol{x})}-\frac{\delta L}{\delta\bar\psi(t,\boldsymbol{x})}=0$$

übereinstimmt. Die komplementäre Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\delta L}{\delta\dot{\psi}(t,\boldsymbol{x})}-\frac{\delta L}{\delta\psi(t,\boldsymbol{x})}=0$$

liefert keine neue Information: Sie stimmt mit $\overline{(i\partial\!\!\!/-m)\psi}=0$ überein. Der kanonische Formalismus behandelt aber ψ und $\bar\psi$ wie unabhängige Variable und vermeidet auf diese Weise eine Zerlegung der Feldkomponenten nach Real- und Imaginärteil.

Insbesondere erhalten wir den „kanonischen Impuls“ des Feldes $\bar\psi$ als

$$\pi(x)=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\bar\psi}(x)}=\tfrac{1}{2}(-i\gamma^0)\psi(x)$$

zusammen mit dem des Feldes ψ:

$$\bar\pi(x)=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\psi}(x)}=\tfrac{1}{2}\overline{(-i\gamma^0)\psi}(x)$$

Durch eine Legendre-Transformation finden wir die Hamilton-Funktion:

$$\begin{aligned}H &= \int d^3x\left(\dot{\bar\psi}\pi+\bar\pi\dot\psi\right)-L\\ &= \mathrm{Re}\int d^3x\,\bar\psi(m-i\boldsymbol{\gamma}\cdot\nabla)\psi\\ &= \mathrm{Re}\int d^3x\,\bar\psi(i\gamma^0\partial_0)\psi\end{aligned}\tag{358}$$

Für das Endresultat haben wir von der Dirac-Gleichung Gebrauch gemacht.

Die Fourier-Analyse gestattet uns zu schreiben:

$$\psi(x)=(2\pi)^{-3/2}\int\frac{d^3p}{2E}\sum_\sigma\left(a_\sigma(p)u(p,\sigma)e^{-ipx}+b^\dagger_\sigma(p)v(p,\sigma)e^{ipx}\right)$$

Damit folgt unter Beachtung der Reihenfolge der Faktoren:

$$H=\int\frac{d^3p}{2E}E\sum_\sigma\left(a^\dagger_\sigma(p)a_\sigma(p)-b_\sigma(p)b^\dagger_\sigma(p)\right)\tag{359}$$

So geschrieben, ist H nicht positiv definit. Eine Quantisierung durch kanonische VR kommt nicht infrage. Denn selbst die Wick-Ordnung kann diesen Mangel nicht beheben. Hier helfen jedoch die kanonischen AVR: Die Wick-Ordnung ersetzt hier Ausdrücke der Art $bb^\dagger$ duch $-b^\dagger b$, und wir erhalten so den korrekten Operator für die Energie:

$$H=\int\frac{d^3p}{2E}E\sum_\sigma\left(a^\dagger_\sigma(p)a_\sigma(p)+b^\dagger_\sigma(p)b_\sigma(p)\right)\tag{360}$$

Es gilt nun $H \geq 0$ wie gewünscht. Der Zusammenhang von Spin und Statistik finden wir auch hier bestätigt. Teilchen mit dem Spin $\frac{1}{2}$ sind Fermionen.

Dirac faßte Positronen als Löcher in einem See von Elektronen negativer Energie auf. Aus seiner Sicht war $b_\sigma(p)$ ein Erzeugungsoperator für Elektronen negativer Energie und das Vakuum durch

$$a_\sigma(p)|0\rangle = b_\sigma^\dagger(p)|0\rangle = 0$$

charakterisiert, während der Dirac-See $|\bar{0}\rangle$, gegeben durch

$$a_\sigma(p)|\bar{0}\rangle = b_\sigma(p)|\bar{0}\rangle = 0,$$

der eigentliche Grundzustand der Dirac-Theorie ist (alle Zustände negativer Energie sind besetzt).

In der modernen Auffassung sind Positronen gewöhnliche Teilchen (keine Löcher). In moderner Sicht ist $b_\sigma^\dagger(p)$ ein Erzeugungsoperator für Antiteilchen, und das Vakuum wird durch

$$a_\sigma(p)|0\rangle = b_\sigma(p)|0\rangle = 0$$

charakterisiert. Die quantisierte Dirac-Theorie ist nach Einführung der Wick-Ordnung in sich konsistent.

Wir stützen die letzte These noch dadurch, daß wir den Operator der Ladung (in Einheiten von e oder $-e$) untersuchen:

$$Q = \int d^3x\, j^0(x), \qquad j^0 = \bar{\psi}\gamma^0\psi \tag{361}$$

In der unquantisierten Theorie ist j^0 nichtnegativ: Dies galt als ein Vorzug gegenüber der Klein-Gordon-Gleichung. Was gilt in der quantisierten Theorie? Wir erhalten durch direkte Rechnung ohne Wick-Ordnung zunächst:

$$Q = \int \frac{d^3p}{2E} \sum_\sigma \Big(a_\sigma^\dagger(p) a_\sigma(p) + b_\sigma(p) b_\sigma^\dagger(p) \Big) \tag{362}$$

Dieser Ausdruck ist immer noch positiv definit. Die Wick-Ordnung verändert ihn jedoch in entscheidender Weise (beachte das Minuszeichen):

$$Q = \int \frac{d^3p}{2E} \sum_\sigma \Big(a_\sigma^\dagger(p) a_\sigma(p) - b_\sigma^\dagger(p) b_\sigma(p) \Big) \tag{363}$$

Das Resultat ist indefinit und gerade deshalb korrekt. Denn Teilchen und Antiteilchen tragen entgegengesetzte Ladung.

Aus den kanonischen AVR

$$\{a_\sigma(p), a_{\sigma'}^\dagger(p')\} = \{b_\sigma(p), b_{\sigma'}^\dagger(p')\} = 2E\delta^3(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}')\delta_{\sigma\sigma'} \tag{364}$$

(alle anderen Antikommutatoren verschwinden) folgen kanonische AVR für die Feldkomponenten:

$$\{\psi(x), \psi^*(x')\}_{t=t'} = \delta^3(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}')\mathbb{1} \tag{365}$$

Ausgeschrieben bedeutet diese Relation, daß

$$\{\psi_\alpha(x), \psi^*_\beta(x')\}_{t=t'} = \delta^3(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}')\delta_{\alpha\beta} \tag{366}$$

für $\alpha, \beta = 1, 2, 3, 4$ gilt. Zum Beweis benutze man die Fourier-Zerlegung des Feldes und die Relationen

$$\sum_\sigma u(p,\sigma)u^*(p,\sigma) = (\not{p} + m)\gamma^0, \qquad \sum_\sigma v(p,\sigma)v^*(p,\sigma) = (\not{p} - m)\gamma^0$$

Dann findet man die Darstellung

$$\{\psi(x), \psi^*(x')\}_{t=t'} = I_+(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') + I_-(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}')$$

mit

$$I_\pm(\boldsymbol{x}) = (2\pi)^{-3} \int \frac{d^3p}{2E} (\not{p} \pm m) e^{\pm i\boldsymbol{px}}$$

Ersetzt man in I_- die Integrationsvariable $\boldsymbol{p}$ durch $-\boldsymbol{p}$, so erhält man

$$I_+(\boldsymbol{x}) + I_-(\boldsymbol{x}) = (2\pi)^{-3} \int \frac{d^3p}{2E} 2E\gamma^0\gamma^0 e^{i\boldsymbol{px}} = (2\pi)^{-3} \int d^3p \, e^{i\boldsymbol{px}} \mathbb{1} = \delta^3(\boldsymbol{x})\mathbb{1}$$

wie behauptet.

Anhang: Zwei Maßsysteme der Elektrodynamik im Vergleich

	Gaußsches System (GS)	internationales System (SI)
Potential : Feldstärke: el. Feld : mag. Feld:	$A^\mu = \{\Phi, \boldsymbol{A}\}$ $F^{\mu\nu} = \partial^\nu A^\mu - \partial^\mu A^\nu$ $\boldsymbol{E} = \{F^{01}, F^{02}, F^{03}\}$ $\boldsymbol{B} = \{F^{23}, F^{31}, F^{12}\}$ $\boldsymbol{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{A} - \nabla\Phi$ $\boldsymbol{B} = \nabla\times\boldsymbol{A}$	$A^\mu = \{\Phi, c\boldsymbol{A}\}$ $F^{\mu\nu} = \partial^\nu A^\mu - \partial^\mu A^\nu$ $\boldsymbol{E} = \{F^{01}, F^{02}, F^{03}\}$ $c\boldsymbol{B} = \{F^{23}, F^{31}, F^{12}\}$ $\boldsymbol{E} = -\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{A} - \nabla\Phi$ $\boldsymbol{B} = \nabla\times\boldsymbol{A}$
Kraft auf eine Punktladung q: Stromdichte: Kontinuitätsgleichung:	$\boldsymbol{K} = q(\boldsymbol{E} + c^{-1}\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})$ $j^\mu = \{c\rho, \boldsymbol{j}\}$ $\partial_\mu j^\mu = 0$ $\frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla\cdot\boldsymbol{j} = 0$	$\boldsymbol{K} = q(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})$ $j^\mu = \{c\rho, \boldsymbol{j}\}$ $\partial_\mu j^\mu = 0$ $\frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla\cdot\boldsymbol{j} = 0$
homogene Maxwell-Gleichungen: gleichbedeutend mit:	$\partial_\nu F^{\mu\nu} = 4\pi c^{-1} j^\mu$ $\nabla\cdot\boldsymbol{E} = 4\pi\rho$ $\nabla\times\boldsymbol{B} = \frac{4\pi}{c}\boldsymbol{j} + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{E}$	$\partial_\nu F^{\mu\nu} = \epsilon_0 c j^\mu$ $\epsilon_0\nabla\cdot\boldsymbol{E} = \rho$ $\nabla\times\boldsymbol{B} = \mu_0\boldsymbol{j} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{E}$
inhomogene Maxwell-Gleichungen: gleichbedeutend mit:	$\partial^\mu F^{\nu\sigma} + \partial^\sigma F^{\mu\nu} + \partial^\nu F^{\sigma\mu} = 0$ $\nabla\times\boldsymbol{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{B} = 0$ $\nabla\cdot\boldsymbol{B} = 0$	$\partial^\mu F^{\nu\sigma} + \partial^\sigma F^{\mu\nu} + \partial^\nu F^{\sigma\mu} = 0$ $\nabla\times\boldsymbol{E} + \frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{B} = 0$ $\nabla\cdot\boldsymbol{B} = 0$
Lorentz-Bedingung: Wellengleichung:	$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\Phi + \nabla\cdot\boldsymbol{A} = 0$ $\Box A^\mu = \frac{4\pi}{c} j^\mu$	$\frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\Phi + \nabla\cdot\boldsymbol{A} = 0$ $\Box A^\mu = \epsilon_0 c j^\mu$
Energiedichte: Poynting-Vektor: Energiebilanz :	$w = \frac{1}{8\pi}(\boldsymbol{E}^2 + \boldsymbol{B}^2)$ $\boldsymbol{S} = \frac{c}{4\pi}\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B}$ $\frac{\partial}{\partial t}w + \nabla\cdot\boldsymbol{S} = -\boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{E}$	$w = \frac{1}{2}(\epsilon_0\boldsymbol{E}^2 + \mu_0^{-1}\boldsymbol{B}^2)$ $\boldsymbol{S} = \mu_0^{-1}\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B}$ $\frac{\partial}{\partial t}w + \nabla\cdot\boldsymbol{S} = -\boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{E}$
Feinstruktur-konstante: Bohrsches Magneton:	$\alpha = e^2/(\hbar c)$ $\mu_\mathrm{B} = e\hbar/(2mc)$	$\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c)$ $\mu_\mathrm{B} = e\hbar/(2m)$

In SI gilt $c^{-2} = \epsilon_0\mu_0$. Quantenmechanik und Atomphysik fußen auf dem Gaußschen System, die Quantenelektrodynamik hingegen auf dem internationalen System mit den Vereinfachungen, die sich aus $\epsilon_0 = \mu_0 = c = \hbar = 1$ ergeben.