

# Vorlesungen zur Quantenmechanik II

Prof. Dr. Gerd Rudolph

Der Autor bedankt sich bei Herrn Uwe Schaufuß für das Erstellen einer 1. Latex-version und bei Dr. Matthias Schmidt für das Korrekturlesen der vorliegenden Version.

# Inhaltsverzeichnis

<b>9</b>	<b>Der Zustandsraum der Quantenmechanik</b>	<b>5</b>
9.1	Reine Zustände . . . . .	5
9.2	Gemischte Zustände . . . . .	6
9.3	Zusammensetzung quantenmechanischer Systeme . . . . .	11
9.4	Statistische Interpretation zusammengesetzter Operatoren . . . . .	13
9.5	Spinkorrelationen . . . . .	18
9.6	EPR-Paradoxon und Bellsche Ungleichungen . . . . .	21
9.7	Quantenteleportation . . . . .	22
<b>10</b>	<b>Symmetrie und Invarianz</b>	<b>27</b>
10.1	Das Wigner-Theorem, Symmetrietransformationen . . . . .	27
10.2	Translationen . . . . .	29
10.3	Drehungen . . . . .	30
10.4	Tensoroperatoren und Wigner-Eckart-Theorem . . . . .	33
10.5	Parität (Raumspiegelung) . . . . .	36
10.6	Bewegungsumkehr (Zeitumkehr) . . . . .	37
10.7	Invarianzen und Erhaltungssätze . . . . .	39
10.8	Innere Symmetrien. Der Isospin . . . . .	43
<b>11</b>	<b>Identische Teilchen</b>	<b>47</b>
11.1	Symmetrisierungsprinzip . . . . .	47
11.2	Ideale Gase . . . . .	54
11.3	Das Zentralfeldmodell der Atome . . . . .	56
11.4	Das Heliumatom . . . . .	58
11.5	Zweite Quantisierung . . . . .	61
11.6	Suprafluidität . . . . .	66
<b>12</b>	<b>Näherungsmethoden für gebundene Zustände</b>	<b>71</b>
12.1	Zeitunabhängige Störungstheorie . . . . .	71
12.1.1	Der Fall ohne Entartung . . . . .	71
12.1.2	Der Fall mit Entartung . . . . .	73
12.2	Atome . . . . .	75
12.2.1	Alkaliatome . . . . .	75
12.2.2	Das Heliumatom . . . . .	76
12.2.3	Spin-Bahn-Kopplung und Feinstruktur . . . . .	78
12.3	Atome im statischen äußeren Feld . . . . .	84
12.3.1	Zeeman- und Paschen-Back-Effekt . . . . .	84
12.3.2	Stark-Effekt . . . . .	87
12.4	Variationsmethoden . . . . .	87
12.4.1	Die Variationsmethode von Ritz . . . . .	87

12.4.2	Das Minimax-Prinzip . . . . .	91
12.4.3	Die Hartree-Fock-Methode . . . . .	93
12.5	Zeitabhängige Störungstheorie . . . . .	96
12.5.1	Konstante Störungen. Fermis goldene Regel . . . . .	99
12.5.2	Adiabatische Störungen . . . . .	103
12.5.3	Periodische Störungen . . . . .	104
12.5.4	Störung eines Atoms durch eine ebene Lichtwelle. Auswahlregeln . . . . .	105
<b>13</b>	<b>Relativistische Quantenmechanik</b>	<b>109</b>
13.1	Spezielle Relativitätstheorie . . . . .	109
13.2	Die Klein-Gordon-Gleichung . . . . .	112
13.3	Die Dirac-Gleichung . . . . .	116
13.3.1	Die Clifford-Algebra der $\gamma$ -Matrizen . . . . .	117
13.3.2	Spinordarstellung und relativistische Invarianz der Dirac-Gleichung . . . . .	119
13.3.3	Spin und Helizität des Dirac-Teilchens . . . . .	122
13.3.4	Lösungen der freien Dirac-Gleichung . . . . .	123
13.3.5	Ankopplung eines äußeren elektromagnetischen Feldes. Der nichtrelativistische Limes der Dirac-Gleichung . . . . .	125
13.3.6	Exakt lösbare Fälle mit Wechselwirkung . . . . .	126
13.3.7	Lösungen mit negativer Energie. Diracs Löcher-Theorie . . . . .	127
13.4	Zweite Quantisierung des freien Dirac-Feldes . . . . .	129
13.5	Zweite Quantisierung des elektromagnetischen Feldes . . . . .	133

# Kapitel 9

## Der Zustandsraum der Quantenmechanik

### 9.1 Reine Zustände

Wir erinnern daran, daß **reine Zustände** durch **Einheitsstrahlen** im Hilbertraum  $\mathcal{H}$  des quantenmechanischen Systems beschrieben werden. Ein Einheitsstrahl ist eine Äquivalenzklasse  $\{e^{i\alpha}|\psi\rangle\}$  von normierten Vektoren aus  $\mathcal{H}$ . **Observable** werden durch (nicht unbedingt beschränkte) **selbstadjungierte Operatoren** im  $\mathcal{H}$  beschrieben. Im Experiment werden (verallgemeinerte) Eigenwerte der Observablen gemessen. Da keine Meßapparatur unendlich viele Meßwerte unterscheiden kann, können “allgemeine” Observable nur approximativ ausgemessen werden. Aus dieser praktischen Sicht sind eher endlichdimensionale Hilberträume realistisch. Für die Entwicklung der Theorie ist aber der Umgang mit unendlichdimensionalen Hilberträumen und mit im allgemeinen unbeschränkten Operatoren (als mathematische Idealisierung) oft unerläßlich.

Wir betrachten, der Einfachheit wegen, eine Observable  $\hat{A}$  im endlichdimensionalen Hilbertraum  $\mathcal{H}$ , mit Spektralzerlegung

$$\hat{A} = \lambda_1 \hat{P}_1 + \dots + \lambda_n \hat{P}_n.$$

Wie bereits bemerkt, wird bei einer Messung von  $\hat{A}$  einer der Eigenwerte von der Meßapparatur angezeigt. Ist das System **vor der Messung** im reinen Zustand  $|\psi\rangle$  und ist  $|\psi\rangle$  **kein** Eigenvektor von  $\hat{A}$ , so ist das Meßergebnis **zufällig**. Die Wahrscheinlichkeit, daß  $\lambda_k$  gemessen wird, beträgt

$$p_k = \langle \psi | \hat{P}_k \psi \rangle. \quad (9.1)$$

Falls  $\lambda_k$  vom Meßinstrument angezeigt wird, dann wissen wir, daß sich das System in einem Eigenzustand mit diesem Eigenwert befindet. (Dieser liegt im Unterraum  $\hat{P}_k \mathcal{H}$ .) Die Größe  $p_k$  kann offensichtlich als Übergangswahrscheinlichkeit von  $\psi$  zu  $\hat{P}_k \psi$  interpretiert werden. Der zugehörige normierte Eigenvektor ist

$$\psi_k = \frac{1}{\sqrt{p_k}} \hat{P}_k \psi. \quad (9.2)$$

Ist also der Zustand vor der Messung bekannt (zusätzliche Information), so wissen wir, daß sich das System nach der Messung von  $\lambda_k$  im Zustand  $\psi_k$  befindet. Wir sprechen in diesem Zusammenhang von der **Präparation** des Zustandes (bzw. von der **Reduktion** des Zustandes) durch Messung.

#### Bemerkungen 9.1

- i) Bei Einzelmessungen zeigen sich obige Übergangswahrscheinlichkeiten nicht. Erst bei vielen Messungen unter gleichen Bedingungen zeigt sich eine Verteilung (z.B. ein Interferenzbild). Wir müssen also über viele Systeme verfügen, die sich alle (mit hinreichender Genauigkeit) im Zustand  $|\psi\rangle$  befinden.

- ii) Wir erinnern daran, daß Gleichung (9.1) aus unserem Postulat III (siehe Teil I) folgt. Der statistische Mittelwert für Messungen der Observablen  $\hat{A}$  im Zustand  $\psi$  ist gegeben durch den Erwartungswert

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle.$$

- iii) Im allgemeinen reicht die Messung **einer** Observablen  $\hat{A}$  **nicht** aus, um einen reinen Zustand zu präparieren, denn deren Eigenwerte können ausgeartet sein:

$$\hat{A} |a, \alpha\rangle = a |a, \alpha\rangle.$$

Man muß sich ein **vollständiges System**  $\{\hat{A}, \hat{B}, \dots\}$  kommutierender Observabler verschaffen, so daß die gemeinsamen Eigenvektoren  $|a, b, \dots\rangle$  **eindimensionale** Unterräume aufspannen. Man sagt, mit einem vollständigen System kommutierender Observablen wird eine **vollständige Messung** ausgeführt. Nach der Messung (Präparation) liegt eine **maximale** Information über das System vor, beschrieben durch den **reinen** Zustand  $|\psi\rangle = |a, b, \dots\rangle$ .

- iv) Zur Erinnerung betrachten wir als Beispiel ein Teilchens mit Spin  $1/2$ . Der Hilbertraum des Systems ist

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2.$$

Vektoren aus diesem Raum sind der Gestalt

$$\varphi \equiv \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}, \quad \varphi_i \in L^2(\mathbb{R}^3),$$

und heißen Spinoren. Ein vollständiges System kommutierender Observabler ist  $\{\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z, \hat{S}_z\}$ , wobei  $\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$  den Spinoperator bezeichnet. Die zugehörigen Eigenzustände sind  $|p_x, p_y, p_z, S_z\rangle$  mit den Eigenwerten  $S_z = \pm \hbar/2$ .

Wir wenden uns nun der Frage zu, wie man den Zustand eines quantenmechanischen Systems beschreibt, wenn keine vollständige (maximale) Information vorliegt.

## 9.2 Gemischte Zustände

Diese entstehen – im Sinne der obigen Diskussion – durch Entfernen einer oder mehrerer Observabler aus einem vollständigen System, im obigen Beispiel etwa durch Ausschluß der Spinobservablen. Damit ist gemeint, daß der Spin (zwar nicht vergessen, aber) nicht gemessen wird. Da nur der Spinoperator die Komponenten des Spinors mischt, haben (nach Weglassung des Spins) alle Observablen im Hilbertraum  $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$  die folgende Form:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} \hat{A} & 0 \\ 0 & \hat{A} \end{pmatrix},$$

wobei  $\hat{A}$  ein selbstadjungierter Operator im  $L^2(\mathbb{R}^3)$  ist. Für  $\varphi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}$ , mit  $\|\varphi_1\|^2 + \|\varphi_2\|^2 = 1$ , ist der Erwartungswert von  $\hat{A}$  gegeben durch:

$$\langle \hat{A} \rangle_\varphi = \langle \varphi | \hat{A} \varphi \rangle = (\varphi_1^*, \varphi_2^*) \begin{pmatrix} \hat{A} & 0 \\ 0 & \hat{A} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \langle \varphi_1 | \hat{A} \varphi_1 \rangle + \langle \varphi_2 | \hat{A} \varphi_2 \rangle.$$

Man fragt sich, ob der Zustand dieses Systems nach Ausschluß der Spinobservablen vielleicht einfach durch **einen** reinen Zustand  $\psi \in L^2(\mathbb{R}^2)$  beschrieben werden kann. Dazu müßten, für alle Observablen  $\hat{A}$ , die Erwartungswerte von  $\hat{A}$ , berechnet mit  $\psi$ , mit  $\langle \hat{A} \rangle_\varphi$  übereinstimmen:

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle = \langle \hat{A} \rangle_\varphi. \quad (9.3)$$

Für  $\hat{A} = \mathbf{1}$  erhalten wir daraus

$$\|\psi\|^2 = \|\varphi_1\|^2 + \|\varphi_2\|^2 = 1$$

und für  $\hat{A} = |\psi\rangle\langle\psi|$  ergibt sich

$$1 = \langle\psi|\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle = \langle\varphi_1|\psi\rangle\langle\psi|\varphi_1\rangle + \langle\varphi_2|\psi\rangle\langle\psi|\varphi_2\rangle = |\langle\varphi_1|\psi\rangle|^2 + |\langle\varphi_2|\psi\rangle|^2.$$

Aus der Cauchy–Schwarzschen Ungleichung haben wir

$$|\langle\varphi_i|\psi\rangle|^2 \leq \|\varphi_i\|^2\|\psi\|^2 = \|\varphi_i\|^2, \quad i = 1, 2,$$

und damit wegen  $\|\varphi_1\|^2 + \|\varphi_2\|^2 = 1$ :

$$|\langle\varphi_i|\psi\rangle|^2 = \|\varphi_i\|^2, \quad i = 1, 2.$$

Dies bedeutet  $\psi = \lambda_1\varphi_1$  und  $\psi = \lambda_2\varphi_2$ , d.h.,  $\varphi_1$  und  $\varphi_2$  müßten linear abhängig sein. Dies ist ein Widerspruch.

Wir folgern, daß Zustände im obigen System notwendig durch **zwei** Vektoren  $\varphi_1, \varphi_2 \in L^2(\mathbb{R}^2)$  beschrieben werden. Diese sind **nicht** unbedingt orthogonal und genügen der Normierungsbedingung  $\|\varphi_1\|^2 + \|\varphi_2\|^2 = 1$ . Der **Erwartungswert** von  $\hat{A}$  für einen solchen Zustand ist

$$\langle\hat{A}\rangle_\varphi = \langle\varphi_1|\hat{A}\varphi_1\rangle + \langle\varphi_2|\hat{A}\varphi_2\rangle. \quad (9.4)$$

Wir konkretisieren die Situation: Möge eine Quelle Spin-1/2-Teilchen mit fixierten Impuls  $\vec{p}$  produzieren, die Informationen über den Spin seien aber unvollständig: Das Teilchen befinde sich mit der Wahrscheinlichkeit  $p_1 = 1/2$  im Zustand  $|\psi_1\rangle = |\vec{p}, +\hbar/2\rangle$  und mit der Wahrscheinlichkeit  $p_2 = 1/2$  im Zustand  $|\psi_2\rangle = |\vec{p}, -\hbar/2\rangle$ . Dann bilden  $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\}$  offensichtlich ein vollständiges Orthonormalsystem im Unterraum der Zustände mit Impuls  $\vec{p}$ .

Liege nun, für ein beliebiges Quantensystem, die folgende Information vor: Jeweils mit den Wahrscheinlichkeiten  $p_1, p_2, \dots, p_n, \dots$ , mit  $0 \leq p_i \leq 1$  und  $\sum_i p_i = 1$ , befindet sich das System in reinen Zuständen repräsentiert durch die (nicht parallelen, aber nicht unbedingt orthogonalen) Vektoren  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n, \dots$ . Dann sagen wir, diese Daten beschreiben einen **gemischten Zustand** des Systems. Mathematisch werden gemischte Zustände mit Hilfe des **Dichteoperators**  $\hat{\rho}$ , auch bezeichnet als **Dichtematrix**, beschrieben:

$$\hat{\rho} := \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|. \quad (9.5)$$

In Anlehnung an obiges Beispiel dehnen wir das **Postulat III** aus Teil I folgendermaßen auf den Fall von gemischten Zuständen aus: Der statistische Mittelwert (Erwartungswert) für die Messung einer Observablen  $\hat{A}$  im gemischten Zustand, beschrieben durch  $\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ , ist

$$\langle\hat{A}\rangle_{\hat{\rho}} = \sum_i p_i \langle\psi_i|\hat{A}\psi_i\rangle. \quad (9.6)$$

Zusätzlich zur quantenmechanischen Mittelung über die reinen Zustände  $\psi_i$  im Sinne von Postulat III kommt also eine Mittelung über das Ensemble dieser Zustände mit den Gewichten  $p_i$  hinzu. Sei  $\{\chi_i\}$  eine beliebige orthonormierte Basis in  $\mathcal{H}$ . Durch Einsetzen der zugehörigen Zerlegung der Eins,  $\sum_j |\chi_j\rangle\langle\chi_j| = \mathbf{1}$ , erhalten wir

$$\langle\hat{A}\rangle_{\hat{\rho}} = \sum_{i,j} p_i \langle\psi_i|\hat{A}|\chi_j\rangle\langle\chi_j|\psi_i\rangle = \sum_{i,j} p_i \langle\chi_j|\psi_i\rangle\langle\psi_i|\hat{A}|\chi_j\rangle = \sum_j \langle\chi_j|\hat{\rho}\hat{A}|\chi_j\rangle.$$

Für einen beliebigen Spurklasseoperator  $\hat{B}$  gilt aber<sup>1</sup>

$$\text{Tr } \hat{B} = \sum_i \langle\chi_i|\hat{B}|\chi_i\rangle.$$

<sup>1</sup>Die Spur ist natürlich unabhängig von der gewählten Basis

Ist also  $\hat{\rho}\hat{A}$  ein Spurklasseoperator, was wir im weiteren immer unterstellen, dann konvergiert die obige Summe und es gilt

$$\langle \hat{A} \rangle_{\hat{\rho}} = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}). \quad (9.7)$$

Für den Fall eines reinen Zustandes  $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$  hatten wir diese Formel bereits in Teil I gefunden. Wir diskutieren die **Eigenschaften der Dichtematrix**:

- i)  $\hat{\rho}$  ist **selbstadjungiert**,  $\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger$ : Offensichtlich ist  $\hat{\rho}$ , definiert durch (9.5), symmetrisch. Aus der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung erhalten wir, unter Verwendung von  $\sum p_i = 1$ :

$$\|\hat{\rho}\varphi\|^2 = \sum_{i,j} p_i p_j \langle \varphi|\psi_i\rangle \langle \psi_i|\psi_j\rangle \langle \psi_j|\varphi\rangle \leq \sum_{i,j} p_i p_j \|\varphi\|^2 = \|\varphi\|^2$$

also  $\|\hat{\rho}\|^2 \leq 1$ . Damit ist  $\hat{\rho}$  ein beschränkter, auf ganz  $\mathcal{H}$  definierter, symmetrischer Operator, und folglich selbstadjungiert.

- ii)  $\hat{\rho}$  ist **positiv**,  $\hat{\rho} \geq 0$ : Es gilt

$$\langle \varphi|\hat{\rho}|\varphi\rangle = \sum_i p_i \langle \varphi|\psi_i\rangle \langle \psi_i|\varphi\rangle = \sum_i p_i |\langle \varphi|\psi_i\rangle|^2 \geq 0,$$

für alle  $\varphi \in \mathcal{H}$ .

- iii)  $\hat{\rho}$  ist ein **Spurklasseoperator**, mit  $\text{Tr}\hat{\rho} = 1$ : Für ein vollständiges Orthonormalsystem  $\{\chi_i\}$  gilt

$$\text{Tr}\hat{\rho} = \sum_j \langle \chi_j|\hat{\rho}|\chi_j\rangle = \sum_{i,j} p_i \langle \psi_i|\chi_j\rangle \langle \chi_j|\psi_i\rangle = \sum_i p_i \|\psi_i\|^2 = 1.$$

Wir erheben diese Eigenschaften zu Axiomen. Eine Dichtematrix ist ein beschränkter Operator im Hilbertraum  $\mathcal{H}$  mit den Eigenschaften;

- i)  $\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger$  .  
 ii)  $\hat{\rho} \geq 0$  ,  
 iii)  $\text{Tr}\hat{\rho} = 1$  .

Von nun an identifizieren wir jeden Zustand eines quantenmechanischen Systems mit seiner Dichtematrix<sup>2</sup>. Jeder selbstadjungierte, positive Spurklasseoperator ist **kompakt**<sup>3</sup> und jeder kompakte Operator hat ein rein diskretes Spektrum. Seine Eigenvektoren bilden ein vollständiges Orthonormalsystem in  $\mathcal{H}$ . Für  $\hat{\rho}$ , mit Eigenwerten  $q_i$  und Spektralprojektoren  $\hat{P}_i$ , haben wir damit die folgende **Spektralzerlegung**

$$\hat{\rho} = \sum_i q_i \hat{P}_i, \quad (9.8)$$

mit  $q_i \geq 0$  und  $\text{Tr}\hat{\rho} = \sum_i q_i = 1$ . Für ein gewähltes System von Eigenvektoren  $|\phi_j\rangle$  ergibt sich

$$\hat{\rho} = \sum_j q_j |\phi_j\rangle\langle\phi_j|. \quad (9.9)$$

Ist ein Eigenwert ausgeartet, so tritt er in dieser Summe dem Ausartungsgrad entsprechend oft auf. Diese Darstellung des gemischten Zustandes ist in gewissem Sinne (Spektralzerlegung) ausgezeichnet, aber natürlich nicht eindeutig. Man hat eine Freiheit in der Wahl des Orthonormalsystems in jedem ausgearteten Unterraum  $\hat{P}_i\mathcal{H}$ .

<sup>2</sup>Noch abstrakter gesprochen, ist ein Zustand  $\omega$  ein normiertes, positives lineares Funktional auf der Observablenalgebra des Systems,  $\omega(\hat{A}) = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A})$ . Wir werden diesen Gesichtspunkt aber nicht weiter verfolgen, denn  $\omega$  kann immer mit  $\hat{\rho}$  identifiziert werden

<sup>3</sup>siehe [Reed/Simon], Teil I, VI.5

**Bemerkungen 9.2**

- i) Für jeden Dichteoperator gibt es eine gewisse Zahl von möglichen Darstellungen der Form (9.5). Physikalisch interessant sind natürlich nur solche, die durch Präparation im Experiment realisierbar sind. Für die Berechnung der Erwartungswerte sind aber alle Darstellungen äquivalent. Wir diskutieren zwei solche Zerlegungen am Beispiel  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ : Sei ein gemischter Zustand folgendermaßen präpariert:

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \text{ mit } p_1 = \frac{24}{31}; \quad \psi_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \text{ mit } p_2 = \frac{7}{31}.$$

Es gilt  $p_1 + p_2 = 1$  und  $\psi_1$  und  $\psi_2$  sind offensichtlich nicht orthogonal. Wir erhalten mit (9.5):

$$\hat{\rho} = \frac{24}{31} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} (1, 1) + \frac{7}{31} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1, 0) = \frac{12}{31} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} + \frac{7}{31} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{31} \begin{pmatrix} 19 & 12 \\ 12 & 12 \end{pmatrix}.$$

Andererseits liefert die Spektralzerlegung (9.9) für dieses Beispiel:

$$\hat{\rho} = \frac{28}{31} \begin{pmatrix} \frac{4}{5} \\ \frac{3}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix} + \frac{3}{31} \begin{pmatrix} \frac{3}{5} \\ -\frac{4}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \end{pmatrix}.$$

- ii) Aus der Spektralzerlegung (9.9) einer Dichtematrix  $\hat{\rho}$  erhalten wir wegen  $0 \leq q_i \leq 1$ :

$$\langle \psi | \hat{\rho}^2 | \psi \rangle = \sum_j q_j^2 \langle \psi | \phi_j \rangle \langle \phi_j | \psi \rangle \leq \sum_j q_j \langle \psi | \phi_j \rangle \langle \phi_j | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{\rho} | \psi \rangle,$$

also

$$\hat{\rho}^2 \leq \hat{\rho}. \quad (9.10)$$

Wie bereits bemerkt, sind reine Zustände Spezialfälle von gemischten Zuständen. Die Dichtematrix des reinen Zustandes  $\psi$  ist

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|,$$

(in Teil I mit  $\hat{P}_{|\psi\rangle\langle\psi|}$  bezeichnet und statistischer Operator genannt.) In diesem Falle ist  $\hat{\rho}$  also ein **Projektor** auf den eindimensionalen Unterraum von  $\mathcal{H}$ , aufgespannt durch  $\psi$ . Für einen reinen Zustand gilt offenbar

$$\hat{\rho}^2 = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = \hat{\rho}.$$

Umgekehrt, erfüllt der Zustand  $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ , dann ist er rein, denn aus obiger Rechnung haben wir  $\sum_j q_j^2 |\phi_j\rangle\langle\phi_j| = \sum_j q_j |\phi_j\rangle\langle\phi_j|$ , also  $q_j^2 = q_j$ . Die einzigen Lösungen dieser Gleichungen lauten  $q_i = 1$  und  $q_j = 0$  für alle  $j \neq i$ .

- iii) Die Zustände eines quantenmechanischen Systems bilden offensichtlich eine **konvexe Menge**, d.h., mit  $\hat{\rho}_1$  und  $\hat{\rho}_2$  ist auch jede konvexe Kombination

$$\hat{\rho} = \lambda \hat{\rho}_1 + (1 - \lambda) \hat{\rho}_2, \quad \lambda \in [0, 1],$$

eine Dichtematrix. Tatsächlich ist  $\hat{\rho}$  wieder selbstadjungiert und hat Spur 1. Es bleibt die Positivität zu zeigen:

$$\langle \psi | \hat{\rho} | \psi \rangle = \lambda \langle \psi | \hat{\rho}_1 | \psi \rangle + (1 - \lambda) \langle \psi | \hat{\rho}_2 | \psi \rangle \geq 0,$$

für beliebige  $\psi \in \mathcal{H}$ , denn  $\hat{\rho}_1$  und  $\hat{\rho}_2$  sind positiv.

- iv) Für eine Observable  $\hat{A}$  mit der Spektralzerlegung  $\hat{A} = \sum_j a_j \hat{P}_j$  gilt nach (9.7)

$$\langle \hat{A} \rangle_{\hat{\rho}} = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}) = \sum_j a_j \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{P}_j) \equiv \sum_j a_j \text{Tr}(\hat{P}_j \hat{\rho} \hat{P}_j), \quad (9.11)$$

also ist  $\text{Tr}(\hat{P}_j \hat{\rho} \hat{P}_j)$  die Wahrscheinlichkeit, mit der der Eigenwert  $a_j$  gemessen wird. (Für reine Zustände ist dieser Ausdruck identisch mit  $\|\hat{P}_j \psi\|^2$ .) Dies legt die folgende Verallgemeinerung der Reduktion eines Zustandes durch Messung auf den allgemeinen Fall nahe:

$$\hat{\rho} \mapsto \frac{\hat{P}_j \hat{\rho} \hat{P}_j}{\text{Tr}(\hat{\rho} \hat{P}_j)}. \quad (9.12)$$

Ist  $a_j$  nicht ausgeartet, dann entsteht ein reiner Zustand. Dies ist die **Lüders-Regel**. Sie wird oft postuliert. Wir zeigen im nächsten Abschnitt, daß man sie mit dem Konzept der **Purifizierung** aus der entsprechenden (von Neumannschen) Regel für reine Zustände herleiten kann.

Werden im Experiment Eigenwerte von  $\hat{A}$  aus einem Intervall  $\Delta$  gemessen (Filter), dann ist der reduzierte Zustand ein statistisches Gemisch von obigen Zuständen, mit  $a_j \in \Delta$ . Man erhält:

$$\hat{\rho} \mapsto \frac{\sum_{a_j \in \Delta} \hat{P}_j \hat{\rho} \hat{P}_j}{\text{Tr}(\hat{\rho} \hat{E}_{\hat{A}}(\Delta))}, \quad (9.13)$$

wobei  $\hat{E}_{\hat{A}}(\cdot)$  das durch  $\hat{A}$  definierte projektorwertige Maß bezeichnet.

Wie bereits eingangs erwähnt, lassen sich Observable mit kontinuierlichem Anteil im Spektrum nur approximativ ausmessen, d.h. man kann keinen verallgemeinerten Eigenzustand präparieren. Für eine durch das Meßinstrument definierte Zerlegung des Spektrums in endliche Intervalle liefert dann die zugehörige Schar von Spektralprojektoren  $\hat{E}_{\hat{A}}(\Delta)$  die Approximation der Observablen  $\hat{A}$  und die Lüders-Regel hat die Form

$$\hat{\rho} \mapsto \frac{\hat{E}_{\hat{A}}(\Delta) \hat{\rho} \hat{E}_{\hat{A}}(\Delta)}{\text{Tr}(\hat{\rho} \hat{E}_{\hat{A}}(\Delta))}. \quad (9.14)$$

- v) Die **zeitliche Evolution** von gemischten Zuständen ergibt sich sofort aus der zeitlichen Evolution der reinen Zustände. Wir haben

$$\psi_i(t) = \hat{U}(t) \psi_i(0),$$

also

$$\hat{\rho}(t) = \sum_i p_i |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_i(t)| = \hat{U}(t) \hat{\rho}(0) \hat{U}(t)^\dagger.$$

Differenzieren wir diese Gleichung nach der Zeit, so erhalten wir die **Liouvillegleichung** für die Zeitentwicklung des Dichteoperators:

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)]. \quad (9.15)$$

**Beispiel:** Wir beschreiben den **Zustandsraum für ein Spin 1/2-Teilchen** unter Vernachlässigung der kontinuierlichen Freiheitsgrade, d.h. der Hilbertraum ist  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$  und Observable können mit Hermiteschen  $2 \times 2$ -Matrizen identifiziert werden. Jede dieser Matrizen kann als reelle Linearkombination der Matrizen  $(\mathbf{1}, \sigma_i)$ , wobei  $\sigma_i$  die Pauli-Matrizen bezeichnet, dargestellt werden. Da die Pauli-Matrizen spurlos sind, hat jede Hermitesche Matrix mit Spur 1 die folgende Form:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \left( \mathbf{1} + \sum_{i=1}^3 x_i \sigma_i \right) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+x_3 & x_1 - ix_2 \\ x_1 + ix_2 & 1-x_3 \end{pmatrix}.$$

Notwendige und hinreichende Bedingung für die Positivität von  $\hat{\rho}$  ist  $\det \hat{\rho} \geq 0$ . Dies liefert

$$4 \det \hat{\rho} = (1+x_3)(1-x_3) - (x_1+ix_2)(x_1-ix_2) = 1 - |\vec{x}|^2 \geq 0,$$

also  $|\vec{x}| \leq 1$ . Wir sehen daß die Zustände des Systems eindeutig durch Vektoren, die in der Einheitskugel  $B^3 \subset \mathbb{R}^3$  liegen, charakterisiert werden. Dies ist in der Tat eine konvexe Menge.

Für Punkte auf dem Rande der Kugel gilt  $|\vec{x}| = 1$ , also  $\det \hat{\rho} = 0$ . Damit hat die Eigenwertgleichung

$$\lambda^2 - \lambda + \det \hat{\rho} = 0$$

für  $\hat{\rho}$  in diesem Falle die Form  $\lambda^2 - \lambda = 0$ , d.h. die einzigen Lösungen sind  $\lambda = 0, 1$ . Damit ist  $\hat{\rho}$  ein Projektor, also ein reiner Zustand. Umgekehrt, ist natürlich jeder reine Zustand ein Projektor. Die Menge der reinen Zustände wird also durch obige Parametrisierung mit dem Rand der Kugel identifiziert. Punkte im Innern der Kugel repräsentieren echte gemischte Zustände. Sie lassen sich auf vielfältige Weise als konvexe Kombination von Randpunkten darstellen. Unter diesen ist die **Spektraldarstellung**

$$\vec{x} = \frac{1 + |\vec{x}|}{2} \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|} + \frac{1 - |\vec{x}|}{2} \frac{-\vec{x}}{|\vec{x}|}$$

ausgezeichnet.

**Beispiel:** Wir analysieren ein **mehrfaches Stern-Gerlach-Experiment**. Es mögen drei Observable  $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$  gemessen, die der Einfachheit halber diskretes, nicht entartetes Spektrum haben sollen. Seien  $a_i, b_i, c_i$  die Eigenwerte und  $|a_i\rangle, |b_i\rangle, |c_i\rangle$  die zugehörigen Eigenvektoren. Bei der ersten Messung wird der Meßwert  $a_0$  herausgefiltert und damit der Zustand  $|a_0\rangle$  präpariert. Wir betrachten die folgenden drei Meßprozeduren:

1. Wir messen zuerst  $\hat{B}$  mit Filter für den fixierten Wert  $b_j$  und danach  $\hat{C}$ . Nach der ersten Messung befindet sich das System mit der Wahrscheinlichkeit  $|\langle b_j | a_0 \rangle|^2$  im Zustand  $|b_j\rangle$ . Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß die zweite Messung den Meßwert  $c_i$  ergibt, ist dann

$$P(a_0 \rightarrow b_j \rightarrow c_i) = |\langle c_i | b_j \rangle|^2 |\langle b_j | a_0 \rangle|^2.$$

2. Wir messen zuerst  $\hat{B}$  ohne Filter und danach  $\hat{C}$ . Nach der ersten Messung ist das System im **gemischten** Zustand mit der Dichtematrix

$$\hat{\rho} = \sum_j |\langle b_j | a_0 \rangle|^2 |b_j\rangle \langle b_j|.$$

Daraus folgt für die Wahrscheinlichkeit des Meßwertes  $c_i$  bei der zweiten Messung

$$P(a_0 \rightarrow (b_j) \rightarrow c_i) = \langle c_i | \hat{\rho} | c_i \rangle = \sum_j |\langle b_j | a_0 \rangle|^2 |\langle c_i | b_j \rangle|^2$$

3. Wir messen nur  $\hat{C}$ . Hier ist die Wahrscheinlichkeit für den Wert  $c_i$  gegeben durch  $P(a_0 \rightarrow c_i) = |\langle c_i | a_0 \rangle|^2$ . Um dies besser mit dem zweiten Fall vergleichen zu können, schreiben wir diesen Ausdruck um zu

$$P(a_0 \rightarrow c_i) = \left| \sum_j \langle c_i | b_j \rangle \langle b_j | a_0 \rangle \right|^2.$$

### 9.3 Zusammensetzung quantenmechanischer Systeme

Seien zunächst **zwei** Quantensysteme  $S_i$ ,  $i = 1, 2$ , gegeben, mit Hilberträumen  $\mathcal{H}_i$  und zugehörigen Observablenalgebren  $\mathcal{A}_1 = \mathbf{B}(\mathcal{H}_1)$  und  $\mathcal{A}_2 = \mathbf{B}(\mathcal{H}_2)$ . Wie wir aus Teil I wissen, beschreibt man das aus  $S_1$  und  $S_2$  zusammengesetzte System durch Bildung des **Tensorproduktes**  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ . Wir erinnern an die entsprechenden mathematischen Grundlagen:

Seien  $\varphi \in \mathcal{H}_1$  und  $\psi \in \mathcal{H}_2$ . Dann ist ihr Tensorprodukt  $\varphi \otimes \psi \in L^*(\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2, \mathbb{C})$  definiert als zweifach antilineare Form auf  $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$ :

$$(\varphi \otimes \psi)(h_1, h_2) := \langle h_1 | \varphi \rangle \langle h_2 | \psi \rangle, \quad (9.16)$$

für beliebige  $h_1 \in \mathcal{H}_1$ ,  $h_2 \in \mathcal{H}_2$ . Antilinearität, etwa in der ersten Komponente, bedeutet:

$$(\varphi \otimes \psi)(\alpha h_1' + \beta h_1'', h_2) = \langle \alpha h_1' + \beta h_1'' | \varphi \rangle \langle h_2 | \psi \rangle = \alpha^* (\varphi \otimes \psi)(h_1', h_2) + \beta^* (\varphi \otimes \psi)(h_1'', h_2).$$

Sei  $\mathcal{E}$  die Menge der endlichen Linearkombinationen solcher Elemente. Wir definieren das folgende Skalarprodukt in  $\mathcal{E}$ :

$$\langle \varphi \otimes \psi | \varphi' \otimes \psi' \rangle = \langle \varphi | \varphi' \rangle \langle \psi | \psi' \rangle. \quad (9.17)$$

Durch Linearität wird diese Definition auf beliebige Elemente aus  $\mathcal{E}$  fortgesetzt. Damit entsteht ein Prähilbertraum  $\mathcal{H}$ . Die Vervollständigung von  $\mathcal{H}$  im Sinne dieses Skalarproduktes heißt **Tensorprodukt der Hilberträume**  $\mathcal{H}_1$  und  $\mathcal{H}_2$  und wird mit  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  bezeichnet.

### Bemerkungen 9.3

- i) Aus abstrakt algebraischer Sicht ist folgende Definition natürlich:  $\varphi \otimes \psi$  ist eine Bilinearform auf  $\mathcal{H}_1^* \times \mathcal{H}_2^*$ , definiert durch

$$(\varphi \otimes \psi)(h_1^*, h_2^*) := h_1^*(\varphi) \cdot h_2^*(\psi),$$

aber wegen der Hilbertraumstruktur existiert folgende natürliche Identifizierung:

$$h_1^*(\varphi) = \langle h_1 | \varphi \rangle, \quad h_2^*(\psi) = \langle h_2 | \psi \rangle.$$

- ii) Aus der Definition folgt:

$$\begin{aligned} \varphi \otimes (\alpha\psi_1 + \beta\psi_2) &= \alpha\varphi \otimes \psi_1 + \beta\varphi \otimes \psi_2, \\ (\alpha\varphi_1 + \beta\varphi_2) \otimes \psi &= \alpha\varphi_1 \otimes \psi + \beta\varphi_2 \otimes \psi. \end{aligned}$$

Man beachte, daß im allgemeinen  $\varphi \otimes \psi \neq \psi \otimes \varphi$  ist.

- iii) Für das Tensorprodukt von Hilbertraumvektoren werden die folgenden, synonymen Schreibweisen verwendet:

$$\chi \otimes \varphi \equiv |\chi\rangle \otimes |\varphi\rangle \equiv |\chi \otimes \varphi\rangle \equiv |\chi\rangle |\varphi\rangle.$$

Vektoren der Form  $|\psi\rangle = |\chi\rangle \otimes |\varphi\rangle$  heißen "einfach" oder "separierbar". Seien  $\{|\chi_i\rangle\}$  und  $\{|\varphi_\alpha\rangle\}$  Basen in  $\mathcal{H}_1$  bzw.  $\mathcal{H}_2$ , dann ist  $\{|\chi_i\rangle \otimes |\varphi_\alpha\rangle\}$  eine Basis in  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ . Ein beliebiger Vektor aus  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  kann also als komplexe Linearkombination dieser Vektoren dargestellt werden:

$$|\phi\rangle = \sum_{i,\alpha} c_{i,\alpha} |\chi_i\rangle \otimes |\varphi_\alpha\rangle.$$

Im endlich-dimensionalen Fall erhalten wir für  $\dim \mathcal{H}_1 = n$  und  $\dim \mathcal{H}_2 = m$ :

$$\dim \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = m \cdot n.$$

- iv) Seien  $\mathcal{H}_1 = L^2(X_1, d\mu_1)$  und  $\mathcal{H}_2 = L^2(X_2, d\mu_2)$  separable Hilberträume. Dann existiert ein natürlicher Isomorphismus:

$$L^2(X_1, d\mu_1) \otimes L^2(X_2, d\mu_2) \cong L^2(X_1 \times X_2, d\mu_1 \otimes d\mu_2),$$

definiert durch

$$\chi \otimes \varphi(x, y) := \chi(x) \varphi(y).$$

Seien insbesondere  $\{\chi_k\}$  und  $\{\varphi_l\}$  Basen in  $L^2(X_1, d\mu_1)$  bzw.  $L^2(X_2, d\mu_2)$ . Dann ist  $\{\chi_k \cdot \varphi_l\}$  eine Basis in  $L^2(X_1 \times X_2, d\mu_1 \otimes d\mu_2)$ <sup>4</sup>.

- v) Völlig analog werden mehrfache Tensorprodukte gebildet:

$$\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_n.$$

Es gibt natürliche Isomorphismen:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1 \otimes (\mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_3) &\cong (\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2) \otimes \mathcal{H}_3 \\ \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 &\cong \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_1. \end{aligned}$$

<sup>4</sup>siehe [Reed/Simon], Teil I, S. 66

Seien nun  $\hat{A}_1 \in \mathbf{B}(\mathcal{H}_1)$  und  $\hat{A}_2 \in \mathbf{B}(\mathcal{H}_2)$  (zunächst beschränkte) Observable. Wir definieren ihr Tensorprodukt durch

$$(\hat{A}_1 \otimes \hat{A}_2)|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle := \hat{A}_1|\varphi\rangle \otimes \hat{A}_2|\psi\rangle \quad (9.18)$$

auf einfachen Tensoren und setzen linear fort<sup>5</sup>. Sind die Operatoren unbeschränkt, so ist ihr Tensorprodukt ebenfalls durch obige Formel definiert, es sind aber dann Bereichsfragen zu diskutieren<sup>6</sup>. Es gelten die folgenden **Rechenregeln** (vgl HA Nr.1):

- i)  $(\hat{A}_1 \otimes \hat{A}_2)(\hat{B}_1 \otimes \hat{B}_2) = \hat{A}_1\hat{B}_1 \otimes \hat{A}_2\hat{B}_2$ .
- ii)  $(\hat{A}_1 \otimes \hat{A}_2)^\dagger = \hat{A}_1^\dagger \otimes \hat{A}_2^\dagger$ .
- iii) Aus  $\hat{A}_1 \geq 0$  und  $\hat{A}_2 \geq 0$  folgt  $\hat{A}_1 \otimes \hat{A}_2 \geq 0$ .
- iv) Sind  $\hat{A}_1$  und  $\hat{A}_2$  beschränkt, so gilt

$$\|\hat{A}_1 \otimes \hat{A}_2\| = \|\hat{A}_1\| \cdot \|\hat{A}_2\|.$$

- v) Sind  $\hat{A}_1$  und  $\hat{A}_2$  Spurklasseoperatoren, dann ist  $\hat{A}_1 \otimes \hat{A}_2$  ebenfalls Spurklasseoperator und es gilt:

$$\text{Tr}(\hat{A}_1 \otimes \hat{A}_2) = \text{Tr} \hat{A}_1 \cdot \text{Tr} \hat{A}_2.$$

## 9.4 Statistische Interpretation zusammengesetzter Operatoren

Wie wir aus Teil I wissen, hat die Messung von Projektoren die logische Interpretation von JA–NEIN–Fragen. Haben wir ein zusammengesetztes System und Projektoren  $\hat{E}_1$  und  $\hat{E}_2$  in den Teilsystemen, so können wir deren Tensorprodukt  $\hat{E}_1 \otimes \hat{E}_2$  bilden. Diese Observable repräsentiert eine **Korrelationsmessung**. Ihre Interpretation im Sinne des Meßprozesses lautet:

“Führe die Messungen  $\hat{E}_1$  am System 1 und  $\hat{E}_2$  am System 2 aus und interpretiere als JA-Ereignis die Fälle, bei denen beide Instrumente JA liefern.”

Diese Interpretation ist sinnvoll, denn  $\hat{E}_1 \otimes \hat{E}_2$  ist wieder ein Projektor:

$$(\hat{E}_1 \otimes \hat{E}_2)^2|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle = \hat{E}_1^2|\varphi\rangle \otimes \hat{E}_2^2|\psi\rangle = \hat{E}_1|\varphi\rangle \otimes \hat{E}_2|\psi\rangle = \hat{E}_1 \otimes \hat{E}_2|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle.$$

Analog bedeutet  $\hat{E}_1 \otimes \mathbf{1}$ :

“Führe die Messung  $\hat{E}_1$  am System 1 aus und ignoriere das System 2.”

Offensichtlich definiert jedes Paar  $\hat{E}_1$  und  $\hat{E}_2$  Zerlegungen

$$\mathcal{H}_i = \hat{E}_i\mathcal{H} \oplus (\mathbf{1} - \hat{E}_i)\mathcal{H}, \quad i = 1, 2,$$

und damit die folgende Zerlegung der Einheit im Tensorprodukt  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ :

$$\mathbf{1} = \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} = \begin{array}{cccc} \hat{E}_1 & \otimes & \hat{E}_2 & \\ ja & & ja & \end{array} + \begin{array}{cccc} \hat{E}_1 & \otimes & (\mathbf{1} - \hat{E}_2) & \\ ja & & nein & \end{array} + \begin{array}{cccc} (\mathbf{1} - \hat{E}_1) & \otimes & \hat{E}_2 & \\ nein & & ja & \end{array} + \begin{array}{cccc} (\mathbf{1} - \hat{E}_1) & \otimes & (\mathbf{1} - \hat{E}_2) & \\ nein & & nein & \end{array}$$

mit darunterstehender statistischer Interpretation jedes Summanden.

Wir können nun, völlig analog, Tensorprodukte  $\hat{A}_1 \otimes \hat{A}_2$  beliebiger Observabler  $\hat{A}_i \in \mathcal{A}_i$  bilden und diese als Korrelationsmessungen interpretieren. Durch Einsetzen der Spektralzerlegungen

$$\hat{A}_1 = \sum_j \lambda_j^{(1)} \hat{P}_j^{(1)}, \quad \hat{A}_2 = \sum_k \lambda_k^{(2)} \hat{P}_k^{(2)}$$

<sup>5</sup>Dies sind Elemente im Tensorprodukt  $\mathcal{A}_1 \otimes \mathcal{A}_2$  der Observablenalgebren  $\mathcal{A}_1$  und  $\mathcal{A}_2$ , auf dessen exakte Definition wir hier verzichten

<sup>6</sup>siehe [Reed/Simon], Teil I, VIII.10

entsteht eine Linearkombination von Tensorprodukten der Spektralprojektoren, damit wird jede solche Messung auf JA–NEIN–Messungen zurückgeführt. Ist  $\hat{\rho}$  die Dichtematrix des zusammengesetzten Systems, so hat der Erwartungswert  $\text{Tr}(\hat{\rho} \cdot (\hat{A}_1 \otimes \hat{A}_2))$  die folgende Interpretation:

“Führe die Messungen  $\hat{A}_1$  und  $\hat{A}_2$  an den Teilsystemen 1 und 2 aus und nimm das **Produkt der Meßwerte** des kombinierten Experiments.”

Genauer gesagt, erhalten wir aus (9.11), dass  $\lambda_j^{(1)} \lambda_k^{(2)}$  mit der Wahrscheinlichkeit

$$\text{Tr} \left( \hat{\rho} \hat{P}_j^{(1)} \otimes \hat{P}_k^{(2)} \right)$$

gemessen wird.

Die **Summe der Meßwerte** des kombinierten Experiments wird offensichtlich durch die Observable  $\hat{A}_1 \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \hat{A}_2$  repräsentiert. Für den mit  $\hat{\rho}$  berechneten Erwartungswert  $\text{Tr}(\hat{\rho} \cdot (\hat{A}_1 \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \hat{A}_2))$  hat man eine analoge Interpretation.

Natürlich können wir das Konzept der Zusammensetzung auch auf die **Präparationen von gemischten Zuständen** anwenden. Seien  $\hat{\rho}_1$  und  $\hat{\rho}_2$  Dichtematrizen in den Systemen 1 und 2. Dann ist  $\hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2$  offensichtlich wieder eine Dichtematrix, also eine Präparation des zusammengesetzten Systems mit folgender Interpretation:

“Wende beide Präparationsverfahren in den Teilsystemen **unabhängig** voneinander an und interpretiere das so erzeugte Paar von Systemen als zusammengesetztes System.”

Wir bezeichnen die Teilsysteme 1 und 2 in diesem Falle als **statistisch unabhängig**. Aus den Regeln des letzten Abschnittes folgt für statistisch unabhängige Teilsysteme:

$$\text{Tr}((\hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2)(\hat{A}_1 \otimes \hat{A}_2)) = \text{Tr}(\hat{\rho}_1 \hat{A}_1 \otimes \hat{\rho}_2 \hat{A}_2) = \text{Tr}(\hat{\rho}_1 \hat{A}_1) \cdot \text{Tr}(\hat{\rho}_2 \hat{A}_2).$$

Wir definieren nun einen Begriff, der für alle weiteren Betrachtungen von fundamentaler Bedeutung ist. Sei  $\hat{\rho}$  eine beliebige Dichtematrix des Gesamtsystems, (also nicht unbedingt der Gestalt  $\hat{\rho} = \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2$ ). Wir definieren die **reduzierte Dichtematrix**  $\hat{\rho}^{(1)} \in B(\mathcal{H}_1)$  durch

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^{(1)} \hat{A}_1) := \text{Tr}(\hat{\rho}(\hat{A}_1 \otimes \mathbf{1})), \quad (9.19)$$

für alle  $\hat{A}_1 \in B(\mathcal{H}_1)$ . Genauso definieren wir die Reduktion  $\hat{\rho}^{(2)}$  von  $\hat{\rho}$  auf das System 2,

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^{(2)} \hat{A}_2) := \text{Tr}(\hat{\rho}(\mathbf{1} \otimes \hat{A}_2)), \quad (9.20)$$

für alle  $\hat{A}_2 \in B(\mathcal{H}_2)$ .

Wir zeigen, daß  $\hat{\rho}^{(1)}$  durch **partielle Spurbildung** aus  $\hat{\rho}$  entsteht: Seien  $\{\chi_i\}$  und  $\{\varphi_\alpha\}$  Basen in  $\mathcal{H}_1$  bzw.  $\mathcal{H}_2$ . Für die linke Seite von (9.19) haben wir:

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^{(1)} \hat{A}_1) = \sum_i \langle \chi_i | \hat{\rho}^{(1)} \hat{A}_1 | \chi_i \rangle = \sum_{i,k} \langle \chi_i | \hat{\rho}^{(1)} | \chi_k \rangle \langle \chi_k | \hat{A}_1 | \chi_i \rangle.$$

Wir berechnen die rechte Seite:

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\hat{\rho}(\hat{A}_1 \otimes \mathbf{1})) &= \sum_{i,\alpha} \langle \chi_i \otimes \varphi_\alpha | \hat{\rho}(\hat{A}_1 \otimes \mathbf{1}) | \chi_i \otimes \varphi_\alpha \rangle \\ &= \sum_{i,\alpha,k,\beta} \langle \chi_i \otimes \varphi_\alpha | \hat{\rho} | \chi_k \otimes \varphi_\beta \rangle \langle \chi_k \otimes \varphi_\beta | (\hat{A}_1 \otimes \mathbf{1}) | \chi_i \otimes \varphi_\alpha \rangle \\ &= \sum_{i,\alpha,k,\beta} \langle \chi_i \otimes \varphi_\alpha | \hat{\rho} | \chi_k \otimes \varphi_\beta \rangle \langle \chi_k | \hat{A}_1 | \chi_i \rangle \delta_{\alpha\beta} \\ &= \sum_{i,k,\alpha} \langle \chi_i \otimes \varphi_\alpha | \hat{\rho} | \chi_k \otimes \varphi_\alpha \rangle \langle \chi_k | \hat{A}_1 | \chi_i \rangle \end{aligned}$$

Der Vergleich von linker und rechter Seite liefert:

$$\langle \chi_i | \hat{\rho}^{(1)} | \chi_k \rangle = \sum_{\alpha} \langle \chi_i \otimes \varphi_{\alpha} | \hat{\rho} | \chi_k \otimes \varphi_{\alpha} \rangle \quad (9.21)$$

bzw. in Matrixschreibweise:

$$(\hat{\rho}^{(1)})_{ik} = \sum_{\alpha} \hat{\rho}_{i\alpha, k\alpha}.$$

Man hat sich davon zu überzeugen, daß  $\hat{\rho}^{(1)}$  tatsächlich eine Dichtematrix ist:

a) Natürlich ist mit  $\hat{\rho}$  auch  $\hat{\rho}^{(1)}$  beschränkt. Da  $\hat{\rho}$  symmetrisch ist, folgt aus (9.21)

$$(\hat{\rho}^{(1)})_{ki}^* = (\hat{\rho}^{(1)})_{ik},$$

also ist auch  $\hat{\rho}^{(1)}$  symmetrisch, und damit selbstadjungiert.

b) Es gilt  $\langle \psi | \hat{\rho} | \psi \rangle \geq 0$  für alle  $\psi \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ , also insbesondere  $\langle \phi \otimes \varphi_{\alpha} | \hat{\rho} | \phi \otimes \varphi_{\alpha} \rangle \geq 0$ , für einen beliebigen Vektor  $\phi \in \mathcal{H}_1$ , und damit

$$\sum_{\alpha} \langle \phi \otimes \varphi_{\alpha} | \hat{\rho} | \phi \otimes \varphi_{\alpha} \rangle \geq 0.$$

Zerlegen wir  $|\phi\rangle = \sum_i c_i |\chi_i\rangle$  so ergibt sich mit (9.21):

$$\sum_{\alpha} \langle \phi \otimes \varphi_{\alpha} | \hat{\rho} | \phi \otimes \varphi_{\alpha} \rangle = \sum_{i,k,\alpha} c_i^* c_k \langle \chi_i \otimes \varphi_{\alpha} | \hat{\rho} | \chi_k \otimes \varphi_{\alpha} \rangle = \sum_{i,k} c_i^* c_k \langle \chi_i | \hat{\rho}^{(1)} | \chi_k \rangle = \langle \phi | \hat{\rho}^{(1)} | \phi \rangle,$$

und daraus die Positivität von  $\hat{\rho}^{(1)}$ .

c) Setzen wir in der definierenden Gleichung (9.19)  $\hat{A}_1 = \mathbf{1}$ , so folgt sofort  $\text{Tr} \hat{\rho}^{(1)} = 1$ .

Sei  $\hat{\rho} = \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2$ , dann sind die reduzierten Dichtematrizen mit  $\hat{\rho}_1$  und  $\hat{\rho}_2$  identisch, z.B.:

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^{(1)} \hat{A}_1) = \text{Tr}((\hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2)(\hat{A}_1 \otimes \mathbf{1})) = \text{Tr}(\hat{\rho}_1 \hat{A}_1) \cdot \text{Tr}(\hat{\rho}_2) = \text{Tr}(\hat{\rho}_1 \hat{A}_1).$$

Im allgemeinen ist  $\hat{\rho}$  **nicht** in Produktform. Dann sind die Teilsysteme korreliert. Man sagt, ein Zustand sei **unverschränkt**, falls er sich als Linearkombination (mit positiven Koeffizienten) von Produktzuständen darstellen läßt, d.h.

$$\hat{\rho} = \sum_j r_j \hat{\rho}_1^j \otimes \hat{\rho}_2^j, \quad r_j > 0. \quad (9.22)$$

Existiert eine solche Darstellung nicht, so heißt der durch  $\hat{\rho}$  definierte Zustand **verschränkt**.

Im allgemeinen ist es schwierig zu entscheiden, ob ein Zustand verschränkt ist, oder nicht. Die Suche nach handhabbaren Kriterien ist Gegenstand aktueller Forschungen. Reinen Zuständen sieht man dagegen leicht an, ob sie verschränkt sind, siehe die Bemerkung unten.

Wir verschaffen uns nun noch ein wichtiges technisches Hilfsmittel: Sei  $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$  die Dichtematrix eines reinen Zustandes,  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ , und seien  $\{|\chi_i\rangle\}$  und  $\{|\varphi_{\alpha}\rangle\}$  wieder Basen in  $\mathcal{H}_1$  bzw.  $\mathcal{H}_2$ . Dann gilt:

$$|\psi\rangle = \sum_{i,\alpha} c_{i,\alpha} |\chi_i\rangle \otimes |\varphi_{\alpha}\rangle \equiv \sum_i |\chi_i\rangle \otimes |\lambda_i\rangle, \quad |\lambda_i\rangle = \sum_{\alpha} c_{i,\alpha} |\varphi_{\alpha}\rangle,$$

Sei  $\{|\chi_i\rangle\}$  eine Basis von Eigenvektoren der reduzierten Dichtematrix  $\hat{\rho}^{(1)}$ . Dann gilt  $\hat{\rho}^{(1)} = \sum_i p_i |\chi_i\rangle\langle\chi_i|$ . Andererseits berechnet man  $\hat{\rho}^{(1)}$  durch partielle Spurbildung:

$$\hat{\rho}^{(1)} = \text{Tr}_2(|\psi\rangle\langle\psi|) = \sum_{i,j} \langle \lambda_j | \lambda_i \rangle |\chi_i\rangle\langle\chi_j|.$$

Also gilt  $p_i \delta_{ij} = \langle \lambda_j | \lambda_i \rangle$ , d.h. die  $\{|\lambda_i\rangle\}$  sind automatisch auch orthogonal. Wir normieren sie,

$$|\chi'_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{p_i}} |\lambda_i\rangle,$$

und finden die **Gram–Schmidt–Zerlegung** des reinen Zustandes  $|\psi\rangle$  :

$$|\psi\rangle = \sum_i \sqrt{p_i} |\chi_i\rangle \otimes |\chi'_i\rangle. \quad (9.23)$$

Durch Berechnung der partiellen Spur in  $\mathcal{H}_1$  erhalten wir die Reduktion von  $\hat{\rho}$  auf das Untersystem 2:

$$\hat{\rho}^{(2)} = \text{Tr}_1(|\psi\rangle\langle\psi|) = \sum_i p_i |\chi'_i\rangle\langle\chi'_i|.$$

Die reduzierten Dichtematrizen  $\hat{\rho}^{(1)}$  und  $\hat{\rho}^{(2)}$  haben also die gleichen Eigenwerte. Allerdings sind im allgemeinen die Dimensionen von  $\mathcal{H}_1$  und  $\mathcal{H}_2$  verschieden, so daß die Zahl der Null–Eigenwerte von  $\hat{\rho}^{(1)}$  und  $\hat{\rho}^{(2)}$  im allgemeinen verschieden ist.

#### Bemerkungen 9.4

i) Hat  $\hat{\rho}^{(1)}$  (und damit auch  $\hat{\rho}^{(2)}$ ) keine entarteten Eigenwerte außer 0, dann ist die Gram–Schmidt–Zerlegung eindeutig, bis auf die Multiplikation von  $|\chi_i\rangle$  und  $|\chi'_i\rangle$  mit entgegengesetzten Phasen. Bei Entartung hat man die Freiheit unitärer Transformationen in jedem Eigenunterraum.

ii) a) Sei der reine Zustand  $|\psi\rangle$  ein Produktzustand,  $|\psi\rangle = |\chi\rangle \otimes |\varphi\rangle$ . Dann gilt

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| = |\chi\rangle\langle\chi| \otimes |\varphi\rangle\langle\varphi|,$$

d.h.  $\hat{\rho}$  ist nicht verschränkt. Die reduzierten Zustände sind in diesem Falle wieder rein, z.B.

$$\hat{\rho}^{(1)} = \text{Tr}_2 |\psi\rangle\langle\psi| = |\chi\rangle\langle\chi|.$$

b) Sei  $|\psi\rangle$  kein Produktzustand, d.h. mindesten zwei  $p_i$  in der Gram–Schmidt–Zerlegung von  $|\psi\rangle$  sind verschieden von Null. Dann ist  $\hat{\rho}$  offensichtlich verschränkt und die reduzierten Dichtematrizen sind gemischte Zustände.

Wir sehen also: Ein reiner Zustand ist **entweder ein Produktzustand oder er ist verschränkt** und die Reduktion eines **reinen** quantenmechanischen Zustandes auf ein Teilsystem ist im allgemeinen ein **gemischter Zustand**.

iii) Betrachtet man ein System als Teilsystem eines größeren Systems, dann kann aus einem gemischten Zustand ein reiner werden. Dies führt auf das Konzept der **Purifizierung**: Jeder gemischte Zustand  $\hat{\rho}$  auf  $\mathcal{H}$  kann zu einem reinen Zustand auf einem größeren Hilbertraum  $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'$  erweitert werden. Mehr noch, wählt man  $\mathcal{H}'$  so, daß seine Dimension gleich dem Rang  $n_{\hat{\rho}}$  von  $\hat{\rho}$  ist, so der reine Zustand (bis auf unitäre Transformationen) eindeutig bestimmt. Seien  $p_1, p_2, \dots$  die  $n_{\hat{\rho}}$  positiven Eigenwerte von  $\hat{\rho}$  (bei Entartung sind einige der  $p_i$  gleich) und sei  $\phi_1, \phi_2, \dots$  ein zugehöriges Orthonormalsystem in  $\mathcal{H}$ . Wir wählen ein beliebiges Orthonormalsystem  $\phi'_1, \phi'_2, \dots$  in  $\mathcal{H}'$  und setzen

$$|\psi\rangle := \sum_i \sqrt{p_i} |\phi_i\rangle \otimes |\phi'_i\rangle. \quad (9.24)$$

Wir nennen  $|\psi\rangle$  **Purifizierung** von  $\hat{\rho}$  und sehen, daß Purifizierungen in eineindeutiger Beziehung zur Menge der Basen in  $\mathcal{H}'$  stehen. Sie gehen also durch unitäre Transformationen auseinander hervor. (Wählt man  $\mathcal{H}'$  nicht minimal, also  $\dim \mathcal{H} > n_{\hat{\rho}}$ , so hat man natürlich eine größere Freiheit.) Schließlich bemerken wir noch, daß

$$\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}) = \langle\psi|(\hat{A} \otimes \mathbf{1})|\psi\rangle, \quad (9.25)$$

für alle  $\hat{A} \in B(\mathcal{H})$ , gilt<sup>7</sup>.

<sup>7</sup>Diese Gleichung kann als abstrakte Definition der Purifizierung  $\psi$  verwendet werden

Wir verwenden dieses Konzept zur (früher angekündigten) Herleitung der **Lüders-Regel** für die Reduktion gemischter Zustände: Sei  $\hat{\varrho}$  der Zustand des Systems vor der Messung und sei  $\hat{A}$  die zu messende Observable, mit Spektralzerlegung  $\hat{A} = \sum_i a_i \hat{P}_i$ . Sei  $|\psi\rangle$  eine Purifizierung von  $\hat{\varrho}$  und

$$\hat{A} \otimes \mathbf{1} = \sum_i a_i \hat{P}_i \otimes \mathbf{1}$$

die Ausdehnung von  $\hat{A}$  auf  $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'$ . Die Reduktion des reinen Zustandes  $\psi$  durch Messung ist, mit (9.24), gegeben durch

$$|\psi\rangle \mapsto |\varphi_k\rangle := (\hat{P}_k \otimes \mathbf{1})|\psi\rangle = \sum_i \sqrt{p_i} \hat{P}_k |\phi_i\rangle \otimes |\phi'_i\rangle,$$

mit Wahrscheinlichkeit

$$\langle \psi | (\hat{P}_k \otimes \mathbf{1}) | \psi \rangle = \text{Tr}(\hat{\varrho} \hat{P}_k),$$

wobei (9.25) verwendet wurde. Aus der Sicht des Systems  $\mathcal{H}$  entsteht also der (noch nicht normierte) gemischte Zustand

$$\hat{\varrho}_k = \text{Tr}_{\mathcal{H}'} (|\varphi_k\rangle \langle \varphi_k|) = \sum_i p_i \hat{P}_k |\phi_i\rangle \langle \phi_i| \hat{P}_k,$$

also

$$\hat{\varrho}_k = \hat{P}_k \hat{\varrho} \hat{P}_k.$$

Nach Normierung erhalten wir genau (9.12).

- iv) Ein reiner Zustand  $|\psi\rangle$  heißt **maximal verschränkt**, wenn die Eigenwerte der reduzierten Dichtematrizen **alle gleich sind**. Dann folgt aus  $\text{Tr} \hat{\varrho} = 1$ :

$$\hat{\varrho}^{(1)} = \hat{\varrho}^{(2)} = \frac{1}{d} \mathbf{1},$$

mit  $d = \dim \mathcal{H}_1 = \dim \mathcal{H}_2$  und die Gram-Schmidt-Zerlegung (9.23) hat die Form

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_j |\phi_j^{(1)}\rangle \otimes |\phi_j^{(2)}\rangle.$$

Ist  $|\psi\rangle$  gegeben und wurde eine Basis  $\{|\phi_j^{(1)}\rangle\}$  in  $\mathcal{H}_1$  gewählt, dann ist die zugehörige Basis  $\{|\phi_j^{(2)}\rangle\}$  in  $\mathcal{H}_2$  eindeutig bestimmt. Im weiteren nennen wir maximal verschränkte reine Zustände auch **EPR-Vektoren**.

Wir betrachten den Fall, daß das System aus zwei gleichen Kopien zusammengesetzt ist,  $\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$ . Dann kann man in  $\tilde{\mathcal{H}}$  immer eine Basis, bestehend aus EPR-Vektoren, wählen: Sei  $|\psi\rangle \in \tilde{\mathcal{H}}$  ein Zustandsvektor und  $\{|\phi_i\rangle\}$  eine Basis in  $\mathcal{H}$ . Dann existieren eindeutig bestimmte Vektoren  $\{|\phi'_i\rangle\}$ , so daß

$$|\psi\rangle = \sum_j |\phi_j\rangle \otimes |\phi'_j\rangle$$

gilt. Aus (9.21) folgt:

$$\begin{aligned} \langle \phi_i | \hat{\varrho}^{(1)} | \phi_k \rangle &= \sum_{j,l,m} \langle \phi_i \otimes \phi_j | \phi_l \otimes \phi'_l \rangle \langle \phi_m \otimes \phi'_m | \phi_k \otimes \phi_j \rangle \\ &= \sum_{j,l,m} \delta_{il} \langle \phi_j | \phi'_l \rangle \delta_{mk} \langle \phi'_m | \phi_j \rangle \\ &= \sum_j \langle \phi'_k | \phi_j \rangle \langle \phi_j | \phi'_i \rangle = \langle \phi'_k | \phi'_i \rangle, \end{aligned}$$

d.h. es gilt  $\hat{\rho}_1 = \frac{1}{d}\mathbf{1}$  genau dann, wenn die Vektoren  $\{\sqrt{d}|\phi'_j\rangle\}$  auch eine Basis in  $\mathcal{H}$  bilden. Damit ist  $|\psi\rangle$  ein EPR-Vektor genau dann, wenn ein unitärer Operator  $\hat{U}$  in  $\mathcal{H}$  existiert, so daß gilt:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_j |\phi_j\rangle \otimes \hat{U}|\phi_j\rangle.$$

Sei nun  $\{|\psi_j\rangle\}$  eine Familie von EPR-Vektoren und seien  $\{\hat{U}_j\}$  die zugehörigen unitären Operatoren. Es gilt:

$$\langle \psi_k | \psi_l \rangle = \frac{1}{d} \text{Tr}(\hat{U}_k^\dagger \hat{U}_l),$$

d.h. um eine Basis aus EPR-Vektoren zu finden, muß man  $d^2$  unitäre Matrizen mit der Eigenschaft

$$\text{Tr}(\hat{U}_k^\dagger \hat{U}_l) = 0; \quad k \neq l$$

angeben. Solche Matrizen kann man immer finden, siehe Ch. H. Bennett et al., Phys. Rev. Lett., Vol. 70, No. 13 (1993) 1895–1899. Für  $d = 2$  erfüllen die Matrizen  $\{\mathbf{1}, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$  diese Forderung. Startet man von der Standardbasis im Hilbertraum  $\mathcal{H} \cong \mathbb{C}^2$ , so erhält man mit ihnen die Bellsche Basis in  $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$  (2q-Bit-Hilbertraum):

$$\begin{aligned} \varphi^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) \\ \varphi^- &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle) \\ \psi^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle + |01\rangle) \\ \psi^- &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle - |01\rangle). \end{aligned} \tag{9.26}$$

Dabei wurden die folgenden Bezeichnungen verwendet:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |\uparrow\rangle = |0\rangle, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle = |1\rangle.$$

## 9.5 Spinkorrelationen

Wir betrachten den Zerfall eines Spin-0-Teilchens in zwei Spin-1/2-Teilchen, z.B.  $\pi^0 \rightarrow e^+ + e^-$ , und bezeichnen die Teilchen jeweils mit (1) und (2). Wir diskutieren die Spinnmessung dieser Teilchen mit Hilfe einer Stern-Gerlach-Apparatur, siehe Abb. 9.1.

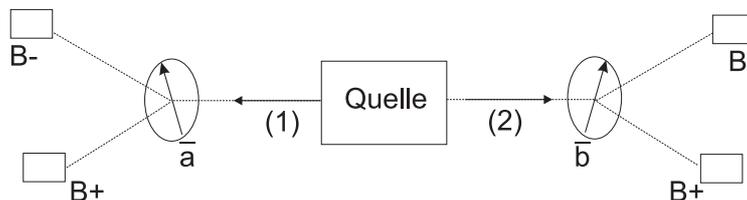


Abbildung 9.1: Schematische Darstellung der Stern-Gerlach-Apparatur. Die Vektoren  $\vec{a}$  bzw.  $\vec{b}$  geben die Richtungen der Magnetfelder an. Die Detektoren  $B^-$  und  $B^+$  messen den Spin in Feldrichtung “up” bzw. entgegen der Feldrichtung “down”.

Seien  $\mathcal{H}_1 \cong \mathbb{C}^2$  und  $\mathcal{H}_2 \cong \mathbb{C}^2$  die Hilberträume der Teilsysteme (1) und (2) und seien  $\hat{S}^{(1)}$  und  $\hat{S}^{(2)}$  die Spinoperatoren der beiden Teilchen. Der Hilbertraum des zusammengesetzten Systems ist  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$

und die beiden Spinoperatoren sind in  $\mathcal{H}$  repräsentiert durch  $\hat{S}^{(1)} \otimes \mathbf{1}$  und  $\mathbf{1} \otimes \hat{S}^{(2)}$ . Wir bemerken, daß diese Operatoren vertauschen. Ihre Eigenvektoren seien mit  $|(1)\vec{a}\pm\rangle$  bzw.  $|(2)\vec{b}\pm\rangle$  bezeichnet. Der **Gesamtspin** ist gegeben durch

$$\hat{S} = \hat{S}^{(1)} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \hat{S}^{(2)}.$$

Einzelmessungen der Projektionen des Spins auf die die senkrecht zum Strahl (aber ansonsten beliebig) eingestellten Richtungen  $\vec{a}$  bzw.  $\vec{b}$  werden durch die Observablen  $\vec{a}\hat{S}^{(1)} \otimes \mathbf{1}$  bzw.  $\mathbf{1} \otimes \vec{b}\hat{S}^{(2)}$  beschrieben. In  $\mathcal{H}$  haben wir die folgende Tensorproduktbasis von Eigenvektoren:

$$|(1)\vec{a}+\rangle \otimes |(2)\vec{b}+\rangle, |(1)\vec{a}-\rangle \otimes |(2)\vec{b}-\rangle, |(1)\vec{a}+\rangle \otimes |(2)\vec{b}-\rangle, |(1)\vec{a}-\rangle \otimes |(2)\vec{b}+\rangle.$$

Die Observablen  $2\vec{a}\hat{S}^{(1)} \otimes \mathbf{1}$  und  $\mathbf{1} \otimes 2\vec{b}\hat{S}^{(2)}$  haben in dieser Basis die Eigenwerte  $(+1, -1, +1, -1)$  bzw.  $(+1, -1, -1, +1)$ .

### Bemerkungen 9.5

Wir beschreiben die Beziehung zwischen der Basis  $|\vec{a}\pm\rangle$  und der Standardbasis  $|\pm\rangle$ , für die  $\vec{a} = \vec{e}_3$  gilt: Jeden Vektor  $\vec{a}$  erhalten wir aus  $\vec{e}_3$  durch Drehung mit einem Winkel  $\theta$  um die Achse, definiert durch den Einheitsvektor

$$\vec{n} = \frac{\vec{e}_3 \times \vec{a}}{|\vec{e}_3 \times \vec{a}|}.$$

Wir bezeichnen  $\vec{\Theta} = \theta\vec{n}$ . Im nächsten Kapitel werden wir sehen, daß

$$|\vec{a}\pm\rangle = e^{-i\vec{\Theta}\cdot\hat{S}}|\pm\rangle, \quad \vec{a}\cdot\hat{S} = e^{-i\vec{\Theta}\cdot\hat{S}}\hat{S}_3e^{i\vec{\Theta}\cdot\hat{S}}$$

gilt. Man berechnet

$$e^{-i\vec{\Theta}\cdot\hat{S}} = \cos\frac{\theta}{2}\mathbf{1} - i2\vec{\Theta}\cdot\hat{S}\sin\frac{\theta}{2}.$$

Dies liefert

$$|\vec{a}\pm\rangle = \left( \cos\frac{\theta}{2}\mathbf{1} - i2\vec{\Theta}\cdot\hat{S}\sin\frac{\theta}{2} \right) |\pm\rangle.$$

**Gemeinsame Messungen der Spinprojektionen** werden durch die **Spinkorrelationsvariable**

$$2\vec{a}\cdot\hat{S}^{(1)} \otimes 2\vec{b}\cdot\hat{S}^{(2)}, \quad (9.27)$$

beschrieben. In obiger Tensorproduktbasis hat diese Observable die Eigenwerte  $(+1, +1, -1, -1)$ .

Nun werden  $N$ -mal **simultan** die Spins gemessen,  $N \gg 1$ . Die erhaltenen Meßergebnisse werden mit  $N_{++}$ ,  $N_{+-}$ ,  $N_{-+}$  und  $N_{--}$  bezeichnet. ( $N_{++}$  ist die Anzahl der Ereignisse, bei denen auf beiden Seiten die Detektoren  $B_+$  ansprechen usw.) Natürlich gilt

$$N = N_{++} + N_{+-} + N_{-+} + N_{--}.$$

Seien  $E_1(\vec{a})$ ,  $E_2(\vec{b})$  und  $E(\vec{a}, \vec{b})$  die **statistischen Mittelwerte** der Messung von  $2\vec{a}\cdot\hat{S}^{(1)} \otimes \mathbf{1}$ ,  $\mathbf{1} \otimes 2\vec{b}\cdot\hat{S}^{(2)}$  und  $2\vec{a}\cdot\hat{S}^{(1)} \otimes 2\vec{b}\cdot\hat{S}^{(2)}$ . Dann gilt:

$$\begin{aligned} E_1(\vec{a}) &= \frac{1}{N}(N_{++} + N_{+-} - N_{-+} - N_{--}) \\ E_2(\vec{b}) &= \frac{1}{N}(N_{++} - N_{+-} + N_{-+} - N_{--}) \\ E(\vec{a}, \vec{b}) &= \frac{1}{N}(N_{++} - N_{+-} - N_{-+} + N_{--}). \end{aligned} \quad (9.28)$$

Im Rahmen der Quantenmechanik sind diese Größen durch die **Erwartungswerte** der Observablen  $2\vec{a} \cdot \hat{S}^{(1)} \otimes \mathbf{1}$ ,  $\mathbf{1} \otimes 2\vec{b} \cdot \hat{S}^{(2)}$  und  $2\vec{a} \cdot \hat{S}^{(1)} \otimes 2\vec{b} \cdot \hat{S}^{(2)}$  in dem durch das Experiment präparierten Zustand gegeben. Wir nehmen an, daß der Singulettzustand

$$|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|(1)+\rangle \otimes |(2)-\rangle - |(1)-\rangle \otimes |(2)+\rangle) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

präpariert wurde. Dies entspricht der eingangs gemachten Annahme, daß der Spin des Gesamtsystems verschwindet. Man erhält die folgenden Resultate, vgl. Hausaufgabe Nr. 2:

$$\langle\phi|2\vec{a} \cdot \hat{S}^{(1)} \otimes \mathbf{1}|\phi\rangle = 0 \quad (9.29)$$

$$\langle\phi|\mathbf{1} \otimes 2\vec{b} \cdot \hat{S}^{(2)}|\phi\rangle = 0 \quad (9.30)$$

$$\langle\phi|2\vec{a} \cdot \hat{S}^{(1)} \otimes 2\vec{b} \cdot \hat{S}^{(2)}|\phi\rangle = -\vec{a} \cdot \vec{b}. \quad (9.31)$$

Für die im weiteren besonders wichtige Gleichung (9.31) geben wir einen eleganten Beweis an. Man findet zunächst die folgenden Identitäten:

$$\begin{aligned} (\vec{a} \cdot \hat{S}_i)^2 &= \frac{1}{4}|\vec{a}|^2, \\ (\vec{a} \cdot \hat{S}_i)(\vec{b} \cdot \hat{S}_i) + (\vec{b} \cdot \hat{S}_i)(\vec{a} \cdot \hat{S}_i) &= \frac{1}{2}\vec{a} \cdot \vec{b}. \end{aligned} \quad (9.32)$$

Da der Gesamtspin gleich 0 ist, gilt:

$$(\hat{S}^{(1)} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \hat{S}^{(2)})|\phi\rangle = 0. \quad (9.33)$$

Damit ist auch die Projektion des Spinoperators auf eine beliebige Richtung in der Wirkung auf  $|\phi\rangle$  gleich 0. Verwenden wir dies, zusammen mit (9.32), so ergibt sich

$$\begin{aligned} &\langle\phi|2\vec{a} \cdot \hat{S}^{(1)} \otimes 2\vec{b} \cdot \hat{S}^{(2)}|\phi\rangle \\ &= 2\langle(\vec{a} \cdot \hat{S}^{(1)} \otimes \mathbf{1})\phi|(\mathbf{1} \otimes \vec{b} \cdot \hat{S}^{(2)})\phi\rangle + 2\langle(\mathbf{1} \otimes \vec{b} \cdot \hat{S}^{(2)})\phi|(\vec{a} \cdot \hat{S}^{(1)} \otimes \mathbf{1})\phi\rangle \\ &\stackrel{(9.33)}{=} -2\langle(\vec{a} \cdot \hat{S}^{(1)} \otimes \mathbf{1})\phi|(\vec{b} \cdot \hat{S}^{(1)} \otimes \mathbf{1})\phi\rangle - 2\langle(\vec{b} \cdot \hat{S}^{(1)} \otimes \mathbf{1})\phi|(\vec{a} \cdot \hat{S}^{(1)} \otimes \mathbf{1})\phi\rangle \\ &= -2\langle\phi|((\vec{a} \cdot \hat{S}^{(1)})(\vec{b} \cdot \hat{S}^{(1)}) + (\vec{b} \cdot \hat{S}^{(1)})(\vec{a} \cdot \hat{S}^{(1)})) \otimes \mathbf{1}|\phi\rangle \\ &\stackrel{(9.32)}{=} -\vec{a} \cdot \vec{b}. \end{aligned}$$

Wir bemerken, daß die Relationen (9.29), (9.30) und (9.31) plausibel sind: Betrachten wir, z.B. (9.31) für den Fall  $\vec{a} = \vec{b}$ . Dann gilt  $E(\vec{a}, \vec{b}) = -1$ , und nach Vergleich mit (9.28) folgt:

$$N_{++} - N_{+-} - N_{-+} + N_{--} = -N = -(N_{++} + N_{+-} + N_{-+} + N_{--}),$$

also  $N_{++} + N_{--} = 0$ . Da alle  $N$  positive Zahlen sind, ergibt sich

$$N_{++} = 0 = N_{--}.$$

Die Spinrichtungen der beiden Teilchen sind also entgegengesetzt (in Übereinstimmung mit der Annahme, daß der Spin des Gesamtsystems verschwindet).

## 9.6 Das Einstein–Podolsky–Rosen–“Paradoxon” und die Bellschen Ungleichungen

Die im letzten Abschnitt erhaltenen Resultate könnte man nun, sinngemäß nach Einstein, Podolsky und Rosen<sup>8</sup>, folgendermaßen interpretieren: Anstatt  $\vec{a} \cdot \hat{S}^{(1)} \otimes \mathbf{1}$  direkt am Teilchen (1) zu messen, kann der Spin von Teilchen (1) durch Messung von  $\mathbf{1} \otimes \hat{S}^{(2)}$  am Teilchen (2) bestimmt werden. (Man hat den gemessenen Wert mit  $-1$  zu multiplizieren.) Bei räumlicher Trennung der Detektoren beeinflusst diese Messung das Teilchen (1) nicht. Der **gesunde Menschenverstand** läßt uns folgern: Teilchen (1) bekommt die  $\vec{a}$ -Komponente des Spins nicht erst durch Messung (Präparation), sondern seine Spinprojektion hat einen definierten Wert ( $+1$  oder  $-1$ ) unabhängig davon, ob gemessen wird oder nicht (im offensichtlichen Gegensatz zur üblichen quantenmechanischen Interpretation).

Ein konsequentes Verfolgen dieser Idee führt zur **Annahme: A priori** und **unabhängig** von jeglicher Messung hat Teilchen (1) definierte Spinwerte  $v(\vec{a})$ , gleich  $+1$  oder  $-1$ , in alle  $\vec{a}$ -Richtungen (zumindest solche, die orthogonal zum Teilchenstrahl sind). Diese Werte werden im Experiment nur festgestellt (und **nicht präpariert**), sie sind **verborgene Parameter**, die dem Teilchen (1) (und analog dem Teilchen (2)) zukommen.

Wir analysieren die Konsequenzen aus dieser Annahme und verlassen damit für einen Moment den Boden der Quantenmechanik: Seien  $N$  Teilchenpaare im Singulettzustand. Wir wählen 4 beliebige Richtungen  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$  und  $\vec{d}$  in der Ebene, senkrecht zum Teilchenstrahl und bezeichnen mit  $v_i(\vec{a})$  und  $v_i(\vec{d})$  die “verborgenen”, a priori bestimmten Werte der Spinkomponenten in  $\vec{a}$ - bzw.  $\vec{d}$ -Richtung des Teilchens (1) im  $i$ -ten Paar. Analog seien  $w_i(\vec{b})$  und  $w_i(\vec{c})$  die verborgenen Parameter von Teilchen (2). Dann ergeben sich als Mittelwerte für Korrelationsmessungen:

$$\begin{aligned} E(\vec{a}, \vec{b}) &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N v_i(\vec{a}) w_i(\vec{b}), \\ E(\vec{d}, \vec{c}) &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N v_i(\vec{d}) w_i(\vec{c}), \\ E(\vec{a}, \vec{c}) &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N v_i(\vec{a}) w_i(\vec{c}), \\ E(\vec{d}, \vec{b}) &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N v_i(\vec{d}) w_i(\vec{b}). \end{aligned} \tag{9.34}$$

Offenbar gilt:

$$v_i(\vec{a})(w_i(\vec{b}) + w_i(\vec{c})) + v_i(\vec{d})(w_i(\vec{b}) - w_i(\vec{c})) = \pm 2, \tag{9.35}$$

denn entweder verschwindet  $w_i(\vec{b}) + w_i(\vec{c})$  und  $w_i(\vec{b}) - w_i(\vec{c})$  hat den Wert  $\pm 2$ , oder  $w_i(\vec{b}) + w_i(\vec{c})$  ist gleich  $\pm 2$  und  $w_i(\vec{b}) - w_i(\vec{c})$  verschwindet. Addieren wir die Gleichungen (9.35) für alle  $i$  und dividieren durch  $N$ , so ergibt sich

$$\left| \frac{1}{N} \left( \sum_{i=1}^N v_i(\vec{a}) w_i(\vec{b}) + \sum_{i=1}^N v_i(\vec{a}) w_i(\vec{c}) + \sum_{i=1}^N v_i(\vec{d}) w_i(\vec{b}) - \sum_{i=1}^N v_i(\vec{d}) w_i(\vec{c}) \right) \right| \leq 2,$$

und mit (9.34) erhalten wir die **Bellsche Ungleichung**<sup>9</sup>:

$$|E(\vec{a}, \vec{b}) + E(\vec{a}, \vec{c}) + E(\vec{d}, \vec{b}) - E(\vec{d}, \vec{c})| \leq 2. \tag{9.36}$$

<sup>8</sup>siehe A. Einstein et al., Phys. Rev. Vol. 47, 1935, 777

<sup>9</sup>J.S. Bell, Physics 1, (1964), 195

Wir zeigen, daß diese Ungleichung **in der Quantenmechanik verletzt** ist: Aus (9.31) folgt zunächst:

$$|E(\vec{a}, \vec{b}) + E(\vec{a}, \vec{c}) + E(\vec{d}, \vec{b}) - E(\vec{d}, \vec{c})| = |\vec{a}(\vec{b} + \vec{c}) + \vec{d}(\vec{b} - \vec{c})| \leq |\vec{a}||\vec{b} + \vec{c}| + |\vec{d}||\vec{b} - \vec{c}|.$$

Bezeichnen wir  $\cos \varphi = \vec{b} \cdot \vec{c}$ ,  $\varphi \in [0, \pi]$ , so ergibt sich

$$|\vec{a}||\vec{b} + \vec{c}| + |\vec{d}||\vec{b} - \vec{c}| = 2(\cos \frac{\varphi}{2} + \sin \frac{\varphi}{2}) = 2\sqrt{2} \sin \left( \frac{\pi}{4} + \frac{\varphi}{2} \right) \leq 2\sqrt{2}.$$

also

$$|E(\vec{a}, \vec{b}) + E(\vec{a}, \vec{c}) + E(\vec{d}, \vec{b}) - E(\vec{d}, \vec{c})| \leq 2\sqrt{2}. \quad (9.37)$$

Für  $\vec{b} \perp \vec{c}$ ,  $|\vec{a}|(|\vec{b} + \vec{c}|)$  und  $|\vec{d}|(|\vec{b} - \vec{c}|)$  gilt sogar das Gleichheitszeichen.

In dieser Situation mußte das Experiment<sup>10</sup> entscheiden. Dabei wurde die **Quantenmechanik bestätigt**, d.h., es wurde gezeigt, daß die **Bellschen Ungleichungen in der Natur verletzt** werden.

### Bemerkungen 9.6

- i) Das größte Verdienst von Bell bestand darin, daß er die Diskussion über die Existenz verborgener Parameter aus dem Bereich der Spekulationen auf das Niveau experimentell verifizierbarer Aussagen transformiert hat.
- ii) In die Herleitung der Bellschen Ungleichungen sind zwei fundamentale Annahmen eingegangen. **Erstens** wurde unterstellt, daß die physikalischen Größen  $v_i(\vec{a})$ ,  $v_i(\vec{d})$ ,  $w_i(\vec{b})$  und  $w_i(\vec{c})$  definierte Werte haben (und zwar für alle Richtungen  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$  und  $\vec{d}$ ), unabhängig davon, ob sie gemessen werden oder nicht. Dies steht im offensichtlichen Widerspruch zu den Grundannahmen der Quantenmechanik. **Zweitens** wurde angenommen, daß die Messung am Teilchen (1) die Meßapparatur für Teilchen (2) nicht beeinflusst. Dies ist konsistent mit der Grundannahme der **Lokalität** in der Quantenmechanik: Die Reduktion eines Zustandes auf ein Teilsystem ist eine wohldefinierte Operation, die unabhängig davon ist, welche Meßapparaturen in anderen Teilen der Welt aufgestellt werden.
- iii) Wir folgern über die Natur des **zusammengesetzten Quantenzustandes**  $\phi$ : der Zustand  $\phi$  ist nicht teilbar, er hat keine 1-Teilcheneigenschaften – er ist verschränkt. In der Sprache der Messungen heißt das: Eine Messung an Teilchen (2) ist auch eine Messung an (1) + (2) und damit auch an (1) (Bohr).
- iv) Es bleibt ein “Ausweg”: Bohms nichtlokale, verborgene Parameter<sup>11</sup>.

## 9.7 Quantenteleportation

Wir zeigen, am Beispiel der Quantenteleportation, wie das Konzept der **Verschränkung** von quantenmechanischen Zuständen in der Quanteninformationstheorie verwendet wird. Zu einer Einführung in diese Theorie verweisen wir auf die folgende Literatur:

- i) B. Crell, A. Uhlmann: *Einführung in die Grundlagen und Protokolle der Quanteninformatik*, NTZ-Preprint 33/1998, <http://www.uni-leipzig.de/~ntz/abs/abs3398.htm>
- ii) J. Preskill: *Lecture Notes for Physics 229: Quantum Information and Computation*, <http://www.theory.caltech.edu/~preskill/ph229>

<sup>10</sup>siehe z.B. A. Aspect et.al.: Phys. Rev. Lett. **49** (1982), 91

<sup>11</sup>siehe [Galindo/Pascual], Teil I, S. 381

iii) M. A. Nielsen and I. L. Chuang: *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press 2000

Zwei Experimentatoren, üblicherweise **Alice** und **Bob** genannt, verfügen über ein verschränktes Paar von Photonen, bezeichnet mit  $A$  und  $B$ . Dieses Paar wird nicht angerührt, um die Verschränkung nicht zu stören. Die Zustandsräume sind wieder  $\mathbb{C}^2$  und der verschränkte Zustand in  $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$  sei gegeben durch den EPR-Vektor

$$|\varphi^+\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle).$$

Alice erhält ein weiteres Photon, bezeichnet mit  $X$ , im Zustand  $|\phi\rangle_X = a|0\rangle + b|1\rangle$ . Alice kennt den Zustand von  $X$  nicht, will aber, daß Bob ein Photon mit derselben Polarisation bekommt. Sie kann natürlich nicht einfach die Polarisation von  $X$  messen und diese Bob mitteilen, denn während des Meßprozesses könnte sich die Polarisation von  $X$  ändern.

### Wie gehen Alice und Bob vor?

- Alice mißt  $A$  zusammen mit  $X$ , ohne die individuelle Polarisation zu messen, sie stellt z.B. fest, daß die Polarisationen von  $A$  und  $X$  senkrecht aufeinander stehen. Damit werden  $A$  und  $X$  verschränkt. Man spricht von einer **Bellschen Zustandsmessung**. Durch die Messung wird auf einen der 4 EPR-Zustände  $|\varphi^\pm\rangle_{XA}$ ,  $|\psi^\pm\rangle_{XA}$  projiziert. Infolge dieser Messung wird auch Photon  $B$  verändert, da es mit  $A$  korreliert war. Es ist nun mit dem ursprünglichen Zustand von  $X$  korreliert.  $X$  dagegen hat durch die Bellsche Zustandsmessung seinen ursprünglichen Zustand vergessen, es ist nun verschränkt.
- Alice teilt Bob auf konventionelle Weise<sup>12</sup>, also mit einer Geschwindigkeit  $v \leq c$ , ihr Meßresultat (also eines der 4 obigen Resultate) mit. Damit ist klar, daß bei der gesamten Prozedur das Kausalitätsprinzip nicht verletzt wird.
- Nach Erhalt der Botschaft führt Bob an seinem Photon  $B$  eine Operation aus, die  $B$  in genau den Zustand versetzt, in dem ursprünglich  $X$  war. Er realisiert dies mit einem geeigneten Polarisator:

$$\begin{aligned} \text{falls Alice } |\varphi^+\rangle_{XA} \text{ mitteilt, wirkt Bob mit } & \mathbf{1} \\ \text{falls Alice } |\psi^+\rangle_{XA} \text{ mitteilt, wirkt Bob mit } & \sigma_1 \\ \text{falls Alice } |\psi^-\rangle_{XA} \text{ mitteilt, wirkt Bob mit } & i\sigma_2 \\ \text{falls Alice } |\varphi^-\rangle_{XA} \text{ mitteilt, wirkt Bob mit } & \sigma_3. \end{aligned} \quad (9.38)$$

Diese Operationen transformieren Photon  $B$  in den Zustand  $|\phi\rangle_X$ . Dies lesen wir aus der folgenden Relation ab, vgl Hausaufgabe Nr. 6:

$$\begin{aligned} |\phi\rangle_X \otimes |\varphi^+\rangle_{AB} &= \frac{1}{2}|\varphi^+\rangle_{XA} \otimes |\phi\rangle_B + \frac{1}{2}|\psi^+\rangle_{XA} \otimes \sigma_1|\phi\rangle_B \\ &+ \frac{1}{2}|\psi^-\rangle_{XA} \otimes (-i\sigma_2)|\phi\rangle_B + \frac{1}{2}|\varphi^-\rangle_{XA} \otimes \sigma_3|\phi\rangle_B, \end{aligned} \quad (9.39)$$

d.h., die Bell-Messung an  $X$  und  $A$  liefert mit **gleicher** Wahrscheinlichkeit obige Resultate und wegen  $\sigma_i^2 = \mathbf{1}$  erhält Bob in jedem der 4 Fälle  $|\phi\rangle_B$ . Da das Photon vollständig durch seine Polarisation charakterisiert ist, ist  $B$  jetzt eine exakte Kopie von  $X$ . In diesem Sinne ist die Teleportation von  $X$  gelungen.

### Bemerkungen 9.7

- Photon  $B$  erwirbt auf quantenmechanischem Wege die volle Information über den Zustand von  $X$ , aber um diese lesen zu können, benötigt Bob noch die klassische Nachricht.

<sup>12</sup>etwa per Telefon

- ii) Das Photon  $X$  wurde bei diesem Vorgang nicht geklont, denn nach der Verschränkung mit  $A$  verliert  $X$  alle Erinnerung an seinen ursprünglichen Zustand. Wir verweisen in diesem Zusammenhang auf das **Nichtklonungstheorem** von Wootters und Zurek (1982), das im Seminar bewiesen wird: Quantenzustände können nicht exakt kopiert (geklont) werden.
- iii) Der Zustand von  $X$  ist übertragen worden, ohne daß Alice und Bob während der Prozedur etwas über diesen Zustand erfahren haben (Das Meßergebnis von Alice war völlig zufällig). Insbesondere wurde also die Heisenbergsche Unschärferelation bei diesem Verfahren nicht verletzt.

Wir machen einige Bemerkungen zur **experimentellen Realisierung** dieser Ideen und verweisen in diesem Zusammenhang auf folgende Übersichtsartikel:

- a) A. Zeilinger et.al.: *Experimental quantum teleportation*, Nature **390** (1997) 575
- b) A. Furusawa et.al.: *Unconditional quantum teleportation*, Science **282** (1998) 706
- c) M. Nielsen et.a.: *Complete quantum teleportation by nuclear magnetic resonance*, Nature **395** (1998).

Wir beschränken uns auf das von Zeilinger in Innsbruck durchgeführte Experiment, siehe Abbildung 9.2.

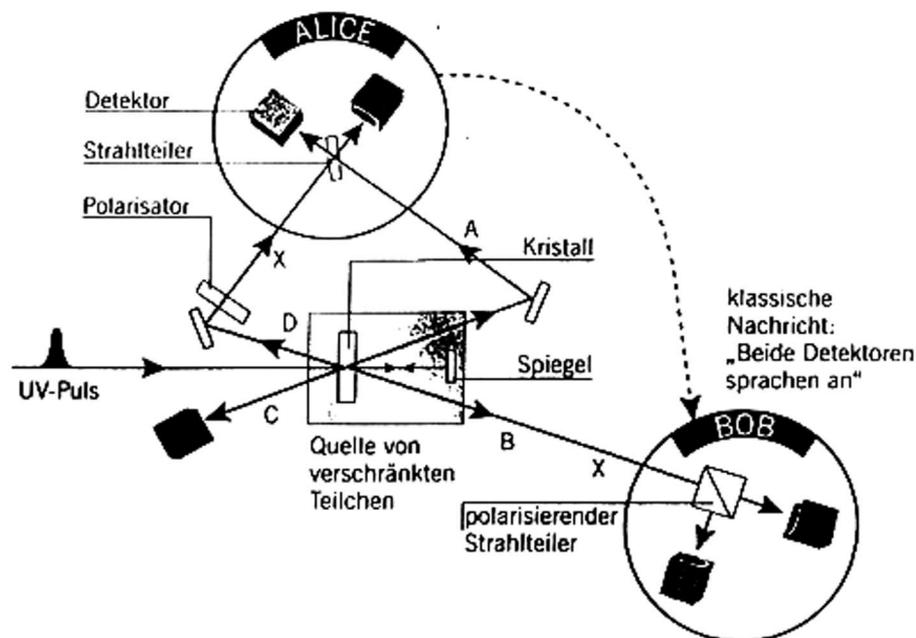


Abbildung 9.2: Das Innsbrucker Experiment beginnt mit einem Puls ultravioletter Laserstrahlung. Beim Durchgang durch einen Kristall entstehen daraus die verschränkten Photonen  $A$  und  $B$ , die zu Alice bzw. Bob wandern. Der reflektierte Puls erzeugt auf seinem Rückweg durch den Kristall zwei weitere Photonen  $C$  und  $D$ . Ein Polarisator versetzt Photon  $D$  in den definierten Zustand  $X$ . Photon  $C$  wird im Detektor nachgewiesen und bestätigt damit, daß Photon  $X$  zu Alice gesandt wurde. Alice kombiniert die Photonen  $A$  und  $X$  mit Hilfe eines Strahlteilers. Wenn sie in jedem ihrer Detektoren ein Photon findet, was in 25 Prozent aller Fälle eintritt, ist die Teleportation erfolgreich, und Alice setzt Bob davon in Kenntnis. Er benutzt einen polarisierenden Strahlteiler, um zu bestätigen, daß sein Photon nun die Polarisation von  $X$  hat.

Die Produktion eines verschränkten Photonenpaares ( $A, B$ ) beim Durchgang durch einen optisch nichtlinearen Kristall (z.B. Beta-Bariumborat) nennt man **parametrische Konversion**. Ein einzelnes Photon erzeugt dabei zwei Photonen mit **entgegengesetzter Polarisation**. Experimentell besonders schwierig ist die **Bellsche Zustandsmessung**, d.h. das Herstellen der Verschränkung von  $A$  mit  $X$ . Dazu verwendet man einen mit Silber beschichteten, halbdurchlässigen Spiegel. Man muß nun dafür sorgen, daß

beide Photonen den Spiegel praktisch zum gleichen Zeitpunkt erreichen, und zwar so daß sich die Reflexionsrichtung von  $X$  und die ursprünglichen Richtung von  $A$  decken. Dann kommt es zur Interferenz, die gemessen wird. Im Moment erlauben es die experimentellen Techniken noch nicht, alle Bell-Zustände zu unterscheiden. Bei Zeilingers Experiment gehen die beiden Photonen mit 25%-iger Wahrscheinlichkeit in separate Detektoren und mit 75%-iger Wahrscheinlichkeit gehen beide in einen der beiden Detektoren. Zwischen drei der vier Bell-Zustände wird also in diesem Experiment nicht unterschieden.

Zum Abschluß geben wir eine **allgemeinere**, nicht auf den Fall  $\mathcal{H} \cong \mathbb{C}^2$  beschränkte, **theoretische Analyse** an. Unsere Darstellung orientiert sich an dem eingangs zitierten Artikel von Crell und Uhlmann. Die theoretische Pionierarbeit geht auf Bennett, Brassard, Crepeau, Jozsa, Peres und Wootters<sup>13</sup> zurück. Seien  $\mathcal{H}$ ,  $\mathcal{H}_A$  und  $\mathcal{H}_B$  Hilberträume endlicher Dimension  $d$ , mit Basen  $\{\phi_i\}$ ,  $\{\phi_i^A\}$  und  $\{\phi_i^B\}$ . Ziel ist es, einen unbekanntes Zustandsvektor  $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$  (abstraktes Pendant zu Photon  $X$ ) in  $\mathcal{H}_B$  "relativ zur Basis" zu reproduzieren:

$$|\phi\rangle = \sum_i \langle \phi_i | \phi \rangle |\phi_i\rangle \quad \rightarrow \quad |\phi^B\rangle = \sum_i \langle \phi_i | \phi \rangle |\phi_i^B\rangle.$$

Dafür benötigen Alice und Bob einen verschränkten Zustand  $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ . Wir wählen einen **maximal verschränkten** Zustandsvektor (EPR-Vektor)  $|\varphi\rangle$ . Nach Bemerkung 9.4 iv) gilt

$$|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_i |\phi_i^A\rangle \otimes \hat{U}^B |\phi_i^B\rangle, \quad (9.40)$$

wobei  $\hat{U}^B$  ein unitärer Operator in  $\mathcal{H}_B$  ist. Dann beschreibt

$$|\phi\rangle \otimes |\varphi\rangle \in \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$$

den **Zustand des Gesamtsystems vor der Messung** von Alice.

Wir nehmen nun an, daß Alice die Bell-Zustandsmessung mit einer **nichtentarteten** Observablen  $\hat{A} \in B(\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_A)$  durchführt, deren Eigenvektoren

$$|\varphi_l\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_i |\phi_i\rangle \otimes \hat{U}_l^A |\phi_i^A\rangle; \quad l = 1, \dots, d^2 \quad (9.41)$$

eine EPR-Basis in  $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_A$  bilden. (Die Frage, ob beliebige Observable dieser Art gemessen werden können stellen wir hier nicht.) Sei bei dieser Messung der Vektor  $|\varphi_{l_0}\rangle$  präpariert worden. Dann projiziert

$$\hat{P}_{l_0} = |\varphi_{l_0}\rangle \langle \varphi_{l_0}| \in B(\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_A) \quad (9.42)$$

nach Annahme auf einen eindimensionalen Teilraum und die im **Gesamtsystem** induzierte Zustandspräparation ist gegeben durch:

$$|\phi\rangle \otimes |\varphi\rangle \quad \rightarrow \quad \frac{(\hat{P}_{l_0} \otimes \mathbf{1})|\phi\rangle \otimes |\varphi\rangle}{\|(\hat{P}_{l_0} \otimes \mathbf{1})|\phi\rangle \otimes |\varphi\rangle\|}.$$

Wir berechnen mit (9.41):

$$\begin{aligned} (\hat{P}_{l_0} \otimes \mathbf{1})(|\phi\rangle \otimes |\varphi\rangle) &= \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_k \hat{P}_{l_0} (|\phi\rangle \otimes |\phi_k^A\rangle) \otimes \hat{U}^B |\phi_k^B\rangle \\ &\stackrel{(9.42)}{=} \frac{1}{d} \sum_{k,i} \langle \phi_i \otimes \hat{U}_{l_0}^A \phi_i^A | \phi \otimes \phi_k^A \rangle |\varphi_{l_0}\rangle \otimes \hat{U}^B |\phi_k^B\rangle \\ &= \frac{1}{d} |\varphi_{l_0}\rangle \otimes \hat{U}^B \left\{ \sum_{k,i} \langle \phi_i | \phi \rangle \langle \hat{U}_{l_0}^A \phi_i^A | \phi_k^A \rangle |\phi_k^B\rangle \right\}. \end{aligned}$$

<sup>13</sup>C. Bennett et.al.: *Teleporting an unknown quantum-state via dual classical and EPR-channels* Phys.Rev. Lett. **70** (1993) 1895

Aber  $|\phi^B\rangle = \sum_i \langle \phi_i | \phi \rangle |\phi_i^B\rangle$  liefert  $\langle \phi_i^B | \phi^B \rangle = \langle \phi_i | \phi \rangle$  und damit hat der Ausdruck in der Klammer die folgende Gestalt:

$$\hat{V}_{l_0}^B |\phi^B\rangle := \sum_{k,i} \langle \phi_i^B | \phi^B \rangle \langle \hat{U}_{l_0}^A \phi_i^A | \phi_k^A \rangle |\phi_k^B\rangle.$$

Man zeigt leicht, daß  $\hat{V}_{l_0}^B$  ein unitärer Operator in  $\mathcal{H}_B$  ist. Der präparierte Zustandsvektor des Gesamtsystems hat also die Form

$$(\hat{P}_{l_0} \otimes \mathbf{1})(|\phi\rangle \otimes |\varphi\rangle) = \frac{1}{d} |\varphi_{l_0}\rangle \otimes \hat{U}^B \hat{V}_{l_0}^B |\phi^B\rangle \equiv \frac{1}{d} |\varphi_{l_0}\rangle \otimes |\phi_{l_0}\rangle,$$

d.h.:

$$|\phi_{l_0}^B\rangle = \hat{U}^B \hat{V}_{l_0}^B |\phi^B\rangle$$

beschreibt den Zustand in Bobs System. Im System von **Alice** bewirkt die Teleportation also

$$|\phi\rangle \langle \phi| \mapsto \frac{1}{d} \mathbf{1}, \quad \frac{1}{d} \mathbf{1}^A \mapsto \frac{1}{d} \mathbf{1}^A,$$

im System von **Bob** dagegen

$$\frac{1}{d} \mathbf{1}^B \mapsto |\phi_l^B\rangle \langle \phi_l^B|.$$

Jetzt muß Bob nur noch die Transformation  $|\phi_{l_0}^B\rangle \rightarrow |\phi^B\rangle$  durch Anwendung der zu  $\hat{U}^B \hat{V}_{l_0}^B$  inversen unitären Transformation realisieren. Dann befindet sich Bobs Photon im Zustand  $|\phi^B\rangle$ , identisch mit dem ursprünglichen Zustand von  $X$ . Dafür muß Bob aus  $d^2$  unitären Operatoren  $\hat{U}_l^A$  auswählen. Um die richtige Wahl treffen zu können, braucht Bob eine klassische Information von Alice, im vorliegenden Falle einen Buchstaben aus einem Alphabet der Länge  $d^2$ , der den gemessenen Eigenwert  $\lambda_l$  markiert.

# Kapitel 10

## Symmetrie und Invarianz

### 10.1 Symmetrietransformationen und Wigner-Theorem

Wir erinnern zunächst an das Noether–Theorem der klassischen Mechanik. Ist die Lagrangedichte des Systems invariant unter einer Transformation  $q^i(t) \rightarrow q^i(\alpha, t)$  mit dem Parameter  $\alpha$ , dann sind die Größen

$$I(q, \dot{q}, t) = \left. \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \frac{\partial q^i}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=0}$$

Bewegungskonstanten. Auf diese Weise liefert etwa Invarianz unter Translationen die Erhaltung des Gesamtimpulses, Invarianz unter Rotationen die Erhaltung des Drehimpulses und Invarianz unter Zeittranslationen die Energieerhaltung. Die Verwendung von Symmetrien und zugehörigen Bewegungskonstanten ist äußerst nützlich bei der Integration der Bewegungsgleichungen.

Wir haben bereits an Beispielen gesehen, daß dies auch für die Quantenmechanik gilt. Wir diskutieren nun das Symmetriekonzept in der Quantenmechanik systematisch. Sei  $\mathcal{H}$  der Hilbertraum des Systems. Wir bezeichnen reine Zustände (Einheitsstrahlen in  $\mathcal{H}$ ) wieder mit  $[\varphi], [\psi], \dots$ .

Eine **Symmetrietransformation** des Systems ist nach Definition eine Abbildung  $S$  zwischen reinen Zuständen, für die gilt:

- i)  $S$  ist bijektiv.
- ii)  $S$  transformiert physikalisch realisierbare reine Zustände ineinander (d.h. sie respektiert eine evt. vorliegende Superauswahlstruktur).
- iii)  $S$  läßt alle Übergangswahrscheinlichkeiten invariant: Seien  $[\varphi]$  und  $[\psi]$  reine Zustände und  $[\varphi^\lambda]$  und  $[\psi^\lambda]$  deren Bilder unter  $S$ . Dann gilt

$$|\langle \varphi | \psi \rangle|^2 = |\langle \varphi^\lambda | \psi^\lambda \rangle|^2, \quad (10.1)$$

für beliebige Repräsentanten  $\varphi, \psi, \varphi^\lambda$  und  $\psi^\lambda$  der obigen Zustände. (Offenbar sind Übergangswahrscheinlichkeiten invariant unter Änderung des Repräsentanten.)

Es gilt nun das folgende fundamentale **Theorem von Wigner** (1931).

**Satz 10.1** Jede Symmetrietransformation  $S$  kann als **unitärer** oder **antiunitärer** Operator  $\hat{U} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  implementiert werden:

$$S[\psi] = [\hat{U} \psi]. \quad (10.2)$$

Zum Beweis verweisen wir auf [Galindo/Pascual], Teil I, S. 263. Einen besonders gut verständlichen und sauberen Beweis findet man bei [Weinberg]<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>S. Weinberg: *The Quantum Theory of Fields*, Cambridge University Press (1995), Vol.I, S. 91

**Bemerkungen 10.1**

i) Ein Operator  $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  heißt **antilinear**, falls

$$\hat{A}(a\varphi + b\psi) = a^* \hat{A}\varphi + b^* \hat{A}\psi$$

gilt. Das Produkt einer geraden Anzahl von antilinearen Operatoren ist linear, das Produkt einer ungeraden Anzahl antilinear. Der adjungierte Operator eines antilinearen Operators ist gegeben durch

$$\langle \hat{A}^\dagger \varphi | \psi \rangle = \langle \varphi | \hat{A} \psi \rangle^*.$$

Mit dieser Definition ist  $\hat{A}^\dagger$  auch antilinear und es gilt  $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$ . Man beachte, daß auf der linken Seite dieser Gleichung der adjungierte Operator eines linearen Operators steht, während auf der rechten Seite die Adjungierten von antilinearen Operatoren stehen.

Ein Operator  $\hat{U} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  heißt **antiunitär**, falls er antilinear ist und  $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = \mathbf{1}$  erfüllt. Dann gilt:

$$\langle \hat{U}\varphi | \hat{U}\psi \rangle = \langle \varphi | \hat{U}^\dagger \hat{U} \psi \rangle^* = \langle \varphi | \psi \rangle^* \equiv \langle \psi | \varphi \rangle,$$

verglichen mit  $\langle \hat{U}\varphi | \hat{U}\psi \rangle = \langle \varphi | \psi \rangle$  im Falle einer unitären Operatoren. Antiunitäre Operatoren werden bei der Diskussion der Zeitumkehr auftreten.

ii) Die Symmetrietransformationen eines quantenmechanischen Systems bilden eine **Gruppe**  $G$ . Die Gruppenmultiplikation ist durch die Nacheinanderausführung der Abbildungen gegeben,

$$G \times G \ni (S_1, S_2) \rightarrow S_1 \circ S_2 \in G,$$

und das Einselement durch die identische Abbildung  $\text{id}$ . Punkt i) der Definition sichert die Existenz des Inversen  $S^{-1}$  zu jedem  $S$ . Seien  $S_1$  und  $S_2$  zwei Symmetrietransformationen und  $\hat{U}(S_2)$  bzw.  $\hat{U}(S_1)$  die zugehörigen (anti)-unitären Transformationen. Dann gilt

$$\begin{array}{ccccc} [\psi] & \rightarrow & [\psi_1] & \rightarrow & [\psi_2] \\ \psi & \rightarrow & \psi_1 = \hat{U}(S_1)\psi & \rightarrow & \psi_2 = \hat{U}(S_2)\hat{U}(S_1)\psi. \end{array}$$

Andererseits liefert der zu  $S_1 \circ S_2$  gehörige (anti)-unitäre Operator  $\hat{U}(S_2 \circ S_1)$  einen Vektor aus der gleichen Klasse,

$$\begin{array}{ccc} [\psi] & \xrightarrow{S_1 \cdot S_2} & [\psi_2] \\ \psi & \longrightarrow & \tilde{\psi}_2 = \hat{U}(S_2 \cdot S_1)\psi. \end{array}$$

Da  $\psi_2$  und  $\tilde{\psi}_2$  Repräsentanten des gleichen Strahls sind, unterscheiden sie sich um eine Phase  $\omega(S_1 \cdot S_2)$ . Diese Phase hängt nicht von  $\psi$  ab, siehe [Weinberg]. Wir erhalten also

$$\hat{U}(S_2)\hat{U}(S_1) = e^{i\omega(S_1 \cdot S_2)} \hat{U}(S_2 \cdot S_1). \quad (10.3)$$

Man sagt, es liege eine **projektive Darstellung** der Symmetriegruppe vor. Man kann zeigen<sup>2</sup>, daß jede Symmetriegruppe so erweitert werden kann (ohne die Physik zu ändern), daß  $\omega = 0$  erreicht wird. Ein Standardbeispiel dieser Art kennen wir aus Teil I: Durch Übergang zur universellen Überlagerungsgruppe  $SU(2)$  wird aus einer projektiven Darstellung (zweideutige Darstellung mit  $\omega = \pm 1$ ) der  $SO(3)$  eine echte Darstellung.

Wir dehnen die Symmetrietransformationen auf Observable aus, indem wir fordern, daß ihre **Erwartungswerte** für beliebige Zustände unter Symmetrietransformationen invariant bleiben sollen:

$$\langle \psi | \hat{A} \psi \rangle = \langle \psi' | \hat{A}' \psi' \rangle = \langle \hat{U} \psi | \hat{A}' \hat{U} \psi \rangle = \langle \psi | \hat{U}^\dagger \hat{A}' \hat{U} \psi \rangle,$$

für alle  $\psi$ . (Diese Rechnung gilt auch für antiunitäre  $\hat{U}$ , denn  $\langle \psi | \hat{A} \psi \rangle$  ist reell.) Wir erhalten:

$$\hat{A}' = \hat{U} \hat{A} \hat{U}^\dagger. \quad (10.4)$$

<sup>2</sup>siehe [Weinberg]

**Bemerkungen 10.2**

i) Insbesondere transformiert sich die Dichtematrix eines gemischten Zustandes nach (10.4):

$$\hat{\rho}' = \hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^\dagger.$$

ii)  $\hat{A}'$  hat dasselbe Spektrum wie  $\hat{A}$ . Etwa im Falle eines rein diskreten Spektrums haben wir:

$$\hat{A} \psi = \lambda \psi \quad \rightarrow \quad (\hat{U} \hat{A} \hat{U}^\dagger) \hat{U} \psi = \hat{A}' (\hat{U} \psi) = \lambda (\hat{U} \psi).$$

Im allgemeinen Falle wirkt man mit  $\hat{U}$  von links und  $\hat{U}^\dagger$  von rechts auf die Spektralzerlegung von  $\hat{A}$ .

iii) Falls  $\hat{U}$  linear ist, ist jede algebraische Relation zwischen Observablen des Systems unter Symmetrietransformationen invariant. Ist  $\hat{U}$  antilinear, dann wird die Relation in ihre komplex konjugierte überführt. Wir betrachten als Beispiel die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} \mathbf{1}.$$

Es gilt

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] \equiv \hat{U} \hat{x}_i \hat{U}^\dagger \hat{U} \hat{p}_j \hat{U}^\dagger - \hat{U} \hat{p}_j \hat{U}^\dagger \hat{U} \hat{x}_i \hat{U}^\dagger = \hat{U} (i\hbar \delta_{ij} \mathbf{1}) \hat{U}^\dagger = \pm i\hbar \delta_{ij} \mathbf{1}.$$

Ob eine Transformation unitär oder antiunitär ist, kann man also an den transformierten Vertauschungsrelationen ablesen.

iv) Eine Symmetrietransformation  $\hat{U}$  können wir sowohl **aktiv** oder **passiv** interpretieren: Entweder fassen wir  $\hat{U}$  als Transformation auf, die Präparier- und Registrierapparatur (auf dieselbe Weise) wirklich bewegt oder wir interpretieren  $\hat{U}$  als Transformation zwischen zwei Bezugssystemen. Dann wird dieselbe Präparier- oder Registrierapparatur von zwei verschiedenen Beobachtern gesehen. In beiden Fällen bleiben die Erwartungswerte von Observablen invariant.

Natürlich kann auch nur den Präparierapparat oder nur der Registrierapparat einer Symmetrietransformation unterworfen werden. Dann ändert sich aber das Gesamtsystem und folglich ändern sich auch die Erwartungswerte.

## 10.2 Translationen

Wir betrachten zunächst die **Translationsgruppe**  $\mathbb{R}^3$ . Die Gruppenmultiplikation ist gegeben durch die Addition von Vektoren, das Einselement ist der 0-Vektor und das zu  $\vec{a}$  Inverse ist  $-\vec{a}$ . Insbesondere ist die Gruppe Abelsch. Wir definieren die folgende **unitäre Darstellung** der Translationsgruppe in  $L^2(\mathbb{R}^3)$ :

$$\left( \hat{U}(\vec{a}) \psi \right) (\vec{x}) := \psi(\vec{x} - \vec{a}). \quad (10.5)$$

Es gilt

$$\hat{U}(\vec{a} + \vec{b}) = \hat{U}(\vec{a}) \hat{U}(\vec{b}), \quad \hat{U}(0) = \mathbf{1}, \quad \hat{U}^\dagger(\vec{a}) = \hat{U}^{-1}(\vec{a}) = \hat{U}(-\vec{a}). \quad (10.6)$$

**Bemerkungen 10.3**

Wir setzen diese Darstellung auf folgende Weise zu einer Darstellung auf dem Raum  $D' \supset \mathcal{H}$  der verallgemeinerten Eigenvektoren des Ortsoperators<sup>3</sup> fort: Da die Darstellung  $\hat{U}$  den Unterraum  $D \subset \mathcal{H}$  invariant läßt, induziert sie durch Einschränkung eine Darstellung von  $\mathbb{R}^3$  auf  $D$ . Die sogenannte **konjugierte Darstellung** auf dem Dualraum  $D'$ , die wir ebenfalls mit  $\hat{U}$  bezeichnen, ist dann definiert durch

$$\langle \hat{U}(\vec{a}) \vec{x} | \varphi \rangle = \langle \vec{x} | \hat{U}(-\vec{a}) \varphi \rangle, \quad \vec{a} \in \mathbb{R}^3.$$

<sup>3</sup>siehe Gelfandsche Tripel, Teil I, Abschnitt 3.43

Mit

$$\langle \vec{x} | \hat{U}(-\vec{a}) \varphi \rangle = \langle \hat{U}(-\vec{a}) \varphi | \vec{x} \rangle = \varphi(\vec{x} + \vec{a}) = \langle \vec{x} + \vec{a} | \varphi \rangle$$

folgt

$$\hat{U}(\vec{a}) | \vec{x} \rangle = | \vec{x} + \vec{a} \rangle, \quad \vec{a} \in \mathbb{R}^3. \quad (10.7)$$

Die Taylorentwicklung von  $\psi$  um den Punkt  $\vec{x}$  liefert für kleine  $\vec{a}$ :

$$\left( \hat{U}(\vec{a}) \psi \right) (\vec{x}) = \psi(\vec{x} - \vec{a}) = \psi(\vec{x}) - (\vec{a} \cdot \nabla \psi)(\vec{x}) + \dots,$$

und damit, wegen  $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$ ,

$$\hat{U}(\vec{a}) = \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{p} \right). \quad (10.8)$$

Wie in der klassischen Mechanik, erzeugt der Impulsoperator infinitesimale Translationen, die Komponenten  $\hat{p}_i$  bilden eine Basis in der (kommutativen) Lie-Algebra der Translationsgruppe  $\mathbb{R}^3$ .

Wir leiten das Transformationsgesetz für den **Ortsoperator** ab:

$$\left( \hat{U}(\vec{a}) \hat{x} \hat{U}^\dagger(\vec{a}) \psi \right) (\vec{x}) = \left( \hat{x} \hat{U}(-\vec{a}) \psi \right) (\vec{x} - \vec{a}) = (\vec{x} - \vec{a}) \left( \hat{U}(-\vec{a}) \psi \right) (\vec{x} - \vec{a}) = (\vec{x} - \vec{a}) \psi(\vec{x}),$$

also gilt:

$$\hat{U}(\vec{a}) \hat{x} \hat{U}^\dagger(\vec{a}) = (\hat{x} - \vec{a}\mathbf{1}). \quad (10.9)$$

Da  $\hat{U}(\vec{a})$  wegen (10.8) eine Operatorfunktion von  $\hat{p}$  ist, bleibt der **Impuls** unter Translationen invariant:

$$\hat{U}(\vec{a}) \hat{p} \hat{U}^\dagger(\vec{a}) = \hat{p}. \quad (10.10)$$

Der **Drehimpuls** transformiert sich folgendermaßen:

$$\begin{aligned} \hat{U}(\vec{a}) \hat{L}_i \hat{U}^\dagger(\vec{a}) &= \varepsilon_{ijk} \hat{U}(\vec{a}) \hat{x}_j \hat{p}_k \hat{U}^\dagger(\vec{a}) \\ &= \varepsilon_{ijk} \hat{U}(\vec{a}) \hat{x}_j \hat{U}^\dagger(\vec{a}) \hat{U}(\vec{a}) \hat{p}_k \hat{U}^\dagger(\vec{a}) \\ &= \varepsilon_{ijk} (\hat{x}_j - a_j) \hat{p}_k, \end{aligned}$$

also gilt

$$\hat{U}(\vec{a}) \hat{L} \hat{U}^\dagger(\vec{a}) = \left( \hat{L} - \vec{a} \times \hat{p} \right). \quad (10.11)$$

Daraus folgt z.B., daß der intrinsische (relative) Bahndrehimpuls  $\hat{L}_{\text{rel}} = (\hat{x}_1 - \hat{x}_2) \times \hat{p}$  im Zweikörperproblem translationsinvariant ist. Analog **postulieren** wir, daß der **Spin** invariant unter Translationen sein soll:

$$\hat{U}(\vec{a}) \hat{S}_i \hat{U}^\dagger(\vec{a}) = \hat{S}_i \quad (10.12)$$

Die Verallgemeinerung auf den Fall von  $N$  Teilchen ist offensichtlich. Es gilt:

$$\hat{P} = \sum_{\alpha=1}^N \hat{p}^{(\alpha)}; \quad \hat{U}(\vec{a}) = \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{P} \right).$$

### 10.3 Drehungen

Wir betrachten die Drehgruppe  $SO(3)$  und ihre Standardwirkung  $\vec{x} \mapsto R\vec{x}$  im  $\mathbb{R}^3$ . Für Elemente  $R \in SO(3)$  gilt  $RR^T = \mathbf{1}$  und  $\det R = 1$ . Wir definieren die folgende **unitäre Darstellung** der Drehgruppe in  $L^2(\mathbb{R}^3)$ :

$$\left( \hat{D}(R) \psi \right) (\vec{x}) := \psi(R^{-1}\vec{x}). \quad (10.13)$$

Dehnen wir diese Darstellung analog zum vorigen Abschnitt wieder zu einer Darstellung auf dem Raum der verallgemeinerten Eigenvektoren aus, so erhalten wir

$$\hat{D}(R) |\vec{x}\rangle = |R\vec{x}\rangle. \quad (10.14)$$

Für Drehungen  $R = R_{\vec{n}}(\alpha)$  bezüglich der Achse  $\vec{n}$  um den kleinen Winkel  $\delta\alpha$  gilt

$$R^{-1}\vec{x} = \vec{x} - \delta\alpha \vec{n} \times \vec{x} + \dots$$

Damit liefert (10.13) infinitesimal:

$$\begin{aligned} \psi(R^{-1}\vec{x}) &= \psi(\vec{x} - \delta\alpha \vec{n} \times \vec{x} + \dots) \\ &= \psi(\vec{x}) - \delta\alpha (\vec{n} \times \vec{x}) \cdot \nabla \psi(\vec{x}) + \dots \\ &= \psi(\vec{x}) - \frac{i}{\hbar} \delta\alpha \vec{n} \cdot \left( \vec{x} \times \frac{\hbar}{i} \nabla \right) \psi(\vec{x}) + \dots \\ &= \psi(\vec{x}) - \frac{i}{\hbar} \delta\alpha \vec{n} \cdot \hat{L} \psi(\vec{x}) + \dots \end{aligned}$$

d.h.:

$$\hat{D}(R_{\vec{n}}(\alpha)) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot \hat{L}\right). \quad (10.15)$$

Rotationen werden, wie wir bereits wissen, durch die Komponenten  $\{\hat{L}_i\}$  des Drehimpulses (im vorliegenden Falle des Bahndrehimpuls) erzeugt. Die  $\{\hat{L}_i\}$  bilden eine Basis in der Lie-Algebra der  $SO(3)$  mit den Vertauschungsrelationen

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k.$$

Durch analoge Rechnungen wie im vorigen Abschnitt, vgl. Hausaufgabe Nr. 7., zeigt man die folgenden Transformationsgesetze:

$$\hat{A}'_i \equiv \hat{D}(R) \hat{A}_i \hat{D}(R)^\dagger = (R^{-1})_{ij} \hat{A}_j, \quad (10.16)$$

für  $\hat{A}_i = \hat{x}_i, \hat{p}_i, \hat{L}_i$ . Für den **Spinoperator** wird das Transformationsgesetz (10.16) **postuliert**. Der Spinoperator wirkt im Spinorraum  $L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^{2s+1}$  und die Darstellung der Drehgruppe ist, wie bereits bemerkt, für halbzahligen Spin projektiv und kann durch Übergang zur Überlagerungsgruppe  $SU(2)$  zu einer unitären Darstellung gemacht werden.

Wir erinnern an einige grundlegende Sachverhalte aus Teil I:

#### Bemerkungen 10.4

- i) Die irreduziblen Darstellungen der Lie-Algebra  $\mathfrak{so}(3) \equiv \mathfrak{su}(2)$  werden durch  $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$  klassifiziert. Zu jeder Darstellung  $D^j$  gehört ein Darstellungsraum  $V_j$  der Dimension  $(2j+1)$  und darin eine Basis  $|jm\rangle$ ,  $m = -j, \dots, +j$ , die folgenden Gleichungen genügt:

$$\begin{aligned} \hat{J}_3 |jm\rangle &= \hbar m |jm\rangle \\ \hat{J}_\pm |jm\rangle &= \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \hbar |j, m \pm 1\rangle \\ \hat{J}^2 |jm\rangle &= j(j+1) \hbar^2 |jm\rangle. \end{aligned} \quad (10.17)$$

- ii) Die Matrixelemente der Darstellung  $D^j$  in der Basis  $|jm\rangle$  werden mit  $D^j_{m'm}$  bezeichnet. Es gilt:

$$\begin{aligned} \hat{D}^j(R) |jm\rangle &= \sum_{m'} |jm'\rangle \langle jm'| \hat{D}^j(R) |jm\rangle \\ &= \sum_{m'} |jm'\rangle D^j_{m'm}(R). \end{aligned} \quad (10.18)$$

Verwendet man eine explizite Parametrisierung endlicher Drehungen mit Hilfe der Eulerwinkel, so gilt:<sup>4</sup>

$$D_{m'm}^j(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-\frac{i}{\hbar}(m'\alpha + m\gamma)} d_{m'm}^j(\beta) \quad \text{mit}$$

$$d_{m'm}^j(\beta) = \langle jm' | e^{-\frac{i}{\hbar}\beta \hat{J}_2} | jm \rangle.$$

iii) Wir erinnern an die Zerlegung von Tensorprodukten von Darstellungen in ihre irreduzible Komponenten<sup>5</sup>. Es gilt:

$$\hat{D}^{j_1} \otimes \hat{D}^{j_2} = \bigoplus_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \hat{D}^j.$$

Die Basis  $|j_1 j_2, jm\rangle \equiv |jm\rangle$  in den irreduziblen Komponenten dieser Zerlegung kann natürlich bezüglich der Tensorproduktbasis  $|j_1 m\rangle \otimes |j_2 m\rangle \equiv |j_1 m, j_2 m\rangle$  zerlegt werden:

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

Die Koeffizienten  $\langle j_1 m_1, j_2 m_2 | jm \rangle$  heißen **Clebsch–Gordan–Koeffizienten**.

Die Clebsch–Gordan–Koeffizienten spielen eine wichtige Rolle in Anwendungen. Wir geben eine Liste ihrer wichtigsten Eigenschaften an<sup>6</sup>:

a) Für  $m \neq m_1 + m_2$  und (oder)  $j \neq |j_1 - j_2|, \dots, (j_1 + j_2)$  gilt:

$$\langle j_1 m_1, j_2 m_2 | jm \rangle = 0.$$

Diese Aussage folgt aus der Tatsache, daß sowohl  $|jm\rangle$ , als auch  $|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle$  Eigenfunktionen von  $\hat{J}_3$  sind, und zwar mit den Eigenwerten  $\hbar m$  bzw.  $\hbar(m_1 + m_2)$ .

b) Da die Vektoren  $|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle$  bzw.  $|jm\rangle$  jeweils Orthonormalbasen bilden, erfüllen die Clebsch–Gordan–Koeffizienten folgende **Orthogonalitätsrelationen**:

$$\sum_{m_1, m_2} \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | jm \rangle^* \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j' m' \rangle = \delta_{j j'} \delta_{m m'}$$

$$\sum_{j, m} \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | jm \rangle \langle j_1 m'_1, j_2 m'_2 | jm \rangle^* = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}.$$

c) Es gelten die folgenden **Rekursionsformeln**:

$$\begin{aligned} \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | \hat{J}_\pm | jm \rangle &= \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \langle j_1 m_1, j_2, m_2 | j, m \pm 1 \rangle \\ &= \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1 \mp 1)} \langle j_1, m_1 \mp 1, j_2 m_2 | jm \rangle \\ &\quad + \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2 \mp 1)} \langle j_1 m_1, j_2, m_2 \mp 1 | jm \rangle. \end{aligned}$$

Unter Verwendung von a) und b) kann man durch wiederholte Anwendung der Rekursionsformeln c) alle Clebsch–Gordan–Koeffizienten mit einem festem  $j$  auf einen einzigen, z. B.  $\langle j_1 j_1, j_2 (j - j_1) | jj \rangle$ , zurückführen und diesen bis auf eine Phase aus der Normierungsbedingung bestimmen. Wählt man die Phase so, daß

$$\langle j_1, j_1; j_2, (j - j_1) | j, j \rangle > 0$$

<sup>4</sup>Siehe Messiah 2 S. 31

<sup>5</sup>Siehe Abschnitt 5.4

<sup>6</sup>Diese werden im Seminar bewiesen

gilt, dann erhält man

$$\begin{aligned} & \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j m \rangle \\ &= \delta_{m_1+m_2, m} \left\{ \frac{(2j+1)(j_1+j_2-j)!(j+j_1-j_2)!(j+j_2-j_1)!}{(j_1+j_2+j+1)!} \right\}^{1/2} \\ & \times \{(j_1+m_1)!(j_1-m_1)!(j_2+m_2)!(j_2-m_2)!(j+m)!(j-m)\}^{1/2} \\ & \times \sum_{s=0} \frac{(-1)^s}{s!(j_1+j_2-j-s)!(j_1-m_1-s)!(j_2+m_2+s)!(j-j_2+m_1+s)!(j-j_1-m_2+s)!} \end{aligned}$$

(die Summe im letzten Term läuft über alle  $s$ , für die die Ausdrücke in den Klammern  $\geq 0$  sind). Insbesondere sind dann alle Clebsch-Gordan-Koeffizienten reell.

## 10.4 Tensoroperatoren und Wigner-Eckart-Theorem

Sei  $\mathcal{H}$  der Hilbertraum eines quantenmechanischen Systems und sei  $R \mapsto \hat{D}(R)$  eine unitäre Darstellung der Drehgruppe in  $\mathcal{H}$ . Ein Satz von Operatoren  $\hat{A} = (\hat{A}_1, \hat{A}_2, \hat{A}_3)$  heißt **Vektoroperator** bezüglich der Drehgruppe, falls gilt:

$$\hat{D}(R) \hat{A}_i \hat{D}(R)^\dagger = (R^{-1})_{ij} \hat{A}_j, \quad i, j = 1, 2, 3. \quad (10.19)$$

Wir berechnen unter Verwendung von (10.15) das Transformationsverhalten eines Vektoroperators bei einer infinitesimalen Drehung um die Achse  $\vec{n}$  mit dem Winkel  $\delta\alpha$ :

$$\left( \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\alpha \vec{n} \cdot \hat{\vec{L}} \right) \hat{A}_i \left( \mathbf{1} + \frac{i}{\hbar} \delta\alpha \vec{n} \cdot \hat{\vec{L}} \right) = \hat{A}_i - \delta\alpha \epsilon_{ijk} n_j \hat{A}_k,$$

d.h. die infinitesimale Version von (10.19) ist

$$[\hat{L}_i, \hat{A}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{A}_k. \quad (10.20)$$

Uns bereits bekannte Beispiele für Vektoroperatoren sind also  $\hat{\vec{L}}$ ,  $\hat{x}$  und  $\hat{p}$ .

Man kann obigen Begriff auf Tensoroperatoren beliebiger Valenz verallgemeinern. Ein Satz  $\hat{A}_{j_1 \dots j_r}$ ,  $j_1, \dots, j_r = 1, 2, 3$ , von Operatoren heißt **kovarianter Tensoroperator**  $r$ -ter Stufe, falls gilt:

$$\hat{D}(R) \hat{A}_{i_1 \dots i_r} \hat{D}(R)^\dagger = (R^{-1})_{i_1 j_1} \dots (R^{-1})_{i_r j_r} \hat{A}_{j_1 \dots j_r}. \quad (10.21)$$

Von besonderer Bedeutung sind im weiteren die irreduziblen Tensoroperatoren:

Ein Satz  $\hat{T}_m^l$ ,  $m = -l, \dots, +l$ , von  $(2l+1)$  Operatoren in  $\mathcal{H}$  heißt **irreduzibler Tensoroperator**  $l$ -ter Stufe bezüglich der Drehgruppe, falls das folgende Transformationsgesetz gilt:

$$\hat{D}(R) \hat{T}_m^l \hat{D}(R^{-1}) = \sum_{m'} \hat{T}_{m'}^l D_{m' m}^l(R). \quad (10.22)$$

Dabei sind die  $D_{m' m}^l(R)$  die oben eingeführten Matrixelemente der irreduziblen Darstellung, definiert durch  $l$ . Wir sehen, daß die Komponenten  $\hat{T}_m^l$  des irreduziblen Tensoroperators dem gleichen Transformationsgesetz unter der irreduziblen Darstellung  $\hat{D}^l$  genügen, wie die Eigenvektoren  $|lm\rangle$ .

### Bemerkungen 10.5

i) **Die infinitesimale Version** von (10.22) ist:

$$\begin{aligned} \left( \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\alpha \vec{n} \cdot \hat{\vec{L}} \right) \hat{T}_m^l \left( \mathbf{1} + \frac{i}{\hbar} \delta\alpha \vec{n} \cdot \hat{\vec{L}} \right) &= \sum_{m'} \hat{T}_{m'}^l \langle lm' | \left( \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\alpha \vec{n} \cdot \hat{\vec{L}} \right) | lm \rangle \\ &= \hat{T}_m^l - \frac{i}{\hbar} \delta\alpha \vec{n} \cdot \left( \sum_{m'} \hat{T}_{m'}^l \langle lm' | \hat{\vec{L}} | lm \rangle \right), \end{aligned}$$

also

$$[\hat{L}, \hat{T}_m^l] = \sum_{m'} \hat{T}_m^l \langle lm' | \hat{L} | lm \rangle,$$

bzw., mit (10.17):

$$\begin{aligned} [\hat{L}_3, \hat{T}_m^l] &= m\hbar \hat{T}_m^l \\ [\hat{L}_\pm, \hat{T}_m^l] &= \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} \hbar \hat{T}_{m \pm 1}^l. \end{aligned} \quad (10.23)$$

ii) Wir zeigen, wie man aus Tensoroperatoren irreduzible Tensoroperatoren konstruiert:

a) Ein **Skalar**  $\hat{T}$  ist ein unter Drehungen invarianter Operator (z.B. der Hamiltonoperator eines rotationssymmetrischen Problems). Für ihn gilt

$$[\hat{L}, \hat{T}] = 0,$$

d.h.  $\hat{T} \equiv \hat{T}_0^0$  ist ein irreduzibler Tensoroperator nullter Stufe.

b) Sei  $\hat{A} = (\hat{A}_1, \hat{A}_2, \hat{A}_3)$  ein **Vektoroperator**. Wir setzen:

$$\hat{T}_0^1 := \hat{A}_3, \quad \hat{T}_{\pm 1}^1 := \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{A}_1 \pm i\hat{A}_2). \quad (10.24)$$

Man zeigt, vgl. Hausaufgabe Nr. 8, daß  $(\hat{T}_m^1)$  ein irreduzibler Tensoroperator 1. Stufe ist.

c) Sei  $\hat{C}_{ik}$  ein kovarianter Tensoroperator 2. Stufe, d.h. es gilt:

$$\hat{D}(R) \hat{C}_{ij} \hat{D}(R^{-1}) = \sum_{lm} (R^{-1})_{il} (R^{-1})_{jm} \hat{C}_{lm}.$$

Wir setzen

$$\begin{aligned} \hat{S}_{ik} &:= \frac{1}{2} (\hat{C}_{ik} + \hat{C}_{ki}) - \frac{1}{3} \delta_{ik} \sum_{j=1}^3 \hat{C}_{jj}, \\ \hat{A}_{ik} &:= \frac{1}{2} (\hat{C}_{ik} - \hat{C}_{ki}) \\ \hat{D}_{ik} &:= \frac{1}{3} \delta_{ik} \sum_{j=1}^3 \hat{C}_{jj}, \end{aligned}$$

und bilden daraus die folgenden Tensoroperatoren:

$$\hat{T}_0^2 := \frac{3\sqrt{5}}{2} \hat{S}_{33}, \quad \hat{T}_{\pm 1}^2 := \mp \sqrt{\frac{15}{2}} (\hat{S}_{13} \pm i\hat{S}_{23}), \quad \hat{T}_{\pm 2}^2 := \sqrt{\frac{15}{8}} (\hat{S}_{11} - \hat{S}_{22} \pm 2i\hat{S}_{12}),$$

$$\hat{T}_0^1 := \hat{A}_{12}, \quad \hat{T}_{\pm 1}^1 := \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{A}_{23} \pm i\hat{A}_{31}),$$

$$\hat{T}_0^0 := \sum_{j=1}^3 \hat{C}_{jj}.$$

Im Seminar wird gezeigt, daß  $\hat{T}_m^2$  ein irreduzibler Tensoroperator 2. Stufe ist.  $\hat{T}_m^1$  ist wegen Punkt b) offensichtlich ein irreduzibler Tensoroperator 1. Stufe, denn der antisymmetrische Tensoroperator  $\hat{A}_{kl}$  kann mit dem Vektoroperator  $\hat{B}_j = \frac{1}{2} \sum_{kl} \epsilon_{jkl} \hat{A}_{kl}$  identifiziert werden. Schließlich bemerken wir noch, daß  $\hat{T}_0^0$  ein Skalar ist.

In Anwendungen hat man oft Matrixelemente von Tensoroperatoren auszuwerten. Diese Aufgabe wird durch das folgende fundamentale Theorem wesentlich vereinfacht.

**Theorem 10.1 (Wigner-Eckart-Theorem)** Sei  $\mathcal{H}$  der Hilbertraum eines quantenmechanischen Systems und sei eine unitäre Darstellung  $a \mapsto \hat{D}(a)$  von  $SU(2)$  in  $\mathcal{H}$  definiert. Seien  $\hat{J}_i$  die infinitesimalen Erzeugenden dieser Darstellung und sei  $|\alpha; j, m\rangle$  eine Orthonormalbasis aus Eigenvektoren von  $\hat{J}^2$  und  $\hat{J}_3$  in  $\mathcal{H}$ .<sup>7</sup> Für die Matrixelemente eines irreduziblen Tensoroperators  $k$ -ter Stufe  $\hat{T}_q^k$  bezüglich dieser Basis gilt dann

$$\langle \alpha'; j', m' | \hat{T}_q^k | \alpha; j, m \rangle = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle \alpha', j' | \hat{T}^k | \alpha; j \rangle \langle k, q; j, m | j', m' \rangle. \quad (10.25)$$

Die Größe  $\langle \alpha'; j' | \hat{T}^k | \alpha; j \rangle$  heißt **reduziertes Matrixelement** und ist von  $m, m'$  und  $q$  unabhängig.

Zum Beweis benötigen wir das folgende

**Lemma 10.1** Für die Matrixelemente irreduzibler Darstellungen der Drehgruppe gilt:

$$\begin{aligned} D_{m'_1 m_1}^{j_1}(R) D_{m'_2 m_2}^{j_2}(R) \\ = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{m=-j}^j \sum_{m'=-j}^j \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \rangle \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2 | j, m' \rangle D_{m' m}^j(R), \end{aligned} \quad (10.26)$$

und

$$\langle D_{m'_1 m_1}^{j_1} | D_{m'_2 m_2}^{j_2} \rangle = \frac{1}{2j_1+1} \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2} \delta_{m'_1 m'_2}, \quad (10.27)$$

wobei

$$\langle D_{m'_1 m_1}^{j_1} | D_{m'_2 m_2}^{j_2} \rangle = \frac{1}{2\pi^2} \int dR D_{m'_1 m_1}^{j_1}(R)^* D_{m'_2 m_2}^{j_2}(R)$$

das Skalarprodukt in  $L^2(SO(3))$  bezüglich des Haarschen Maßes  $dR$  bezeichnet<sup>8</sup>.

**Beweis des Lemmas:**

Wir zeigen (10.26):

$$\begin{aligned} D_{m'_1 m_1}^{j_1}(R) D_{m'_2 m_2}^{j_2}(R) \\ = \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2 | D^{j_1}(R) \otimes D^{j_2}(R) | j_1, m_1; j_2, m_2 \rangle \\ = \sum_{j, j', m, m'} \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2 | j', m' \rangle \langle j, m | j_1, m_1; j_2, m_2 \rangle \langle j', m' | D^{j_1}(R) \otimes D^{j_2}(R) | j, m \rangle \\ = \sum_{j, j', m, m'} \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2 | j', m' \rangle \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \rangle \langle j', m' | \sum_{j''=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} D^{j''}(R) | j, m \rangle \\ = \sum_{j'', m, m'} \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2 | j'', m' \rangle \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j'', m \rangle D_{m' m}^{j''}(R). \end{aligned}$$

Zum Beweis der Orthogonalitätsrelation (10.27) verweisen wir auf die mathematische Standardliteratur<sup>9</sup>

### Bemerkungen 10.6

Die Orthogonalitätsrelationen (10.27) gelten für beliebige irreduzible unitäre Darstellungen kompakter Gruppen, wobei  $2j_1+1$  natürlich durch die Dimension der betrachteten Darstellung zu ersetzen ist. Zu (10.26) analoge Formeln kann man prinzipiell auch für beliebige kompakte Gruppen finden. Man muß dazu für die betrachtete Gruppe das Tensorprodukt beliebiger irreduzibler Darstellungen in irreduzible Komponenten zerlegen.

<sup>7</sup> $\alpha$  steht für alle anderen Quantenzahlen.

<sup>8</sup>in Eulerwinkeln:  $dR = \sin \theta d\theta d\psi d\phi$

<sup>9</sup>siehe z.B. A.O.Barut, R.Raczka, *Theory of Group Representations and Applications*, PWN Warsaw 1980, S.170

**Beweis des Theorems:**

Der Einfachheit wegen lassen wir bei der folgenden Rechnung  $\alpha$  bzw.  $\alpha'$  in den Eigenvektoren weg. Für ein fixiertes Tripel  $(j, j_1, j_2)$  berechnen wir unter Verwendung von (10.26):

$$\begin{aligned}
\langle jm | \hat{T}_{m_1}^{j_1} | j_2 m_2 \rangle &= \langle jm | \hat{D}(R)^\dagger \hat{D}(R) \hat{T}_{m_1}^{j_1} \hat{D}(R)^\dagger \hat{D}(R) | j_2 m_2 \rangle \\
&= \sum_{m', m'_2} \langle jm | \hat{D}(R)^\dagger | jm' \rangle \langle jm' | \hat{D}(R) \hat{T}_{m_1}^{j_1} \hat{D}(R)^\dagger | j_2 m'_2 \rangle \langle j_2 m'_2 | \hat{D}(R) | j_2 m_2 \rangle \\
&= \sum_{m', m'_1, m'_2} D_{m'm}^j(R)^* D_{m'_1 m_1}^{j_1}(R) D_{m'_2 m_2}^{j_2}(R) \langle jm' | \hat{T}_{m'_1}^{j_1} | j_2 m'_2 \rangle \\
&= \sum_{m', m'_1, m'_2} \sum_{j'=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{p_1=-j'}^{j'} \sum_{p_2=-j'}^{j'} D_{m'm}^j(R)^* D_{p_2 p_1}^{j'}(R) \\
&\quad \times \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j' p_1 \rangle \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2 | j' p_2 \rangle \langle jm' | \hat{T}_{m'_1}^{j_1} | j_2 m'_2 \rangle.
\end{aligned}$$

Wir integrieren über die Gruppe und verwenden (10.27). Dies ergibt:

$$\begin{aligned}
\langle jm | \hat{T}_{m_1}^{j_1} | j_2 m_2 \rangle &= \frac{1}{2j+1} \sum_{m', m'_1, m'_2} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | jm \rangle \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2 | jm' \rangle \langle jm' | \hat{T}_{m'_1}^{j_1} | j_2 m'_2 \rangle \\
&= \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | jm \rangle \cdot \frac{1}{2j+1} \sum_{m', m'_1, m'_2} \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2 | jm' \rangle \langle jm' | \hat{T}_{m'_1}^{j_1} | j_2 m'_2 \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | jm \rangle \langle j || \hat{T}^{j_1} || j_2 \rangle,
\end{aligned}$$

mit dem reduzierten Matrixelement

$$\langle j || \hat{T}^{j_1} || j_2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \sum_{m', m'_1, m'_2} \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2 | jm' \rangle \langle jm' | \hat{T}_{m'_1}^{j_1} | j_2 m'_2 \rangle.$$

Damit ist der Satz bewiesen.

**Bemerkungen 10.7**

Aus Eigenschaft a) der Clebsch-Gordan-Koeffizienten folgt: Ist  $\langle \alpha' j' m' | \hat{T}_q^k | \alpha j m \rangle \neq 0$ , dann muß

$$q = m' - m, \quad |j - j'| \leq k \leq j + j' \quad (10.28)$$

gelten. Dies führt zu **Auswahlregeln**, etwa bei der Untersuchung von Emission und Absorption von Strahlung. Im weiteren werden wir solche Auswahlregeln finden.

**10.5 Parität (Raumspiegelung)**

In der klassischen Mechanik ist die Spiegelung um den Ursprung gegeben durch:

$$I_p : (\vec{x}, \vec{p}) \mapsto (-\vec{x}, -\vec{p}).$$

Offenbar gilt  $I_p^2 = \text{id}$ . Wir suchen das quantenmechanische Analogon dieser Operation, d.h. wir suchen einen unitären oder antiunitären Operator  $\hat{P}$  im Hilbertraum  $\mathcal{H}$  des Systems mit den folgenden Eigenschaften:

$$\hat{P}^2 = e^{i\alpha} \mathbf{1}$$

und

$$\hat{P} \hat{x}_i \hat{P}^\dagger = -\hat{x}_i; \quad \hat{P} \hat{p}_i \hat{P}^\dagger = -\hat{p}_i. \quad (10.29)$$

Daraus ergibt sich für den Bahndrehimpuls die Transformation

$$\hat{P}\hat{L}_i\hat{P}^\dagger = \epsilon_{ijk}\hat{P}\hat{x}^j\hat{P}^\dagger\hat{P}\hat{p}^k\hat{P}^\dagger = \hat{L}_i. \quad (10.30)$$

In Analogie dazu **postulieren** wir die Invarianz des Spins:

$$\hat{P}\hat{S}_i\hat{P}^\dagger = \hat{S}_i. \quad (10.31)$$

Wenden wir diese Transformation auf die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen an, so erhalten wir

$$[\hat{P}\hat{x}_i\hat{P}^\dagger, \hat{P}\hat{p}_j\hat{P}^\dagger] = i\hbar\delta_{ij},$$

d.h.  $\hat{P}$  ist ein unitärer Operator. Damit können wir  $\hat{P}$  durch Multiplikation mit einer geeigneten Phase so undefinieren, daß  $e^{i\alpha} = 1$  wird. Dann gilt  $\hat{P}^2 = \mathbf{1}$  und damit ist  $\hat{P}$  außerdem selbstadjungiert,  $\hat{P} = \hat{P}^\dagger$ , also eine Observable. Wir nennen  $\hat{P}$  den **Paritätsoperator**.

Sei  $|\vec{x}, \mu\rangle$  ein verallgemeinerter Eigenvektor des Ortsoperators, wobei  $\mu$  weitere Quantenzahlen beschreibt. Dann ist offenbar

$$\hat{x}(\hat{P}|\vec{x}, \mu\rangle) = -\vec{x}(\hat{P}|\vec{x}, \mu\rangle),$$

also muß

$$\hat{P}|\vec{x}, \mu\rangle = \eta_A|-\vec{x}, \mu\rangle \quad (10.32)$$

gelten. Die **Phase**  $\eta_A$  heißt **intrinsische Parität**. Sie liefert eine wichtige Charakteristik von Teilchen der Sorte  $A$ . Wir werden dies später noch kommentieren. Analog gilt für Wellenfunktionen

$$(\hat{P}\psi)_\mu(\vec{x}) = \langle \vec{x}, \mu | \hat{P}\psi \rangle = \eta_A \langle -\vec{x}, \mu | \psi \rangle = \eta_A \psi_\mu(-\vec{x}).$$

Jeder selbstadjungierte Operator mit der Eigenschaft  $\hat{P}^2 = \mathbf{1}$  hat als Eigenwerte  $\pm 1$ . Offensichtlich sind  $\frac{1}{2}(\mathbf{1} + \hat{P})$  und  $\frac{1}{2}(\mathbf{1} - \hat{P})$  die Projektoren auf die Eigenunterräume zu den Eigenwerten  $+1$  bzw.  $-1$ . Damit können wir jeden Zustand  $|\psi\rangle$  in einen **geraden** und einen **ungeraden** Anteil zerlegen:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}(\hat{P} + \mathbf{1})|\psi\rangle + \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \hat{P})|\psi\rangle \equiv |\psi_+\rangle + |\psi_-\rangle.$$

Es gilt  $\hat{P}|\psi_+\rangle = |\psi_+\rangle$  und  $\hat{P}|\psi_-\rangle = -|\psi_-\rangle$  d.h. die zugehörigen Wellenfunktionen  $\psi_+$  und  $\psi_-$  sind symmetrisch bzw. antisymmetrisch.

Wir machen noch einige Bemerkungen zur Terminologie: Eine Observable heißt gerade bzw. ungerade, falls für alle Zustände  $|\psi\rangle$  und  $|\varphi\rangle$  gilt

$$\langle \psi_\pm | \hat{A} | \varphi_\mp \rangle = 0 \quad \text{bzw.} \quad \langle \psi_\pm | \hat{A} | \varphi_\pm \rangle = 0.$$

Ein Tensoroperator  $\hat{T}^n$  der Stufe  $n$  bezüglich der Drehgruppe heißt

i) Tensoroperator im engeren Sinne, falls gilt

$$\hat{P}\hat{T}\hat{P}^\dagger = (-1)^n\hat{T}^n \quad \text{und}$$

ii) Pseudotensoroperator, falls gilt

$$\hat{P}\hat{T}\hat{P}^\dagger = -(-1)^n\hat{T}^n.$$

## 10.6 Bewegungsumkehr (Zeitumkehr)

In der klassischen Mechanik ist die Operation der Bewegungsumkehr gegeben durch

$$I_t : (\vec{x}, \vec{p}) \mapsto (\vec{x}, -\vec{p}).$$

Es gilt  $I_t^2 = \text{id}$ . Ist die Hamiltonfunktion  $H$  invariant unter  $t \mapsto -t$ ,  $\vec{x} \rightarrow \vec{x}$  und  $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$ , so sind die mit  $I_t$  transformierten Bahnkurven dynamisch erlaubt. Dann findet die Bewegung entlang der gleichen Trajektorien mit entgegengesetzten Geschwindigkeiten statt.

Analog suchen wir in der Quantenmechanik einen (anti)–unitären Operator  $\hat{\Theta}$  mit den folgenden Eigenschaften:

$$\hat{\Theta}^2 = e^{i\alpha} \mathbf{1}$$

und

$$\hat{\Theta} \hat{x}_i \hat{\Theta}^\dagger = \hat{x}_i, \quad \hat{\Theta} \hat{p}_i \hat{\Theta}^\dagger = -\hat{p}_i. \quad (10.33)$$

Der Drehimpuls transformiert sich dann wie folgt:

$$\hat{\Theta} \hat{L}_i \hat{\Theta}^\dagger = -\hat{L}_i. \quad (10.34)$$

Das gleiche Transformationsverhalten **postulieren** wir für den Spin,

$$\hat{\Theta} \hat{S}_i \hat{\Theta}^\dagger = -\hat{S}_i. \quad (10.35)$$

Anwendung auf die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen liefert

$$[\hat{\Theta} \hat{x}_i \hat{\Theta}^\dagger, \hat{\Theta} \hat{p}_j \hat{\Theta}^\dagger] = -i\hbar \delta_{ij},$$

d.h.  $\hat{\Theta}$  ist ein **antiunitärer** Operator. Wir können also die Phase  $e^{i\alpha}$  nicht dadurch wegbringen, daß wir  $\hat{\Theta}$  mit einem Faktor multiplizieren. Andererseits sind für  $e^{i\alpha}$  nur zwei Werte erlaubt: aus  $\hat{\Theta} \hat{\Theta}^2 = \hat{\Theta}^2 \hat{\Theta}$  folgt nämlich  $\hat{\Theta}(e^{i\alpha} \mathbf{1}) = e^{i\alpha} \mathbf{1} \hat{\Theta}$  und wegen der Antiunitarität von  $\hat{\Theta}$  ergibt sich

$$e^{-i\alpha} \hat{\Theta} = e^{i\alpha} \hat{\Theta}.$$

Also ist  $(e^{i\alpha})^2 = 1$ , d.h.:

$$\hat{\Theta}^2 = \pm \mathbf{1}.$$

Das Vorzeichen hängt von der Teilchensorte ab. Wir betrachten zunächst ein spinloses Teilchen. Aus (10.33) folgt analog zum letzten Abschnitt<sup>10</sup>

$$\hat{\Theta} |\vec{x}\rangle = |\vec{x}\rangle,$$

also  $\hat{\Theta}^\dagger |\vec{x}\rangle = |\vec{x}\rangle$ , und damit

$$(\hat{\Theta} \psi)(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \hat{\Theta} \psi \rangle = \langle \hat{\Theta}^\dagger \vec{x} | \psi \rangle^* = \psi^*(\vec{x}).$$

In der Wirkung auf die Wellenfunktion eines Teilchens mit Spin 0 ist  $\hat{\Theta}$  mit dem antiunitären Operator  $\hat{K}$  der komplexen Konjugation identisch. Damit gilt

$$\hat{\Theta}^2 = \mathbf{1}.$$

Sei nun der Spin  $s \neq 0$ . Dann wählen wir den Ansatz

$$\hat{\Theta} = \hat{V} \hat{K},$$

wobei  $\hat{V}$  ein noch zu bestimmender unitärer Operator ist. Sei  $\psi$  eine  $(2s+1)$ –komponentige Wellenfunktion, also ein  $(2s+1)$ –Spinor. Dann folgt mit (10.35)

$$(\hat{S}_i \psi)(\vec{x}) = -(\hat{\Theta}^\dagger \hat{S}_i \hat{\Theta} \psi)(\vec{x}) = -(\hat{K}^\dagger \hat{V}^\dagger \hat{S}_i \hat{V} \hat{K} \psi)(\vec{x}) = -\langle \hat{K} \vec{x} | \hat{V}^\dagger \hat{S}_i \hat{V} | \psi^* \rangle^* = -(\hat{V}^\dagger \hat{S}_i \hat{V})^* \psi(\vec{x}).$$

Wir erhalten die folgende Gleichung für  $\hat{V}$ :

$$\hat{V}^\dagger \hat{S}_i \hat{V} = -\hat{S}_i^*. \quad (10.36)$$

<sup>10</sup>bis auf eine freie Phase, die wir hier gleich 1 setzen

Für  $s = \frac{1}{2}$  ergibt dies  $\hat{V}^\dagger \sigma_i \hat{V} = -\sigma_i^*$  und man findet  $\hat{V} = e^{i\gamma} \sigma_2$ . Legen wir  $\gamma = -\pi/2$  fest, so erhalten wir  $\hat{V} = -i\sigma_2$  und damit

$$(\hat{\Theta} \psi)(\vec{x}) = -i\hat{\sigma}_2 \psi^*(\vec{x}). \quad (10.37)$$

Wegen

$$\hat{V} = -i\sigma_2 = e^{-\frac{i\pi}{2}\sigma_2} = e^{-\frac{i}{\hbar}\pi\hat{S}_2}$$

haben wir

$$\hat{\Theta} = e^{-\frac{i}{\hbar}\pi\hat{S}_2} \hat{K}. \quad (10.38)$$

Man zeigt, daß diese Gleichung für jeden Spin gilt. Dann folgt

$$\hat{\Theta}^2 = (-1)^{2s}. \quad (10.39)$$

Die Verallgemeinerung aller dieser Formeln auf den Fall von  $N$  Teilchen ist offensichtlich.

## 10.7 Invarianzen und Erhaltungssätze

Sei  $\hat{H}$  der Hamiltonoperator eines quantenmechanischen Systems. Eine Symmetrietransformation  $S$  des Systems heißt **Invarianztransformation**, falls  $\hat{H}$  invariant unter  $S$  ist:

$$\hat{U}(S) \hat{H} \hat{U}(S)^\dagger = \hat{H}.$$

Dies ist äquivalent zu

$$[\hat{H}, \hat{U}(S)] = 0. \quad (10.40)$$

Ist diese Bedingung für alle Elemente einer Symmetriegruppe  $G$  erfüllt, so heißt  $G$  **Invarianzgruppe** des Systems.

### Bemerkungen 10.8

i) Sei das System konservativ und sei  $\hat{A}$  eine nicht explizit zeitabhängige Observable mit der Eigenschaft  $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$ . Dann ist  $\hat{A}$  eine **Erhaltungsgröße**. Wegen (10.40) sind alle nicht explizit zeitabhängigen Observablen, konstruiert aus den Operatoren  $\hat{U}(S)$  einer Invarianzgruppe, Erhaltungsgrößen. Wie in der klassischen Mechanik gehört also zu jeder Invarianzgruppe ein Satz von Erhaltungsgrößen.

ii) Energieerwartungswerte bleiben bei einer Invarianztransformation des Zustandes invariant:

$$\langle \psi | \hat{H} \psi \rangle = \langle \hat{U}(S) \psi | \hat{H} \hat{U}(S) \psi \rangle.$$

iii) Sei  $V_E$  der Eigenraum von  $\hat{H}$  zum Eigenwert  $E$ . Dann gilt  $\hat{U}(S) V_E = V_E$ , denn aus  $\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$  folgt

$$\hat{H} \hat{U}(S) |\psi\rangle = \hat{U}(S) \hat{H} |\psi\rangle = E \hat{U}(S) |\psi\rangle.$$

D.h.,  $V_E$  ist ein Darstellungsraum der Invarianzgruppe.

iv) Ist  $\hat{H}$  konservativ, dann ist der Zeitentwicklungsoperator des Systems  $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ . Sei  $\hat{U}(S)$  eine Invarianztransformation,  $\hat{U}(S) \hat{H} \hat{U}(S)^\dagger = \hat{H}$ . Dann gilt

$$\hat{U}(S) \hat{U}(t) \hat{U}(S)^\dagger = \begin{cases} \hat{U}(t) & \text{falls } \hat{U}(S) \text{ unitär} \\ \hat{U}(t)^\dagger = \hat{U}(-t) & \text{falls } \hat{U}(S) \text{ antiunitär} \end{cases}$$

Man überzeugt sich leicht davon, daß dieselbe Aussage für den Zeitentwicklungsoperator auch im nichtkonservativen Falle gilt. Ist  $\hat{U}(S)$  unitär, so läßt diese Transformation die Übergangswahrscheinlichkeiten invariant:

$$|\langle \hat{U}(S)\varphi | \hat{U}(t) \hat{U}(S) \psi \rangle|^2 = |\langle \varphi | \hat{U}(t) \psi \rangle|^2.$$

**Beispiele:**

a) **Invarianz unter Translationen:** Es gelte  $[\hat{H}, \hat{U}(\vec{a})] = 0$ , für alle  $\vec{a} \in \mathbb{R}^3$ . Mit

$$\hat{U}(\vec{a}) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{\vec{P}} \right\},$$

wobei  $\hat{\vec{P}}$  den Gesamtimpuls des Systems bezeichnet, erhalten wir durch Differenzieren nach  $\vec{a}$ :

$$[\hat{H}, \hat{\vec{P}}] = 0.$$

Wie in der klassischen Mechanik ist also **Translationsinvarianz** äquivalent zur **Impulserhaltung**. Für einen typischen Hamiltonoperator

$$\hat{H} = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i + V(\vec{x}_i) \quad (10.41)$$

liefert die Forderung nach Translationsinvarianz  $V(\vec{x}_i - \vec{a}) = V(\vec{x}_i)$ , d.h.  $V$  darf nur von den Relativkoordinaten  $\vec{x}_i - \vec{x}_j$  abhängen.

Es ist eine Grundüberzeugung der Physik, daß die dynamischen Gesetze abgeschlossener Systeme unabhängig von ihrer räumlichen Lage sind. Man spricht in diesem Zusammenhang von der **Homogenität des Raumes**. Bemerkungen und Literaturhinweise zu experimentellen Tests der Homogenität des Raumes findet man bei [Galindo/Pascual] Teil I, Abschnitt 7.10.

b) **Invarianz unter Rotationen:** Es gelte  $[\hat{H}, \hat{D}(R)] = 0$ , für alle  $R \in SO(3)$ . Wegen

$$\hat{D}(R) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{n} \cdot \hat{\vec{J}} \right\},$$

wobei  $\hat{\vec{J}}$  den Gesamtdrehimpuls bezeichnet, erhalten wir

$$[\hat{H}, \hat{\vec{J}}] = 0,$$

d.h. **Rotationsinvarianz** ist äquivalent zur **Erhaltung des Gesamtdrehimpulses**. Für einen typischen Hamiltonoperator (10.41) bedeutet die Forderung nach Rotationsinvarianz, daß  $V$  nur von den Beträgen der Koordinaten (bzw. der Relativkoordinaten) abhängen darf. Für ein System mit Spin sind nur **skalare** Kopplungen erlaubt, ein typisches Beispiel ist die Spinbahnkopplung  $\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}$ . Aber auch Terme der Form  $\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{x}}$  oder  $\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{p}}$  könnte man aus der Sicht der Rotationsinvarianz zum Hamiltonoperator hinzufügen. Die Invarianz der dynamischen Gesetze abgeschlossener Systeme unter Drehungen nennt man **Isotropie des Raumes**.

Die Drehimpulserhaltung verbietet a priori gewisse Prozesse in der Elementarteilchenphysik. Wir diskutieren ein Beispiel, nämlich den Zerfall

$$K^+ \rightarrow \pi^+ + \gamma.$$

$K^+$  und  $\pi^+$  sind Mesonen mit Spin 0. Im Ruhesystem von  $K^+$  verschwindet also der Gesamtdrehimpuls  $\hat{\vec{J}}^{(i)}$  vor der Reaktion. Nach der Reaktion haben  $\pi^+$  und  $\gamma$  entgegengesetzte Bewegungsrichtungen  $\pm \vec{P}$ . Die Projektionen der Bahndrehimpulse dieser Teilchen auf die Bewegungsrichtung verschwinden natürlich. Außerdem hat  $\pi^+$  den Spin 0 und folglich verschwindet die Projektion des Gesamtdrehimpulses von  $\pi^+$  auf die Bewegungsrichtung. Dagegen hat das Photon  $\gamma$  eine nichtverschwindende Projektion des Spins auf  $\vec{P}$  (Helizität):

$$\hat{\vec{P}} \cdot \hat{\vec{S}}_\gamma = \pm \hbar.$$

Damit ist die Projektion des Gesamtdrehimpulse  $\hat{J}^{(f)}$  auf die Bewegungsrichtung nach dem Zerfall verschieden von Null, d.h. der Gesamtdrehimpuls ist nicht erhalten. Im Experiment wurde der folgende Wert für die betrachtete Zerfallsrate gefunden:

$$\frac{\Gamma(K^+ \rightarrow \pi^+ \gamma)}{\Gamma(K^+ \rightarrow \text{alles})} < 1.4 \times 10^{-6}.$$

Eine typische Größenordnung im Falle von erlaubten Prozessen ist dagegen  $\sim 10^{-2}$ .

c) **Invarianz unter Parität:** Es gelte

$$[\hat{H}, \hat{P}] = 0. \quad (10.42)$$

Sei  $|\psi\rangle = |\psi_+\rangle + |\psi_-\rangle$  die durch  $\hat{P}$  definierte Zerlegung von  $|\psi\rangle$  in gerade bzw. ungerade Zustände. Wegen (10.42) bleiben gerade und ungerade Zustände während ihrer Zeitentwicklung gerade bzw. ungerade. Für spinabhängige Wechselwirkungen liefert die Forderung nach Paritätsinvarianz des Hamiltonoperators, verglichen mit der Rotationsinvarianz, zusätzliche Einschränkungen. So sind Terme der Form  $f(r) \vec{S} \cdot \vec{L}$  erlaubt, während  $f(r) \vec{S} \cdot \vec{x}$  und  $f(r) \vec{S} \cdot \vec{p}$  zu verwerfen sind. Ist (10.42) erfüllt, dann können die Eigenfunktionen von  $\hat{H}$  so gewählt werden, daß sie gleichzeitig Eigenfunktionen von  $\hat{P}$  sind. Für die Wellenfunktion  $\psi(\vec{x}) = f(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$  eines Teilchens im Zentralpotential ist dies automatisch erfüllt, denn es gilt<sup>11</sup>

$$(\hat{P}\psi)(\vec{x}) = f(r) Y_{lm}(\pi - \theta, \pi + \varphi) = f(r) (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

d.h.,  $\psi(\vec{x})$  ist Eigenzustand zum Eigenwert  $(-1)^l$ .

In der Elementarteilchenphysik ist das Paritätskonzept von fundamentaler Bedeutung. Wie bereits bemerkt, besitzt jedes Teilchen seine intrinsische Parität  $\eta_A$ . Es zeigt sich, daß die **elektromagnetische** und die **starke Wechselwirkung paritätserhaltend** sind. Man kann etwa jedes Hadron mit einer intrinsischen Parität  $\eta_a = \pm 1$  so versehen, daß die Streuamplitude unter Paritätstransformation invariant bleibt. (Experimentell relevant sind natürlich nur die Verhältnisse von intrinsischen Paritäten. Ob man also dem Proton +1 oder -1 zuordnet, ist Konventionssache.) Das sogenannte Quarkmodell (zu dem wir im nächsten Abschnitt kommen) liefert eine systematische Methode zur Zuordnung dieser Paritäten: Quarks haben Parität +1 und Antiquarks -1. Daraus liest man die Paritäten für die Hadronen ab.

Die **schwache Wechselwirkung** ist **paritätsverletzend**, z.B. sind die folgenden Zerfälle möglich:

$$K^+ \begin{cases} \nearrow \pi^+ + \pi^0 \\ \searrow \pi^+ + \pi^- + \pi^+ \end{cases}$$

Im ersten Prozess ist die Parität erhalten, im zweiten nicht.

d) **Invarianz unter Bewegungsumkehr:** Sei das betrachtete System **konservativ** und gelte

$$[\hat{H}, \hat{\Theta}] = 0. \quad (10.43)$$

Dann gilt für den Zeitentwicklungsoperator  $\hat{\Theta} \hat{U}(t) \hat{\Theta}^\dagger = \hat{U}(-t)$  und damit folgt

$$\hat{\Theta} |\psi(t)\rangle = \hat{\Theta} \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle = \hat{\Theta} \hat{U}(t) \hat{\Theta}^\dagger \hat{\Theta} |\psi(0)\rangle = \hat{U}(-t) \hat{\Theta} |\psi(0)\rangle,$$

also

$$\hat{U}(t) (\hat{\Theta} |\psi(t)\rangle) = \hat{\Theta} |\psi(0)\rangle,$$

<sup>11</sup>wie wir aus Teil I wissen

die mit  $\hat{\Theta}$  transformierten Zustände werden also in umgekehrter Zeitfolge durchlaufen. Dies kann man auch durch Anwenden von  $\hat{\Theta}$  auf die Schrödingergleichung veranschaulichen. Wir erhalten:

$$\hat{\Theta} \left( i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\Theta} |\psi(t)\rangle \right) = -i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\Theta} |\psi(t)\rangle = \hat{\Theta} \hat{H} |\psi(t)\rangle = \hat{H} \hat{\Theta} |\psi(t)\rangle,$$

also

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\Theta} |\psi(-t)\rangle = \hat{H} \hat{\Theta} |\psi(-t)\rangle.$$

Ist  $|\psi(t)\rangle$  eine Lösung der Schrödingergleichung, dann ist auch  $\hat{\Theta} |\psi(-t)\rangle$  eine Lösung.

Ist das System **nichtkonservativ**, so muß die Definition (10.40) für den Fall der Invarianz unter Bewegungsumkehr folgendermaßen **modifiziert** werden:

$$\hat{U}(S) \hat{H}(t) \hat{U}(S)^\dagger = \hat{H}(-t). \quad (10.44)$$

Dann gelten wieder die oben getroffenen Aussagen.

Wir geben noch eine andere, äquivalente Formulierung der Invarianzforderung (10.43) an: Die Wahrscheinlichkeit, daß sich das System zum Zeitpunkt  $t$  im Zustand  $|\varphi\rangle$  befindet, wenn es zum Zeitpunkt  $t_0$  im Zustand  $|\psi\rangle$  präpariert wurde, ist gleich der Wahrscheinlichkeit, daß sich das System zum Zeitpunkt  $t$  im Zustand  $\hat{\Theta} |\psi\rangle$  befindet, wenn es zum Zeitpunkt  $t_0$  im Zustand  $\hat{\Theta} |\varphi\rangle$  war:

$$|\langle \varphi | \hat{U}(t, t_0) | \psi \rangle|^2 = |\langle \hat{\Theta} \psi | \hat{U}(t, t_0) | \hat{\Theta} \varphi \rangle|^2.$$

Dies ist das **Prinzip der Mikroreversibilität**.

Wie in den vorigen Beispielen erhalten wir aus der Forderung nach Invarianz unter Bewegungsumkehr wieder Einschränkungen für zulässige Hamiltonoperatoren: So ist etwa ein Kopplungsterm der Form  $(\tilde{S}^{(1)} \times \tilde{S}^{(2)}) \cdot \vec{L}$  für ein System von zwei Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen zu verwerfen. Er ist dagegen invariant unter Translationen, Drehungen und Parität.

Schließlich ergeben sich aus der Invarianz von  $\hat{H}$  unter Bewegungsumkehr Konsequenzen für das **Spektrum** und die Eigenfunktionen. Für ein System spinloser Teilchen können die Eigenfunktionen von  $\hat{H}$  in der Ortsdarstellung **reell** gewählt werden: Sei  $\psi_1$  ein Eigenvektor zum Eigenwert  $E$ . Dann ist

$$\phi_1 := \psi_1 + \hat{\Theta} \psi_1 = \psi_1 + \psi_1^*$$

reell und Eigenvektor zum gleichen Eigenwert:

$$\hat{H} \phi_1 = E \psi_1 + \hat{H} \hat{\Theta} \psi_1 = E \psi_1 + \hat{\Theta} \hat{H} \psi_1 = E (\psi_1 + \hat{\Theta} \psi_1) = E \phi_1.$$

Falls  $E$  entartet ist, muß ein zu  $\phi_1$  orthogonaler Eigenvektor  $\psi_2$  existieren. Dann bilden wir wieder  $\phi_2 := \psi_2 + \hat{\Theta} \psi_2$  usw. Dasselbe Argument liefert für ein System mit einer geraden Anzahl von Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen, daß die Eigenfunktionen von  $\hat{H}$  alle so gewählt werden können, daß  $\hat{\Theta} \psi = \psi$  gilt.

Liegt dagegen ein System mit einer **ungeraden** Anzahl von Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen vor, dann kann man im Eigenunterraum von  $E$  eine Basis aus Paaren von zueinander konjugiert komplexen Vektoren wählen. Damit ist der Entartungsgrad der Eigenwerte des Hamiltonoperators in diesem Falle stets **gerade**, also mindestens 2. Dies ist die **Kramersche Regel**, vgl. Hausaufgabe Nr. 11.

Abschließend bemerken wir noch, daß eine direkte experimentelle Überprüfung der Bewegungsumkehrinvarianz – etwa in der Elementarteilchenphysik – sehr schwierig ist. Es gilt aber die **CPT**-Invarianz<sup>12</sup>. Zeigt man also **CP**-Verletzung, so kann man **T**-Verletzung folgern.

<sup>12</sup>C bedeutet Ladungskonjugation, siehe letztes Kapitel dieser Vorlesung

## 10.8 Innere Symmetrien. Der Isospin

**Innere Symmetrien** sind solche, die sich nicht aus Raum-Zeit-Verhältnissen ableiten lassen. Sie spielen eine fundamentale Rolle in der modernen Elementarteilchenphysik und in der Quantenfeldtheorie.

Den Grundstein für diese Entwicklung hat Heisenberg 1932 mit seinem Konzept des **Isospins** gelegt: Vernachlässigt man die elektroschwache Wechselwirkung, so kann man Proton und Neutron aufgrund ihres minimalen Massenunterschiedes als (aus der Sicht der starken Wechselwirkung) ununterscheidbare Teilchen (genannt Nukleonen) auffassen. Konsequenterweise sollte eine Invarianzgruppe existieren, die den Hamiltonoperator der starken Wechselwirkung invariant läßt und deren Transformationen die Nukleonen ineinander überführen. Heisenberg schlug dafür die Gruppe  $SU(2)$  vor. Sie wird in diesem Zusammenhang als **Isospingruppe** bezeichnet. Die Quantenzahl, die die irreduziblen Darstellungen der Isospingruppe numeriert, wird **Isospin** und die Erzeugenden  $\{\hat{I}_i\}$  in der jeweiligen Darstellung werden **Isospinkomponenten** genannt. Die Isospinkomponenten erfüllen, wie wir aus der Theorie des Drehimpulses wissen, die folgenden Vertauschungsrelationen:

$$[\hat{I}_i, \hat{I}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{I}_k. \quad (10.45)$$

Die aus Eigenvektoren von  $\hat{I}_3$  gebildeten natürlichen Orthonormalbasen  $\{|I, M\rangle : M = -I, \dots, I\}$  der irreduziblen Darstellungen heißen **Isomultipletts**.

Wir bezeichnen den Zustand des Protons mit  $|p\rangle$  und den des Neutrons mit  $|n\rangle$ . Nach obiger Annahme bilden beide das **Isodublett**  $(|p\rangle, |n\rangle)$ . Identifizieren wir  $|p\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$  und  $|n\rangle = |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ , dann gilt

$$\hat{I}_3|p\rangle = \frac{1}{2}|p\rangle; \quad \hat{I}_3|n\rangle = -\frac{1}{2}|n\rangle. \quad (10.46)$$

Bilden wir die Leiteroperatoren  $\hat{I}_\pm = \hat{I}_1 \pm i\hat{I}_2$ , so gilt

$$\hat{I}_+|p\rangle = 0, \quad \hat{I}_+|n\rangle = |p\rangle, \quad \hat{I}_-|p\rangle = |n\rangle, \quad \hat{I}_-|n\rangle = 0. \quad (10.47)$$

In Matrixdarstellung haben wir

$$\hat{I}_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{I}_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{I}_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{I}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{I}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

und  $|p\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  bzw.  $|n\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ . Wir geben zwei weitere Isomultipletts an: Zur Darstellung mit Isospin 1 gehört das Triplet der Pionen

$$(\pi^+, \pi^0, \pi^-) = (|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle)$$

und zur Darstellung mit Isospin  $\frac{3}{2}$  gehört das Quadruplett der  $\Delta$ -Resonanzen

$$(\Delta^{++}, \Delta^+, \Delta^0, \Delta^-) = (|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle).$$

Unter Verwendung der Regeln der Addition von Drehimpulsen kann man 2-Nukleon-Zustände bilden, z.B. entsteht das Deuteron als antisymmetrischer Isospin-0-Zustand  $\frac{1}{\sqrt{2}}(pn - np)$ . Analog bildet man das Isospin-1-Triplett  $(pp, \frac{1}{\sqrt{2}}(pn + np), nn)$ .

Um tiefer in die Welt der Elementarteilchen einzudringen, mussten weitere innere Symmetrien aufgedeckt werden. Eine wichtige Rolle auf diesem Wege spielte die **Strangeness**  $S$ . Sie wurde 1953 von Gell-Mann eingeführt. Die untenstehende Tabelle enthält eine Liste der Strangeness wichtiger Hadronen:

Hadron	$S$
$p, n, \pi^+, \pi^0, \pi^-$	0
$\Lambda, \Sigma^+, \Sigma^0, \Sigma^-$	-1
$\Xi^0, \Xi^-$	-2
$K^0, K^+$	+1
$\bar{K}^0, K^-$	-1

Bei starken Wechselwirkungen wird die Strangeness erhalten. So ist z.B. der Prozess

$$\pi^- + p \rightarrow K^0 + \Lambda$$

erlaubt, da  $S_{\pi^-} = 0$ ,  $S_p = 0$ ,  $S_{K^0} = +1$  und  $S_\Lambda = -1$  ist (Die Strangeness ist additiv). Dagegen verletzt der Prozess

$$\pi^- + p \rightarrow K^- + p$$

die Erhaltung des Strangeness, er wird nicht beobachtet. Bei Prozessen der schwachen Wechselwirkung kann die Erhaltung der Strangeness jedoch verletzt werden, z.B. ist der Prozess

$$\Lambda \rightarrow p + \pi^- ,$$

erlaubt, er hat aber eine sehr geringe Übergangsrate.

Parallel dazu führten Stückelberg und Pais 1953 die **Baryonenzahl**  $B$  ein. Für Baryonen und Anti-Baryonen (stark wechselwirkende Teilchen mit halbzahligem Spin) wurde  $B = +1$  bzw.  $B = -1$  gesetzt und für die Mesonen (stark wechselwirkende Teilchen mit ganzzahligen Spin) postulierte man  $B = 0$ . Aus  $\hat{S}$  und  $\hat{B}$  bildete man die **Hyperladung**

$$\hat{Y} = \hat{S} + \hat{B} \quad (10.48)$$

und 1955 schlugen Gell-Mann und Nishijima die folgende Vorschrift zur Berechnung der **elektrischen Ladung** eines Zustandes vor:

$$\hat{Q} = \hat{I}_3 + \frac{1}{2}\hat{Y} . \quad (10.49)$$

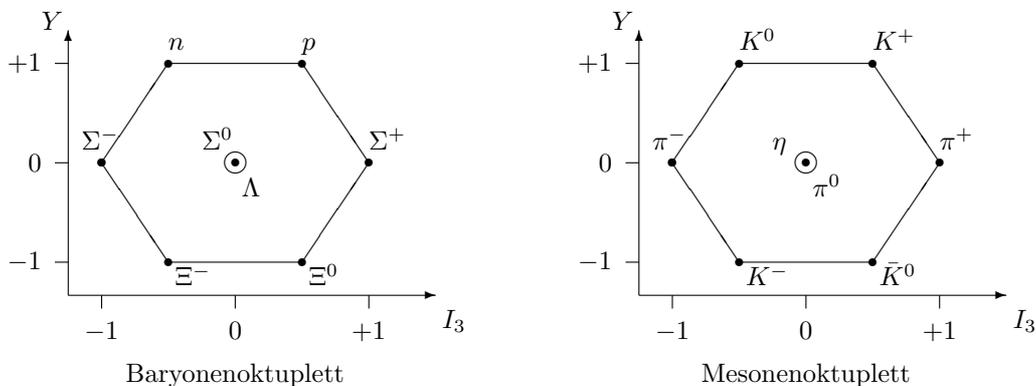
Für  $p$  und  $n$  erhält man  $Y = 1$  und damit liefert diese Formel

$$\begin{aligned} \hat{Q}|p\rangle &= \frac{1}{2}|p\rangle + \frac{1}{2}|p\rangle = |p\rangle \\ \hat{Q}|n\rangle &= -\frac{1}{2}|n\rangle + \frac{1}{2}|n\rangle = 0 . \end{aligned}$$

Fassen wir  $\hat{Y}$  als Erzeugende einer inneren Symmetriegruppe  $U(1)$  auf, so haben wir insgesamt eine  $SU(2) \times U(1)$ -Symmetrie. Im nächsten Schritt stellte man sich die folgende Frage: Ist es möglich, Isospin und Hyperladung in ein vereinheitlichtes Symmetriekonzept einzubauen? Aus mathematischer Sicht ist die einfachste Lösung die Einführung der Gruppe  $SU(3)$ , denn diese enthält  $SU(2) \times U(1)$ . Tatsächlich schlugen Gell-Mann und Ne'man 1961 die innere Symmetriegruppe  $SU(3)$  vor. Heute heißt diese Gruppe **Flavour-Gruppe**. Die Lie-Algebra  $su(3)$  der  $SU(3)$  enthält die zweidimensionale kommutative Unter-algebra der Diagonalmatrizen mit Spur 0 (Cartanunteralgebra). Die dritte Komponente des Isospins  $\hat{I}_3$  und die Hyperladung  $\hat{Y}$  werden mit den Erzeugenden dieser Unter-algebra identifiziert. Es gilt also

$$[\hat{I}_3, \hat{Y}] = 0 , \quad (10.50)$$

und damit können in jeder Darstellung Basisvektoren so gewählt werden, daß sie gleichzeitig Eigenzustände von  $\hat{I}_3$  und  $\hat{Y}$  sind. Die am besten bekannten Baryonen und Mesonen wurden nun als Oktetts (8-dimensionale Darstellung der  $SU(3)$ ) klassifiziert:



In Wirklichkeit sind die Massen der in einem Multiplett vereinten Teilchen natürlich nicht gleich, es gibt Unterschiede von bis zu 20%. Trotzdem feierte man mit dieser Methode sehr schnell spektakuläre Erfolge. Man sagte die Existenz des  $\Omega^-$ -Teilchens (als Element des leichtesten Baryonendekupletts) voraus. Bereits 1964 wurde dieses Teilchen im Experiment gefunden.

Bemerkenswert war, daß man keine Triplets (fundamentale Darstellungen der  $SU(3)$ ) fand. Andererseits lassen sich alle höherdimensionalen Darstellungen der  $SU(3)$  aus fundamentalen Darstellungen (aus der definierenden und der zu ihr kontragredienten Darstellung) durch Tensorproduktbildung konstruieren. Dies legte den nächsten Schritt nahe: 1964 entwickelten Gell-Mann und Zweig das **Quarkmodell**. Ein Quark  $q$  ist ein Element eines  $SU(3)$ -Triplets ( $u, d, s$ ) von Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen mit den folgenden intrinsischen Quantenzahlen:

	$I$	$I_3$	$Y$	$S$	$B$	$Q$
$u$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$
$d$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	0	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$
$s$	0	0	$-\frac{2}{3}$	-1	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$

Mesonen werden aus je einem Quark und einem Antiquark gebildet und Baryonen werden aus drei Quarks zusammengesetzt. Zum Beispiel sind die Pionen gegeben durch

$$\pi^+ \sim u\bar{d}, \quad \pi^0 \sim \frac{1}{\sqrt{2}}(u\bar{u} - d\bar{d}), \quad \pi^- \sim d\bar{u}$$

und Protonen bzw. Neutronen durch

$$p \sim (uud)_8, \quad n \sim (ddu)_8.$$

Wir betrachten das Baryon  $\Omega^-$ . Es hat Spin  $s = \frac{3}{2}$  und Strangeness  $S = -3$  und besteht damit aus drei  $s$ -Quarks, die alle Spin  $\frac{1}{2}$  haben. Da  $\Omega^-$  das leichteste Baryon mit Strangeness  $S = -3$  ist, repräsentiert es den Grundzustand für das System der drei  $s$ -Quarks. In diesem Zustand sollte der Bahndrehimpuls verschwinden und die räumliche Komponente der Wellenfunktion sollte symmetrisch sein. Um den Spin  $\frac{3}{2}$  zu bilden, müssen alle drei Quarks die gleiche Spinrichtung haben. Dies liefert aber eine vollständig symmetrische Wellenfunktion

$$\Omega^- \sim s^\uparrow s^\uparrow s^\uparrow \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3),$$

im **Widerspruch zum Pauliprinzip**<sup>13</sup>. Um dieses Dilemma zu umgehen, schlug wiederum Gell-Mann im Jahre 1972 einen neuen Freiheitsgrad vor, die **Farbladung**. Jeder Flavour tritt in drei Farben auf:

$$(u_1, u_2, u_3), \quad (d_1, d_2, d_3), \quad (s_1, s_2, s_3).$$

Damit kann man für  $\Omega^-$  eine vollständig antisymmetrische Wellenfunktion aufschreiben:

$$\Omega^- \sim \epsilon_{\alpha\beta\gamma} s_\alpha^\uparrow s_\beta^\uparrow s_\gamma^\uparrow \psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3). \quad (10.51)$$

Diese Funktion ist offensichtlich invariant unter Color- $SU(3)$ -Transformationen  $q^\alpha \mapsto U^\alpha_\beta q^\beta$ . Es liegt also nahe, eine weitere  $SU(3)$ -Symmetrie-Gruppe, die Color- $SU(3)$ -Gruppe, einzuführen. Man **postulierte**, daß alle Hadronen unter Color-Transformationen **invariant** sein müssen.

Abschließend bemerken wir, daß damit ein entscheidender Schritt in Richtung der modernen Eichfeldtheorien getan war. Darauf können wir aber hier nicht eingehen.

<sup>13</sup>siehe nächster Abschnitt



# Kapitel 11

## Identische Teilchen

### 11.1 Symmetrisierungsprinzip und Zusammenhang zwischen Spin und Statistik

**Ununterscheidbare** oder **identische Teilchen** sind Teilchen, die sich in allen Eigenschaften gleichen. Im Rahmen der Quantenmechanik bedeutet dies: Sie haben gleiche Quantenzahlen und sind durch Messung nicht unterscheidbar.

Wir weisen auf einen grundlegenden Unterschied zur klassischen Mechanik hin: Sind zwei Teilchen zum Zeitpunkt  $t = 0$  durch Messung ihrer Orte und Impulse unterschieden, so können sie durch Verfolgen ihrer (eindeutig bestimmten) Bahnkurven zu jedem späteren Zeitpunkt unterschieden werden. In der Quantenmechanik haben wir keine Bahnkurven. Präpariert man etwa ein System identischer Teilchen in Gestalt von Wellenpaketen mit streng getrennten Aufenthaltswahrscheinlichkeiten, so wird es im Laufe der Zeitentwicklung zu einer Überlappung der Pakete kommen, so daß eine eindeutige Identifizierung nicht mehr möglich ist.

Wir beschränken uns zunächst auf ein System von zwei ununterscheidbaren Teilchen, deren Hilbertraum  $\mathcal{H}$  sei. Dann ist  $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$  der Hilbertraum des Systems. Um das Konzept der **Ununterscheidbarkeit** mathematisch zu realisieren, betrachten wir die folgende Darstellung der Permutationsgruppe  $S_2$  von zwei Elementen ( $\mathbf{1}, \hat{\Pi}_{12}$ ) im Zustandsraum  $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$ :

$$\mathbf{1}(|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle) = |\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle, \quad \hat{\Pi}_{12}(|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle) = |\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle. \quad (11.1)$$

Offenbar ist  $\hat{\Pi}_{12}$  ein unitärer Operator. Zusätzlich gilt

$$\hat{\Pi}_{12}^2 = \mathbf{1}.$$

$\hat{\Pi}_{12}$  ist damit insbesondere selbstadjungiert.

Wir nennen zwei Teilchen **ununterscheidbar**, falls **alle** Observablen des Systems mit den Erzeugenden ( $\mathbf{1}, \hat{\Pi}_{12}$ ) der Permutationsgruppe  $S_2$  vertauschen. Wir fordern also, daß  $S_2$  eine **Invarianzgruppe** des Systems im Sinne des Abschnittes 10.7 ist. Neben der trivialen Forderung  $[\hat{A}, \mathbf{1}] = 0$  haben wir:

$$[\hat{A}, \hat{\Pi}_{12}] = 0$$

für alle Observable  $\hat{A}$ . Dann gilt

$$\langle \hat{\Pi}_{12}\Psi | \hat{A} | \hat{\Pi}_{12}\Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle,$$

d.h. die Teilchen sind durch Messung in der Tat nicht unterscheidbar.

**Bemerkungen 11.1**

Offensichtlich ist damit nicht jeder selbstadjungierte Operator im Zweiteilchen-Hilbertraum eine Observable des Systems identischer Teilchen. Z. B. ist der Gesamtimpuls eine Observable, dagegen die Orts- und Impulsoperatoren der einzelnen Teilchen nicht:

$$(\hat{x} \otimes \mathbf{1})\hat{\Pi}_{12}(\phi \otimes \psi) = \hat{x}\psi \otimes \phi \neq \psi \otimes \hat{x}\phi = \hat{\Pi}_{12}(\hat{x} \otimes \mathbf{1})(\phi \otimes \psi).$$

Sei  $\lambda$  ein **Eigenwert** von  $\hat{\Pi}_{12}$ . Aus  $\hat{\Pi}_{12}^2 = \mathbf{1}$  folgt  $\lambda = \pm 1$ . Wie im Falle der Parität existieren also Projektoren  $\frac{1}{2}(\mathbf{1} + \hat{\Pi}_{12})$  und  $\frac{1}{2}(\mathbf{1} - \hat{\Pi}_{12})$  auf die Eigenunterräume zu den Eigenwerten 1 bzw.  $-1$ , so daß alle  $\Psi \in \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$  eindeutig in einen geraden und in einen ungeraden Anteil zerlegbar sind:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \hat{\Pi}_{12})|\Psi\rangle + \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \hat{\Pi}_{12})|\Psi\rangle \equiv |\Psi_+\rangle + |\Psi_-\rangle.$$

Der Hilbertraum  $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$  zerfällt also in die direkte Summe der obigen Eigenunterräume. Wir untersuchen diese Teilräume genauer. Sei  $|\Psi\rangle = |\psi\rangle|\varphi\rangle$ . Dann gilt:

$$\begin{aligned} |\Psi_+\rangle &= \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \hat{\Pi}_{12})|\psi\rangle|\varphi\rangle = \frac{1}{2}(|\psi\rangle|\varphi\rangle + |\varphi\rangle|\psi\rangle), \\ |\Psi_-\rangle &= \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \hat{\Pi}_{12})|\psi\rangle|\varphi\rangle = \frac{1}{2}(|\psi\rangle|\varphi\rangle - |\varphi\rangle|\psi\rangle). \end{aligned}$$

Der Eigenraum zum Eigenwert  $+1$  besteht also aus den **vollständig symmetrischen** Vektoren,  $|\Psi_+\rangle \in \mathcal{H} \otimes_s \mathcal{H}$ , und der Eigenraum zum Eigenwert  $-1$  besteht aus den **vollständig antisymmetrischen** Vektoren,  $|\Psi_-\rangle \in \mathcal{H} \otimes_a \mathcal{H}$ . Deshalb nennen wir die Operatoren

$$\hat{S} := \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \hat{\Pi}_{12}), \quad \hat{A} := \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \hat{\Pi}_{12}) \quad (11.2)$$

**Symmetrisierungs- bzw. Antisymmetrisierungsoperator.**

Wir haben die folgende Zerlegung:

$$\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} = \mathcal{H} \otimes_s \mathcal{H} \oplus \mathcal{H} \otimes_a \mathcal{H}. \quad (11.3)$$

Sei  $\Psi \in \mathcal{H} \otimes_a \mathcal{H}$  und  $\Phi \in \mathcal{H} \otimes_s \mathcal{H}$ . Dann gilt:

$$0 = \langle \Phi | [\hat{A}, \hat{\Pi}_{12}] | \Psi \rangle = \langle \Phi | \hat{A} | \hat{\Pi}_{12} \Psi \rangle - \langle \hat{\Pi}_{12} \Phi | \hat{A} | \Psi \rangle = -\langle \Phi | \hat{A} | \Psi \rangle - \langle \Phi | \hat{A} | \Psi \rangle,$$

d.h.: Matrixelemente von Observablen zwischen Zuständen **verschiedener** Symmetrie verschwinden.

Wir haben also eine **Superauswahlregel**:

*Physikalische Zustände eines Systems identischer Teilchen liegen entweder in  $\mathcal{H} \otimes_s \mathcal{H}$  oder in  $\mathcal{H} \otimes_a \mathcal{H}$ . Welcher der beiden Räume physikalisch realisiert ist, wird durch das Experiment entschieden.*

**Bemerkungen 11.2**

- i) Wir erinnern an das Konzept der Superauswahlregeln, indem wir obigen Sachverhalt weiter kommentieren: Sei  $\hat{P}$  der Projektor auf einen reinen Zustand  $[\Psi]$  des Gesamtsystems. Da  $[\hat{P}, \hat{\Pi}_{12}] = 0$  gelten muß, folgt

$$\hat{\Pi}_{12}\Psi = \hat{\Pi}_{12}\hat{P}\Psi = \hat{P}\hat{\Pi}_{12}\Psi,$$

d.h.  $\hat{\Pi}_{12}\Psi$  muß proportional zu  $\Psi$  sein. Also muß  $\Psi$  entweder symmetrisch oder antisymmetrisch sein. Mit anderen Worten: Eine Superposition einer symmetrischen und einer antisymmetrischen Wellenfunktion kann nicht präpariert werden. Das Superpositionsprinzip gilt nur noch in den Superauswahlsektoren  $\mathcal{H} \otimes_s \mathcal{H}$  und  $\mathcal{H} \otimes_a \mathcal{H}$ .

- ii) Insbesondere muß natürlich der Hamiltonoperator des Systems mit  $\hat{\Pi}_{12}$  kommutieren,  $[\hat{\Pi}_{12}, \hat{H}] = 0$ . Damit kommutiert auch der Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}(t)$ , d.h., die Zustände ändern ihren Symmetriecharakter im Laufe der Zeitentwicklung nicht.

iii) Sei  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$  und sei  $\{|e_i\rangle\}$ ,  $i = 1, 2$  eine Basis in  $\mathcal{H}$ . Dann ist  $\{|e_i\rangle|e_j\rangle\}_{i,j=1,2}$  eine Basis in  $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$ . Wir zerlegen den Hilbertraum des Systems nach (11.3): Offenbar ist  $\mathcal{H} \otimes_a \mathcal{H}$  ein eindimensionaler Darstellungsraum, aufgespannt durch

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|e_1\rangle|e_2\rangle - |e_2\rangle|e_1\rangle) \equiv |e_a\rangle.$$

Die Darstellung ist definiert durch

$$\mathbf{1}|e_a\rangle = |e_a\rangle, \quad \hat{\Pi}_{12}|e_a\rangle = -|e_a\rangle.$$

$\mathcal{H} \otimes_s \mathcal{H}$  ist ein 3-dimensionaler Teilraum, aufgespannt durch

$$|e_s^{(1)}\rangle = |e_1\rangle|e_1\rangle, \quad |e_s^{(2)}\rangle = |e_2\rangle|e_2\rangle, \quad |e_s^{(3)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_1\rangle|e_2\rangle + |e_2\rangle|e_1\rangle).$$

Er zerfällt in drei irreduzible eindimensionale Teilräume  $\mathcal{H}_s^{(i)}$ , aufgespannt durch die Vektoren  $|e_s^{(i)}\rangle$ ,

$$\mathcal{H} \otimes_s \mathcal{H} = \bigoplus_{i=1}^3 \mathcal{H}_s^{(i)},$$

denn  $S_2$  läßt offensichtlich jeden dieser Teilräume invariant:

$$\mathbf{1}|e_s^{(i)}\rangle = |e_s^{(i)}\rangle, \quad \hat{\Pi}_{12}|e_s^{(i)}\rangle = |e_s^{(i)}\rangle.$$

Wir beschreiben die Wirkung der  $S_2$  auf die Wellenfunktion eines Systems zweier identischer Teilchen mit beliebigem Spin: Seien  $\xi_i$  die Koordinaten des  $i$ -ten Teilchens, definiert durch seine Ortskoordinaten  $\vec{x}_i$  und die dritte Komponente des Spins  $m_{S_i} \equiv \sigma_i$ , also  $\xi_i = (\vec{x}_i, \sigma_i)$ . Dann gilt

$$\hat{\Pi}_{12}|\xi_1, \xi_2\rangle = |\xi_2, \xi_1\rangle. \quad (11.4)$$

Setzen wir

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) := \langle \xi_1, \xi_2 | \Psi \rangle, \quad (11.5)$$

dann haben wir die folgende Wirkung von  $\hat{\Pi}_{12}$  auf die Wellenfunktion:

$$(\hat{\Pi}_{12}\Psi)(\xi_1, \xi_2) = \langle \xi_1, \xi_2 | \hat{\Pi}_{12}\Psi \rangle = \langle \xi_1, \xi_2 | \hat{\Pi}_{12}^\dagger \Psi \rangle = \langle \xi_2, \xi_1 | \Psi \rangle = \Psi(\xi_2, \xi_1). \quad (11.6)$$

Wir behandeln die **Verallgemeinerung auf  $N$  Teilchen**<sup>1</sup>: Der Hilbertraum des Systems ist

$$\mathcal{H}_N = \bigotimes_{i=1}^N \mathcal{H}_i, \quad \mathcal{H}_i = \mathcal{H}.$$

Wir definieren, in Verallgemeinerung von (11.6) die folgende Darstellung

$$S_N \ni \Pi \mapsto \hat{\Pi} \in \text{Aut}(\mathcal{H}_N)$$

der Permutationsgruppe  $S_N$ :

$$(\hat{\Pi}\Psi)(\xi_1, \dots, \xi_N) := \Psi(\xi_{\Pi(1)}, \dots, \xi_{\Pi(N)}). \quad (11.7)$$

Offensichtlich ist diese Darstellung **unitär**. Weiter bemerken wir, daß man jede Permutation  $\hat{\Pi}$  aus elementaren Transpositionen

$$\left( \hat{\Pi}_{ij} \Psi \right) (\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N) := \Psi(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N)$$

<sup>1</sup>Der Fall  $N = 3$  wird im Seminar ausführlich behandelt

zusammensetzen kann. Die Operatoren  $\hat{\Pi}_{ij}$  haben dieselben Eigenschaften wie  $\hat{\Pi}_{12}$  im Fall  $N = 2$ , d.h. sie sind unitär, selbstadjungiert und es gilt  $\hat{\Pi}_{ij}^2 = \mathbf{1}$ . Sie **kommutieren** aber **nicht** miteinander. Wir illustrieren dies für  $N = 3$ : Dazu betrachten wir  $\Pi = \Pi_{23} \circ \Pi_{12}$  und  $\Pi' = \Pi_{12} \circ \Pi_{23}$ . Dann gilt einerseits:

$$(\hat{\Pi} \Psi)(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = (\Pi_{23} \circ \Pi_{12} \Psi)(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = (\Pi_{12} \Psi)(\xi_1, \xi_3, \xi_2) = \Psi(\xi_3, \xi_1, \xi_2)$$

und andererseits

$$(\hat{\Pi}' \Psi)(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = (\Pi_{12} \circ \Pi_{23} \Psi)(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = (\Pi_{23} \Psi)(\xi_2, \xi_1, \xi_3) = \Psi(\xi_2, \xi_3, \xi_1).$$

Daraus folgern wir

$$(\Pi_{23} \circ \Pi_{12})^\dagger = \Pi_{12}^\dagger \circ \Pi_{23}^\dagger = \Pi_{12} \circ \Pi_{23} \neq \Pi_{23} \circ \Pi_{12},$$

also ist  $\Pi$  nicht selbstadjungiert.

Die Darstellung der  $S_N$  auf verallgemeinerten Eigenzuständen ist gegeben durch:

$$\hat{\Pi} |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle := |\xi_{\Pi^{-1}(1)}, \dots, \xi_{\Pi^{-1}(N)}\rangle. \quad (11.8)$$

Dies ist natürlich konsistent mit (11.7):

$$\langle \xi_1, \dots, \xi_N | \hat{\Pi} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{\Pi}^{-1} | \xi_1, \dots, \xi_N \rangle^* = \langle \Psi | \xi_{\Pi(1)}, \dots, \xi_{\Pi(N)}^* \rangle = \langle \xi_{\Pi(1)}, \dots, \xi_{\Pi(N)} | \Psi \rangle.$$

Die Formel ist auch konsistent mit (11.4), denn jede Transposition ist zu sich selbst invers.

Wir fragen uns nun, wie die Zerlegung von  $\mathcal{H}_N$  in irreduzible Darstellungen der Permutationsgruppe aussieht. Dazu definieren wir, in Verallgemeinerung der Formeln (11.2), die folgenden **Operatoren der Symmetrisierung** bzw. **Antisymmetrisierung**:

$$\hat{S} := \frac{1}{N!} \sum_{\Pi \in S_N} \hat{\Pi}, \quad \hat{A} := \frac{1}{N!} \sum_{\Pi \in S_N} \text{sgn}(\Pi) \hat{\Pi}, \quad (11.9)$$

wobei  $\text{sgn}(\Pi)$  das Signum der Permutation  $\Pi$  bezeichnet. Man zeigt, vgl. Hausaufgabe Nr. 15, daß  $\hat{S}$  und  $\hat{A}$  zueinander orthogonale Projektoren sind. Allerdings schöpfen ihre Bilder, im Gegensatz zum Fall  $N = 2$ , nicht den gesamten Raum  $\mathcal{H}_N$  aus. Man erhält:

$$\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_N^s \oplus \mathcal{H}_N^a \oplus \mathcal{H}_N^p, \quad (11.10)$$

wobei  $\mathcal{H}_N^s = \hat{S} \mathcal{H}_N$  und  $\mathcal{H}_N^a = \hat{A} \mathcal{H}_N$  wieder die Teilräume der **vollständig symmetrischen** bzw. **vollständig antisymmetrischen** Vektoren bezeichnet. Beide Räume zerfallen jeweils in eindimensionale irreduzible Teilräume, denn es gilt  $\hat{\Pi}_{ij} |\Psi\rangle = \pm |\Psi\rangle$  für alle  $(i, j)$  und für alle Vektoren  $|\Psi\rangle$  aus diesen Teilräumen. Zusätzlich erhält man einen Teilraum  $\mathcal{H}_N^p$ , welcher i.a. mehrere **höher-dimensionale** irreduzible Darstellungen der  $S_N$  enthält<sup>2</sup>.

Wir formulieren nun wieder das Postulat der **Ununterscheidbarkeit** der Teilchen: Alle Observable  $\hat{A}$  des Systems müssen mit der Darstellung der Permutationsgruppe vertauschen, d.h.

$$[\hat{A}, \hat{\Pi}_{ij}] = 0, \quad (11.11)$$

für alle  $i, j$ . Auch hier gilt wieder, daß nicht jeder selbstadjungierte Operator auf  $\mathcal{H}_N$  eine Observable des Systems identischer Teilchen ist, vgl. Bemerkung 11.1. Dieses Postulat liefert, daß jede Observable die irreduziblen Unterräume der Darstellung  $\hat{\Pi}$  invariant läßt. Da, wie bereits bemerkt, die Unterräume  $\mathcal{H}_N^s$ ,  $\mathcal{H}_N^a$  und  $\mathcal{H}_N^p$  aus irreduziblen Unterräumen bestehen, läßt jede Observable die Zerlegung (11.10) invariant, d.h. wir haben wieder eine Superauswahlregel.

<sup>2</sup>Die Klassifizierung aller irreduziblen Darstellungen der Permutationsgruppe erfolgt mit der Methode der Yang-Tableaux. Wir verweisen dazu auf die mathematische Standardliteratur, siehe etwa [Barut/Raczka]

Wir nehmen nun an, daß das betrachtete  $N$ -Teilchen-System ein vollständiges System kommutierender Observabler  $\{\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_n\}$  besitzt. Seien  $|a\rangle \equiv |a_1, \dots, a_n\rangle$  die zugehörigen Eigenvektoren. Da alle  $\hat{A}_i$  die Bedingung (11.11) erfüllen, gilt

$$\left[|a\rangle\langle a|, \hat{\Pi}\right] = 0.$$

Für einen beliebigen Zustand  $|\Psi\rangle$  mit  $\langle a|\Psi\rangle \neq 0$  erhalten wir daraus:

$$\hat{\Pi}|a\rangle = |a\rangle \cdot \frac{\langle a|\hat{\Pi}|\Psi\rangle}{\langle a|\Psi\rangle}, \quad (11.12)$$

d.h.  $|a\rangle$  ist Eigenvektor für **alle** Operatoren  $\hat{\Pi}$  der Darstellung. Damit spannt jeder Vektor  $|a\rangle$  einen eindimensionalen irreduziblen Darstellungsraum der Gruppe  $S_N$  auf. Man beweist nun, daß eindimensionale irreduzible Darstellungen der  $S_N$  entweder vollständig symmetrisch oder vollständig antisymmetrisch sind. Damit erhalten wir aus dem obigen Postulat:

*Für ein System von  $N$  identischen Teilchen, das ein vollständiges System kommutierender Observabler besitzt, gilt das Symmetrisierungsprinzip: Die reinen Zustände des Systems müssen entweder vollständig symmetrisch oder vollständig antisymmetrisch unter Teilchentransposition sein.*

Wenn wir also fordern, daß ein System von identischen Teilchen ein vollständiges System kommutierender Observabler besitzen soll, dann sind die sogenannten "Parastatistiken", d.h. Zustände aus  $\mathcal{H}_N^p$ , ausgeschlossen. In einem hypothetischen System, welches einer sogenannten Parastatistik genügt, tritt notwendig eine sogenannte Austauschentartung auf: Sei  $\Psi$  Element eines irreduziblen Unterraums aus  $\mathcal{H}_N^p$ . Dann liegt auch jeder Vektor  $\hat{\Pi}\Psi$  in diesem Unterraum. Da aber jede Observable mit  $\hat{\Pi}$  vertauscht, liegen  $\Psi$  und  $\hat{\Pi}\Psi$  im selben Eigenraum dieser Observablen. Damit sind diese beiden Zustände durch Messung nicht unterscheidbar, d.h. in diesem Falle kann es kein vollständiges System kommutierender Observabler geben.

Die obigen theoretischen Argumente werden dadurch unterstützt, daß es zumindest in der Welt der Elementarteilchen in der Tat keine experimentelle Evidenz für das Auftreten von Parastatistiken gibt.

Die Erfahrung lehrt mehr. Es gilt der folgende **Zusammenhang zwischen Spin und Statistik**<sup>3</sup>:

*Die reinen Zustände eines Systems identischer Teilchen sind vollständig symmetrisch, wenn ihr Spin ganzzahlig ist und vollständig antisymmetrisch, wenn er halbzahlig ist.*

### Bemerkungen 11.3

- i) Streng genommen folgt aus obigen Betrachtungen: Für die Beschreibung eines Elektrons müßten wir eigentlich eine Wellenfunktion verwenden, die vollständig antisymmetrisch bezüglich aller Elektronen im Universum ist. Glücklicherweise ist diese radikale Antisymmetrisierung für praktische Zwecke unnötig: Seien etwa zwei Elektronen gegeben (z.B. in zwei Wasserstoffatomen jeweils eins in einem Labor in Leipzig bzw. in Dresden), beschrieben durch die Wellenfunktionen  $|\psi_1\rangle$  und  $|\psi_2\rangle$ . Dann gilt natürlich  $\langle \psi_1|\psi_2\rangle \approx 0$ , denn die räumliche Überlappung dieser Wellenfunktionen ist unmeßbar klein.

Wir führen an diesem 2-Teilchensystem die Messung einer (nicht ausgearteten) Observablen  $\hat{A}$  aus und interessieren uns nur für die Meßresultate in Leipzig. Können wir dann das Wasserstoffatom in Dresden einfach vergessen oder ist die Antisymmetrisierung notwendig?

Zunächst ignorieren wir sie, d.h. wir betrachten den Produktzustand  $|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle \equiv |\psi_1, \psi_2\rangle$ . Seien  $|a_1, a_2\rangle \equiv |a_1\rangle|a_2\rangle$  die Eigenzustände der Observablen  $\hat{A}$ . Die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Meßwertes  $a_1$  im Leipziger Labor ist

$$\sum_{a_2} |\langle a_1, a_2|\psi_1, \psi_2\rangle|^2 = |\langle a_1|\psi_1\rangle|^2 \sum_{a_2} |\langle a_2|\psi_2\rangle|^2 = |\langle a_1|\psi_1\rangle|^2 \sum_{a_2} \langle \psi_2|a_2\rangle\langle a_2|\psi_2\rangle = |\langle a_1|\psi_1\rangle|^2,$$

wobei verwendet wurde, daß  $\{|a_2\rangle\}$  ein vollständiges Orthonormalsystem ist. Wie erwartet, ist die Messung in Leipzig völlig unabhängig vom Zustand des Elektrons in Dresden.

<sup>3</sup>Im Rahmen der axiomatischen Quantenfeldtheorie wird dies bewiesen

Nun führen wir die analoge Rechnung für die antisymmetrischen Zustände

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle - |\psi_2\rangle|\psi_1\rangle) \quad \text{und} \quad |a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a_1\rangle|a_2\rangle - |a_2\rangle|a_1\rangle)$$

durch. Die Wahrscheinlichkeit, daß  $a_1$  in Leipzig gemessen wird, ist dann gegeben durch:

$$\sum_{a_2} |\langle a|\Psi\rangle|^2 = \frac{1}{4} \sum_{a_2} \left| 2\langle a_1|\psi_1\rangle\langle a_2|\psi_2\rangle - 2\underbrace{\langle a_1|\psi_2\rangle}_{\approx 0}\underbrace{\langle a_2|\psi_1\rangle}_{\approx 0} \right|^2 \approx |\langle a_1|\psi_1\rangle|^2.$$

Wir erhalten in guter Näherung das gleiche Resultat. Erst wenn sich die Elektronen mikroskopisch nahe kommen, können die Terme  $\langle a_2|\psi_1\rangle$  und  $\langle a_1|\psi_2\rangle$  nicht mehr vernachlässigt werden.

ii) Wir schreiben Basen in den Teilräumen  $\mathcal{H}_N^a$  und  $\mathcal{H}_N^s$  auf. Sei

$$|a_i(i)\rangle \equiv |a_i^1(i), \dots, a_i^n(i)\rangle$$

eine Basis im Hilbertraum des  $i$ -ten Teilchens, gebildet aus den Eigenzuständen eines vollständigen Systems kommutierender Observabler  $(\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_n)$ . Dann ist

$$|a_1 a_2 \dots a_N\rangle \equiv |a_1(1)\rangle |a_2(2)\rangle \dots |a_N(N)\rangle$$

die zugehörige Tensorproduktbasis in  $\mathcal{H}_N$  und wir können jeden beliebigen Vektor  $\Psi \in \mathcal{H}_N$  in dieser Basis zerlegen:

$$\Psi = \sum_{a_1 a_2 \dots a_N} |a_1 a_2 \dots a_N\rangle \langle a_1 a_2 \dots a_N | \Psi \rangle.$$

Sei  $\Psi \in \mathcal{H}_s$ , also  $\hat{S}\Psi = \Psi$ . Dann gilt offensichtlich

$$\Psi = \sum_{a_1 a_2 \dots a_N} |a_1 a_2 \dots a_N\rangle_+ \langle a_1 a_2 \dots a_N | \Psi \rangle \quad (11.13)$$

mit

$$|a_1 a_2 \dots a_N\rangle_+ := \hat{S} |a_1 a_2 \dots a_N\rangle. \quad (11.14)$$

Das Skalarprodukt zwischen diesen Zuständen ist

$$\langle a_1 a_2 \dots a_N | b_1 b_2 \dots b_N \rangle_+ = \frac{1}{N!} \sum_{\Pi \in S_N} \delta_{a_1 b_{\Pi(1)}} \delta_{a_2 b_{\Pi(2)}} \dots \delta_{a_N b_{\Pi(N)}}.$$

Sie bilden also eine orthogonale (aber nicht normierte) Basis in  $\mathcal{H}_N^s$ , wobei die Orthogonalität aus der Orthogonalität der Einteilchenzustände  $|a_i(i)\rangle$  folgt. Man beachte, daß die Basisvektoren durch die Quantenzahlen  $a_1, \dots, a_N$  nicht eindeutig gekennzeichnet werden, da offenbar  $|a_1 a_2 \dots a_N\rangle_+ = |a_{\Pi(1)} a_{\Pi(2)} \dots a_{\Pi(N)}\rangle_+$  für beliebige Permutationen  $\Pi \in S_N$  gilt. Insbesondere treten in der Zerlegung (11.13) viele Summanden mehrfach auf. Dieses Bezeichnungsproblem wird im folgenden durch den Übergang zur Besetzungszahldarstellung behoben.

Völlig analog zum symmetrischen Fall haben wir die Basis

$$|a_1 a_2 \dots a_N\rangle_- := \hat{A} |a_1 a_2 \dots a_N\rangle \quad (11.15)$$

im Teilraum  $\mathcal{H}_N^a$ . Offensichtlich lassen sich diese Basiselemente in Gestalt der sogenannten **Slater-Determinante** darstellen:

$$|a_1 a_2 \dots a_N\rangle_- = \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} |a_1(1)\rangle & \dots & |a_1(N)\rangle \\ \vdots & & \vdots \\ |a_N(1)\rangle & \dots & |a_N(N)\rangle \end{vmatrix} \quad (11.16)$$

Das Skalarprodukt ist gegeben durch

$$\langle a_1 a_2 \dots a_N | b_1 b_2 \dots b_N \rangle_- = \frac{1}{N!} \sum_{\Pi \in S_N} \text{sgn}(\Pi) \delta_{a_1 b_{\Pi(1)}} \delta_{a_2 b_{\Pi(2)}} \dots \delta_{a_N b_{\Pi(N)}}.$$

- iii) Insbesondere bilden die Komponenten des Ortsoperators und der dritten Komponente des Spins ein System kommutierender Observabler im 1-Teilchen-Hilbertraum. Wie oben bezeichnen wir  $|\xi_i\rangle \equiv |\vec{x}_i, \sigma\rangle$  und definieren die (nicht normierten) verallgemeinerten Basisvektoren

$$|\xi_1, \dots, \xi_N\rangle_+ := \hat{\mathcal{S}} |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle \quad (11.17)$$

in  $\mathcal{H}_N^s$ . Die zum Zustand  $|\Psi_N\rangle$  gehörige, (normierte) und vollständig symmetrische Wellenfunktion ist dann

$$\Psi_N(\xi_1, \dots, \xi_N) := {}_+\langle \xi_1, \dots, \xi_N | \Psi_N \rangle. \quad (11.18)$$

Wir wissen, daß

$$\int d\xi_1 \dots d\xi_N |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle \langle \xi_1, \dots, \xi_N| = \mathbf{1}$$

im Sinne der verallgemeinerten Eigenfunktionenentwicklung gilt. Wirken mit dem Symmetrisierungsoperator von beiden Seiten auf diese Identität zeigt, daß

$$\int d\xi_1 \dots d\xi_N |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle_+ {}_+\langle \xi_1, \dots, \xi_N|$$

eine (verallgemeinerte) Zerlegung der  $\mathbf{1}$  in  $\mathcal{H}_N^s$  ist. Damit folgt sofort die Normierung der Wellenfunktion. Analog bilden wir die (verallgemeinerte) Basis

$$|\xi_1, \dots, \xi_N\rangle_- := \hat{\mathcal{A}} |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle \quad (11.19)$$

in  $\mathcal{H}_N^a$  und die zugehörige, vollständig antisymmetrische Wellenfunktion.

- iv) Für ein System von  $N$  identischen **Fermionen** gilt:

$$\Psi(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N) = -\Psi(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N).$$

Setzen wir  $\xi_i = \xi_j$ , so muß  $\Psi$  verschwinden. Wir erhalten daraus das **Pauliprinzip**: Die Wahrscheinlichkeit, daß sich zwei Fermionen des Systems im gleichen Quantenzustand befinden, verschwindet.

- v) Unter der Annahme, daß die Basis  $|a_i\rangle$  im 1-Teilchen-Hilbertraum abzählbar ist, kann man zur sogenannten **Besetzungszahldarstellung** übergehen. Dazu numeriert man die Einteilchenzustände in beliebiger Weise durch,

$$|1\rangle, |2\rangle, \dots, |i\rangle, \dots$$

In dieser Bezeichnung sind die Basiselemente im  $N$ -Teilchen-Hilbertraum  $\mathcal{H}_N$  gegeben durch  $\{|i_1, \dots, i_N\rangle\}$  und

$$|i_1, \dots, i_N\rangle_+ := \hat{\mathcal{S}} |i_1, \dots, i_N\rangle, \quad i_1 \leq \dots \leq i_N, \quad (11.20)$$

ist eine (nicht normierte) Basis in  $\mathcal{H}_N^s$ . Aus dem gleichen Grunde wie oben liefert der Operator

$$\sum_{i_1, i_2, \dots = 0}^{\infty} |i_1, \dots, i_N\rangle_+ {}_+\langle i_1, \dots, i_N|$$

eine Zerlegung der  $\mathbf{1}$  in  $\mathcal{H}_N^s$ . Analog bilden wir eine Basis

$$|i_1, \dots, i_N\rangle_- := \hat{\mathcal{A}} |i_1, \dots, i_N\rangle, \quad i_1 < \dots < i_N, \quad (11.21)$$

in  $\mathcal{H}_N^a$ . Dies ist natürlich wieder eine Slater-Determinante.

Die Besetzungszahl  $N_i$  des Einteilchenzustands  $|i\rangle$  ist definiert als die Häufigkeit, mit der  $|i\rangle$  in dem gegebenen  $N$ -Teilchenzustand  $|i_1, \dots, i_N\rangle$  auftritt. Es gilt

$$N_1 + N_2 + \dots = N.$$

Insbesondere verschwinden fast alle  $N_i$ . Für Zustände in  $\mathcal{H}_N^a$  können die  $N_i$  die Werte 0 oder 1 annehmen, für Zustände in  $\mathcal{H}_N^s$  sind alle Werte von 0 bis  $N$  zugelassen. Aus (11.20) und (11.21) folgt, daß durch die Angabe der Besetzungszahlen die symmetrischen bzw. antisymmetrischen Zustände eindeutig charakterisiert werden. Wir schreiben

$$|N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle := \underbrace{|1\rangle \cdots |1\rangle}_{N_1\text{-mal}} \underbrace{|2\rangle \cdots |2\rangle}_{N_2\text{-mal}} \cdots \underbrace{|i\rangle \cdots |i\rangle}_{N_i\text{-mal}} \cdots$$

und erhalten daraus normierte Basen

$$|N_1, N_2, \dots\rangle_+ = \sqrt{\frac{N!}{N_1! N_2! \dots}} \hat{S} |N_1, N_2, \dots\rangle \quad (11.22)$$

in  $\mathcal{H}_N^s$  und

$$|N_1, N_2, \dots\rangle_- = \sqrt{N!} \hat{A} |N_1, N_2, \dots\rangle \quad (11.23)$$

in  $\mathcal{H}_N^a$ . Man beachte bei diesen Bezeichnungen, daß die Folge  $N_1, N_2, \dots$  unendlich lang, aber fast überall gleich 0 ist. Da für den antisymmetrischen Fall nur  $N_i = 0, 1$  in Frage kommt, gehört zu jeder Gesamtheit  $|a_1\rangle, |a_2\rangle, \dots, |a_N\rangle$  von  $N$  **verschiedenen** Einteilchenzuständen, die man aus allen verfügbaren Einteilchenzuständen auswählt, genau ein antisymmetrischer Zustand.

## 11.2 Ideale Gase

Ein System von  $N$  identischen Teilchen, mit  $N \gg 1$ , heißt **ideales Gas**, wenn die gegenseitige Wechselwirkung zwischen den Teilchen vernachlässigt werden kann. Dann ist der Hamiltonoperator des Systems gleich der Summe der Einteilchen-Hamiltonoperatoren,

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}(i) = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + V(i) \right\}. \quad (11.24)$$

Wir numerieren die (normierten) Eigenzustände von  $\hat{H}(i)$  so durch, daß für die zugehörigen Energien  $E_1 \leq E_2 \leq E_3 \dots$  gilt und gehen zur Besetzungszahldarstellung über. Dann ist  $|N_1, N_2, \dots\rangle$  Eigenzustand von  $\hat{H}$  zum Eigenwert

$$E = N_1 E_1 + N_2 E_2 + \dots$$

Aus der Diskussion des letzten Abschnittes folgt, daß die  $N$  identischen Teilchen entweder allesamt Bosonen oder allesamt Fermionen sein müssen. Man spricht von einem **Bosonen-** bzw. von einem **Fermionengas**. Offensichtlich gibt es grundlegende Unterschiede im Energiespektrum von Fermionen und Bosonen. Zum Beispiel erhalten wir für die Grundzustandsenergie eines Bosonengases  $E = N E_1$ , während für ein Fermionengas aufgrund des Pauli-Prinzips  $E = E_1 + \dots + E_N \geq N E_1$  gilt.

Wir beschreiben die statistischen Verteilungen für Bosonen- bzw. Fermionengase: Für ideale Gase im thermodynamischen Gleichgewicht erhält man diese aus dem **thermodynamischen Potential**

$$\Omega = \sum_i \Omega_i, \quad (11.25)$$

wobei

$$\Omega_i = -\frac{1}{\beta} \ln \sum_{N_i} \left\{ \exp[\beta(\mu - E_i)] \right\}^{N_i}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}, \quad (11.26)$$

das thermodynamische Potential des Einteilchenzustands  $|i\rangle$  bezeichnet. Die Summen in (11.25) bzw. (11.26) erstrecken sich über alle Orbitale bzw. über alle möglichen Besetzungszahlen des Einteilchenzustands  $|i\rangle$ .  $T$  bezeichnet die absolute Temperatur und  $\mu$  ist das chemische Potential pro Teilchen. Die mittlere Teilchenzahl im Einteilchenzustand  $|i\rangle$  berechnet man folgendermaßen:

$$\bar{N}_i = -\frac{\partial \Omega_i}{\partial \mu}. \quad (11.27)$$

Da für Fermionen  $N_i = 0, 1$  gilt, erhalten wir

$$\Omega_i = -\frac{1}{\beta} \ln (1 + \exp [\beta(\mu - E_i)])$$

und damit

$$\bar{N}_i = \frac{1}{\exp [-\beta(\mu - E_i)] + 1}. \quad (11.28)$$

Dies ist die **Verteilungsfunktion** für ein ideales Gas, welches der **Fermi–Dirac–Statistik** genügt. Das chemische Potential  $\mu = \mu(T, N)$  wird aus der Relation

$$N = \sum_i \{ \exp \beta(E_i - \mu) + 1 \}^{-1}$$

bestimmt.

Für Bosonen haben wir für ( $N \rightarrow \infty$ ):

$$\Omega_i = -\frac{1}{\beta} \ln \sum_{N_i=0}^{\infty} \left\{ \exp [\beta(\mu - E_i)] \right\}^{N_i}.$$

Damit diese Reihe konvergiert, nehmen wir an, daß  $\mu - E_i < 0$  gilt. Etwa für ein ideales Gas von freien Bosonen gilt  $E_i \simeq 0$ , folglich darf  $\mu$  nicht positiv sein. Unter dieser Annahme haben wir eine konvergierende, unendliche geometrische Reihe und wir erhalten

$$\Omega_i = \frac{1}{\beta} \ln \{ 1 - \exp [\beta(\mu - E_i)] \}. \quad (11.29)$$

Damit ergibt sich die folgende mittlere Teilchenzahl

$$\bar{N}_i = \frac{1}{\exp [\beta(E_i - \mu)] - 1}. \quad (11.30)$$

Dies ist die **Verteilungsfunktion** für ein ideales Gas, welches der **Bose–Einstein–Statistik** genügt.

#### Bemerkungen 11.4

Das Modell eines Fermi–Gases ist für Anwendungen in der Atom-, Kern- und Festkörperphysik, sowie auch in der Kosmologie von großer Bedeutung. Eine der wichtigsten Anwendungen der Bose–Statistik ist die elektromagnetische Strahlung im thermischen Gleichgewicht. Wir betrachten dazu das zu Beginn von Teil I eingeführte Modell des **schwarzen Strahlers**. Da die Wechselwirkung der Photonen im Hohlkörper vernachlässigt werden kann, liegt ein **ideales Bose–Gas von Spin–1–Teilchen** vor. Thermodynamisches Gleichgewicht stellt sich ein durch Absorption und Emission von Photonen durch die Wände des Hohlkörpers. Wir haben es also mit einem Gas mit einer a priori veränderlichen Teilchenzahl  $N$  zu tun. Der Gleichgewichtszustand eines (mechanisch) isolierten Systems bei konstanter Temperatur ist charakterisiert durch die Forderung, daß die **freie Energie** des Systems **minimal** sein muß. Wegen

$$dF = -SdT - PdV + \mu dN$$

folgt im Gleichgewichtszustand

$$\left( \frac{\partial F}{\partial N} \right)_{V,T} = 0.$$

Dies bedeutet  $\mu = 0$  und damit ist in diesem Falle, wegen  $\Omega = F - \mu N$ , das thermodynamische Potential  $\Omega$  mit der freien Energie identisch. Damit erhalten wir aus (11.30) die folgende mittlere Teilchenzahl von Photonen mit Energie  $E_i = h\nu_i$ :

$$\bar{N}_i = \frac{1}{e^{\beta h\nu_i} - 1}. \quad (11.31)$$

Bezeichne  $V$  das Volumen des Hohlkörpers. Dann ist  $\frac{8\pi V \nu^2 d\nu}{c^3}$  die Zahl der Quantenzustände<sup>4</sup> der Photonen mit Frequenzen im Intervall zwischen  $\nu$  und  $\nu + d\nu$  und wir erhalten die mittlere Photonenzahl

$$dN(\nu) = \frac{8\pi V}{c^3} \frac{\nu^2 d\nu}{e^{\beta h\nu} - 1}.$$

in diesem Frequenzintervall. Multiplizieren wir mit  $h\nu$  und dividieren durch das Volumen, so erhalten wir folgende Energiedichte des Strahlungsfeldes:

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\beta h\nu} - 1}. \quad (11.32)$$

Dies ist die **Plancksche Strahlungsformel**.

### 11.3 Das Zentralfeldmodell der Atome

Wir betrachten ein Atom mit  $Z$  Elektronen, beschrieben durch den folgenden, stark vereinfachten Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^Z \hat{H}_i = \sum_{i=1}^Z \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^{(i)} + V(\vec{x}^{(i)}) \right).$$

Das Potential  $V(\vec{x}^{(i)})$  beschreibt die Wechselwirkung des  $i$ -ten Elektrons mit dem (im Koordinatenursprung festgehaltenen) Kern (anziehende Kraft) und den restlichen  $Z - 1$  Elektronen (gemittelte Abstoßung). Die Spin-Wechselwirkung wird vernachlässigt. Das Potential kann man sich etwa in folgender Gestalt vorstellen:

$$V(\vec{x}^{(i)}) = -\frac{e^2 Z(|\vec{x}^{(i)}|)}{|\vec{x}^{(i)}|},$$

wobei  $eZ(|\vec{x}^{(i)}|)$  eine **effektive Ladung** ist, die den Randbedingungen  $Z(0) = Z$  und  $Z(\infty) = 1$  genügt. Damit werden Abschirmeffekte der Kernladung durch die anderen Elektronen in großer Entfernung vom Kern beschrieben. Das Eigenwertproblem von  $\hat{H}$  ist offenbar leicht lösbar, wenn man die Lösung für den Einteilchenoperator  $\hat{H}_i$  kennt. Da es sich um ein Zentralpotential handelt, sucht man die Lösung des Einteilchenproblems mit dem Ansatz

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \chi_{m_S},$$

wobei  $\chi_{m_S}$  den Spinzustand des Elektrons beschreibt. Die Funktion  $R$  erfüllt die übliche Radialgleichung

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) \right) u_l(r) = E u_l(r), \quad u_l(r) = r R(r).$$

Um  $\psi$  explizit zu finden, muß man diese Gleichung für ein gewähltes Zentralfeldpotential  $V$  lösen. Darauf kommen wir im nächsten Kapitel zurück<sup>5</sup>. Hier beschränken wir uns auf eine qualitative Diskussion: Die Einteilchenwellenfunktion wird durch vier Quantenzahlen charakterisiert,

$$\psi = \psi_{nlm m_S}.$$

Da es sich bei  $V$  nicht um das Coulombpotential handelt, gibt es natürlich keine zufällige Entartung, sondern es gilt  $E = E_{nl}$  und die Entartung ist  $2(2l+1)$ <sup>6</sup>. Die Eigenfunktionen des Hamiltonoperators  $\hat{H}$  sind gegeben durch die Slater-Determinanten der obigen Einteilchenwellenfunktionen.

<sup>4</sup>siehe Teil I, Abschnitt 1.1

<sup>5</sup>siehe Hartree-Fock-Methode

<sup>6</sup>Die 2 vor der Klammer kommt von  $m_S$  und  $(2l+1)$  von  $m$

Energetisch wird der Zustand eines Atoms im Rahmen der Zentralfeldnäherung offensichtlich vollständig durch die Verteilung der  $Z$  Elektronen auf die Energieniveaus  $E_{nl}$  beschrieben. Aus dem **Pauli-Prinzip** folgt, daß ein Niveau  $E_{nl}$  mit maximal  $2(2l + 1)$  Elektronen besetzt sein kann. Die Gesamtheit aller Einteilchenzustände, die zu einer festen  $(n, l)$ -Konfiguration gehören, also  $2(2l + 1)$  Zustände, bezeichnet man als volle  $(n, l)$ -Schale. Der Grundzustand des Atoms entsteht durch sukzessives Auffüllen, bis alle  $Z$  Elektronen verteilt sind.

Es ist ein experimenteller Fakt, daß die Reihenfolge der 1-Teilchen-Energieniveaus für den Grundzustand und die ersten angeregten Zustände praktisch für alle Atome dieselbe ist, nämlich

$$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, (4s, 3d), 4p, (5s, 4d), 5p, (6s, 4f, 5d), 6p, (7s, 5f, 6d), \dots$$

Die Klammern deuten annähernde energetische Gleichheit an. Wir sehen, daß sich diese Reihenfolge gerade dann ergibt, wenn man die Niveaus nach wachsendem  $n+l$  und bei gleichem  $n+l$  nach wachsendem  $n$  ordnet. Diese Regel ergibt sich zwar aus dem Experiment, sie ist aber plausibel, denn die Anhebung der Niveaus ist umso ausgeprägter, je weiter die Elektronen im Mittel vom Kern entfernt sind (stärkere Abschirmung). Wir veranschaulichen sie an zwei Beispielen: Wegen  $4 + 0 < 3 + 2$  gilt  $4s < 3d$  und wegen  $4 + 0 = 3 + 1$ , aber  $4 > 3$ , gilt  $4s > 3p$ .

Faßt man nun  $(n, l)$ -Schalen, die energetisch sehr nahe liegen, zu einer Elektronenschale zusammen (z.B.  $2s$  und  $2p$ ), so erhält man die folgende **Schalenstruktur der Elektronenhüllen**:

Schale	Zustände	max. Besetzungszahl
<i>K</i>	1s	2
<i>L</i>	2s, 2p	2 + 6 = 8
<i>M</i>	3s, 3p	2 + 6 = 8
<i>N</i>	4s, 3d, 4p	2 + 10 + 6 = 18
<i>O</i>	5s, 4d, 5p	2 + 10 + 6 = 18
<i>P</i>	6s, 4f, 5d, 6p	2 + 14 + 10 + 6 = 32
<i>Q</i>	7s, 5f, 6d, 7p	2 + 14 + 10 + 6 = 32

Damit erhalten wir ein gewisses qualitatives Verständnis für die **Anordnung der Elemente im Periodensystem**:

Schale	$Z$	Element	1s	2s	2p	3s	3p
<i>K</i>	1	H	1				
	2	He	2				
<i>L</i>	3	Li	2	1			
	4	Be	2	2			
	5	B	2	2	1		
	6	C	2	2	2		
	7	N	2	2	3		
	8	O	2	2	4		
	9	F	2	2	5		
	10	Ne	2	2	6		
<i>M</i>	11	Na	2	2	6	1	
	12	Mg	2	2	6	2	
	13	Al	2	2	6	2	1
	14	Si	2	2	6	2	2
	15	P	2	2	6	2	3
	16	S	2	2	6	2	4
	17	Cl	2	2	6	2	5
	18	Ar	2	2	6	2	6

## 11.4 Das Heliumatom

Helium verhält sich spektroskopisch gesehen wie eine Mischung aus zwei Gasen, die **Parahelium** und **Orthohelium** genannt werden. Dem entsprechen zwei Termsysteme, die in Abb. 11.1 dargestellt sind. Während alle Linien im Spektrum von Parahelium einfach sind, weist das Spektrum von Orthohelium eine Feinstruktur auf. Alle dort auftretenden Linien sind eng beieinander liegende Triplets. Lange Zeit wurden die beiden Heliumsorten für verschiedene Gase gehalten. Dies hängt damit zusammen, daß es nur sehr schwache Übergänge zwischen den Zuständen dieser beiden Sorten gibt.

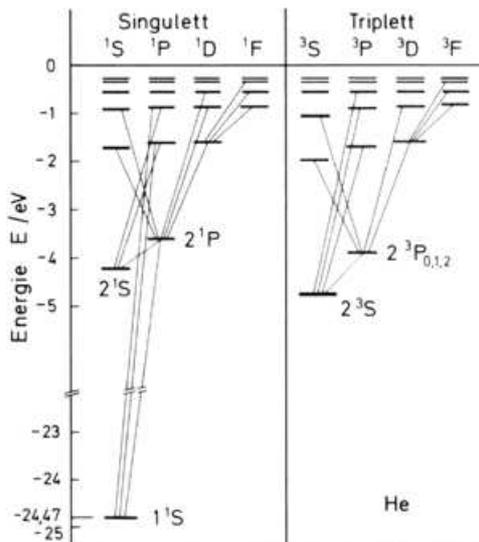


Abbildung 11.1: Termschema des He-Atoms. Einige erlaubte Übergänge sind eingezeichnet. Es gibt zwei Termsysteme, zwischen denen strahlende Übergänge verboten sind, das Singulett- und das Triplett-System. Sie werden auch als Para- bzw. Orthohelium bezeichnet.

Die **qualitative Beschreibung** dieses Phänomens gelang Heisenberg 1926: Vernachlässigt man die Spin-Wechselwirkung und separiert die Schwerpunktsbewegung ab, so erhält man den folgenden Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}_{(1)}^2}{2m} + \frac{\vec{p}_{(2)}^2}{2m} - 2e^2 \left( \frac{1}{|\vec{x}_{(1)}|} + \frac{1}{|\vec{x}_{(2)}|} \right) + \frac{e^2}{|\vec{x}_{(1)} - \vec{x}_{(2)}|}. \quad (11.33)$$

Der Hilbertraum dieses 2-Elektronen-Systems ist

$$\mathcal{H} = (L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2) \otimes (L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2) \cong L^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3) \otimes (\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2). \quad (11.34)$$

Zustände des Systems werden durch Spinoren

$$\psi(\vec{x}_{(1)}, m_s^{(1)}; \vec{x}_{(2)}, m_s^{(2)}) = \varphi(\vec{x}_{(1)}, \vec{x}_{(2)}) \cdot \chi(m_s^{(1)}, m_s^{(2)})$$

beschrieben, mit  $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^3 \otimes \mathbb{R}^3)$  und  $\chi \in \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ . Wir betrachten die Wirkung der Permutationsgruppe  $S_2$  ihm Hilbertraum  $\mathcal{H}$ , definiert durch

$$\hat{\Pi}_{12} = \hat{\Pi}_{12}^x \otimes \hat{\Pi}_{12}^s,$$

wobei  $\hat{\Pi}_{12}^x$  die Wirkung im Teilraum  $L^2(\mathbb{R}^3 \otimes \mathbb{R}^3)$  (Vertauschung der Ortskoordinaten) und  $\hat{\Pi}_{12}^s$  die Wirkung in  $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$  (Vertauschung der Spinkoordinaten) bezeichnen. Offensichtlich kommutiert der obige Hamiltonoperator mit dieser Wirkung. Wir haben also ein System von zwei identischen Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen

und können die allgemeine Theorie anwenden. Dazu zerlegen wir den Projektor auf die symmetrischen Zustände folgendermaßen :

$$\begin{aligned}
\mathbf{1} + \hat{\Pi}_{12} &= \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + \hat{\Pi}_{12}^x \otimes \hat{\Pi}_{12}^s \\
&= \frac{1}{2} \left( (\mathbf{1} + \hat{\Pi}_{12}^x) + (\mathbf{1} - \hat{\Pi}_{12}^x) \right) \otimes \frac{1}{2} \left( (\mathbf{1} + \hat{\Pi}_{12}^s) + (\mathbf{1} - \hat{\Pi}_{12}^s) \right) \\
&\quad + \frac{1}{2} \left( (\mathbf{1} + \hat{\Pi}_{12}^x) - (\mathbf{1} - \hat{\Pi}_{12}^x) \right) \otimes \frac{1}{2} \left( (\mathbf{1} + \hat{\Pi}_{12}^s) - (\mathbf{1} - \hat{\Pi}_{12}^s) \right) \\
&= \frac{1}{2} (\mathbf{1} + \hat{\Pi}_{12}^x) \otimes (\mathbf{1} + \hat{\Pi}_{12}^s) + \frac{1}{2} (\mathbf{1} - \hat{\Pi}_{12}^x) \otimes (\mathbf{1} - \hat{\Pi}_{12}^s).
\end{aligned} \tag{11.35}$$

Analog erhalten wir für den Projektor auf die antisymmetrischen Zustände:

$$\mathbf{1} - \hat{\Pi}_{12} = \frac{1}{2} (\mathbf{1} + \hat{\Pi}_{12}^x) \otimes (\mathbf{1} - \hat{\Pi}_{12}^s) + \frac{1}{2} (\mathbf{1} - \hat{\Pi}_{12}^x) \otimes (\mathbf{1} + \hat{\Pi}_{12}^s). \tag{11.36}$$

Dies liefert folgende Zerlegung des Hilbertraumes:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_s \oplus \mathcal{H}_a,$$

mit

$$\mathcal{H}_s = (L^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)_s \otimes (\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2)_s) \oplus (L^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)_a \otimes (\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2)_a) \tag{11.37}$$

und

$$\mathcal{H}_a = (L^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)_s \otimes (\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2)_a) \oplus (L^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)_a \otimes (\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2)_s) \equiv \mathcal{H}_a^{(s,a)} \oplus \mathcal{H}_a^{(a,s)}. \tag{11.38}$$

Wegen des **Pauli-Prinzips** sind aber nur Eigenfunktionen aus  $\mathcal{H}_a$  erlaubt. Diese sind vollständig antisymmetrisch und aus (11.36) bzw. (11.38) sehen wir, daß sie entweder vollständig symmetrisch in den Ortsvariablen und vollständig antisymmetrisch in den Spinvariablen oder vollständig antisymmetrisch in den Orts- und symmetrisch in den Spinvariablen ist. Bei Vernachlässigung der Spin-Wechselwirkung liegen reine Zustände des Systems **entweder** in der ersten **oder** in der zweiten Komponente von (11.38). Die Zerlegung  $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 = (\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2)_s \oplus (\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2)_a$  kennen wir natürlich, sie entspricht genau der Zerlegung, die aus der Addition der Drehimpulse der beiden Spin  $\frac{1}{2}$ -Teilchen folgt:

$$D^{1/2} \otimes D^{1/2} = \bigoplus_{j=|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}|}^{\frac{1}{2}+\frac{1}{2}} D^j = D^0 \oplus D^1.$$

Die (Singulett)-Darstellung  $D^0$  entspricht dem Gesamtspin  $S = 0$  und der Darstellungsraum wird durch den Vektor

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\frac{1}{2}\rangle \otimes |-\frac{1}{2}\rangle - |-\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}\rangle) \tag{11.39}$$

aufgespannt. Da dieser offensichtlich antisymmetrisch unter Spinvertauschung ist, ist der Darstellungsraum der Singulett-Darstellung gerade durch  $(\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2)_a$  gegeben. Die Triplett-Darstellung  $D^1$  entspricht dem Gesamtspin  $S = 1$  und die Basis im Darstellungsraum ist gegeben durch

$$|\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}\rangle, \quad |-\frac{1}{2}\rangle \otimes |-\frac{1}{2}\rangle, \quad \frac{1}{\sqrt{2}} (|\frac{1}{2}\rangle \otimes |-\frac{1}{2}\rangle + |-\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}\rangle). \tag{11.40}$$

Da diese Vektoren symmetrisch unter Spinvertauschung sind, ist der Darstellungsraum der Triplett-Darstellung durch  $(\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2)_s$  gegeben. Dem Unterraum  $\mathcal{H}_a^{(s,a)}$  entsprechen also Singulettts. Diese nennt man **Parahelium**-Zustände. Im Raum  $\mathcal{H}_a^{(a,s)}$  haben wir dagegen Triplettts. Diese heißen **Orthohelium**-Zustände. Da  $\hat{H}$  mit  $\hat{\Pi}_{12}$  kommutiert, bleiben die Zustände im Laufe ihrer zeitlichen Entwicklung entweder in  $\mathcal{H}_a^{(s,a)}$  oder in  $\mathcal{H}_a^{(a,s)}$ .

**Bemerkungen 11.5**

Bei Einbeziehung der Spin-Wechselwirkung ergeben sich allerdings schwache Übergänge zwischen Singulett- und Triplettzuständen.<sup>7</sup>

Abschließend geben wir eine erste, grobe Abschätzung der Lage der Energieniveaus an. Wir lassen dazu den Term  $\frac{e^2}{|\vec{x}_{(1)} - \vec{x}_{(2)}|}$  weg.<sup>8</sup> Dann haben wir

$$\hat{H}_0 = \frac{\vec{p}_{(1)}^2}{2m} + \frac{\vec{p}_{(2)}^2}{2m} - 2e^2 \left( \frac{1}{|\vec{x}_{(1)}|} + \frac{1}{|\vec{x}_{(2)}|} \right),$$

also ein System zweier entkoppelter Elektronen, für die wir die Resultate für das Wasserstoffatom verwenden können. Die Eigenwerte von  $\hat{H}_0$  sind:

$$E_{n_1 n_2} = -\frac{m e^4 Z^2}{2\hbar^2} \left( \frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} \right).$$

Sie erzeugen das Punktspektrum

$$\sigma_P(\hat{H}_0) = \{E_{n_1 n_2} : n_1, n_2 \in \mathbb{Z}^+\}.$$

Aber das kontinuierliche Spektrum beginnt für fixiertes  $n_1$  bei  $n_2 \rightarrow \infty$ , also bei

$$E_{n_1 \infty} = -\frac{m e^4 Z^2}{2\hbar^2} \left( \frac{1}{n_1^2} + 0 \right).$$

Dessen niedrigsten Wert erhält man für  $n_1 = 1$ . Damit haben wir das folgende kontinuierliche Spektrum:

$$\sigma_C(\hat{H}_0) = \left[ -\frac{m e^4 Z^2}{2\hbar^2}, \infty \right).$$

Wir bemerken, daß nur die Eigenwerte

$$E_n = E_{n_1} = -\frac{m e^4 Z^2}{2\hbar^2} \left( 1 + \frac{1}{n^2} \right)$$

**isoliert** liegen, sie bilden das **diskrete Spektrum**  $\sigma_D(\hat{H}_0) = \{E_n, n \in \mathbb{Z}^+\}$ . Alle anderen Punkte des Punktspektrums sind im kontinuierlichen Spektrum eingelagert. Den Grundzustand erhalten wir für  $n = 1$  (die beiden Elektronen füllen die innerste Schale):

$$E_1 = -\frac{m e^4 Z^2}{\hbar^2}.$$

Also gilt

$$\sigma_D(\hat{H}_0) \subset \left[ -\frac{m e^4 Z^2}{\hbar^2}, -\frac{m e^4 Z^2}{2\hbar^2} \right].$$

Die Produktzustände  $|n'_1 l_1 m_1\rangle \otimes |n'_2 l_2 m_2\rangle$ , mit

$$\frac{1}{n_1'^2} + \frac{1}{n_2'^2} = \frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2},$$

konstruiert aus den Eigenzuständen des Wasserstoffatoms, bilden eine Orthonormalbasis im Eigenraum von  $E_{n_1 n_2}$ . Der (nicht entartete) Grundzustand ist offenbar

$$|100\rangle \otimes |100\rangle \otimes \chi^a.$$

<sup>7</sup>siehe [Bohm], Abschnitt XI.3

<sup>8</sup>Wir kommen im Kapitel über Näherungsmethoden auf diesen Term zurück.

Da  $|100\rangle \otimes |100\rangle$  symmetrisch ist, muß  $\chi^a$  antisymmetrisch sein, siehe (11.39). Es handelt sich also um einen Paraheliumzustand.

Für angeregte Zustände des diskreten Spektrums ( $n > 1$ , ein Elektron bleibt in der ersten Schale und das andere wird angeregt) erhält man:

$$\begin{aligned}\psi_{nlm0}^{(+)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{100}(\vec{x}_{(1)}) \psi_{nlm}(\vec{x}_{(2)}) + \psi_{nlm}(\vec{x}_{(1)}) \psi_{100}(\vec{x}_{(2)})) \chi^a \\ \psi_{nlm0}^{(-)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{100}(\vec{x}_{(1)}) \psi_{nlm}(\vec{x}_{(2)}) - \psi_{nlm}(\vec{x}_{(1)}) \psi_{100}(\vec{x}_{(2)})) \chi_{1,m_s}^s.\end{aligned}$$

Dabei ist  $\chi_{1,m_s}^s$  eine symmetrische Spinwellenfunktion, siehe (11.40). Folglich ist  $\psi_{nlm0}^{(-)}$  ein Orthoheliumzustand. Seine Entartung beträgt  $3n^2$ . Die Entartung der Paraheliumzustände  $\psi_{nlm0}^{(+)}$  ist  $n^2$ . Obige Eigenfunktionen von  $\hat{H}_0$  sind offensichtlich zugleich Eigenfunktionen der Operatoren des Gesamtbahndrehimpulses (und dessen dritter Komponente) sowie des Gesamtspins (und dessen dritter Komponente). Diese Betrachtungen liefern offenbar qualitativ das Termschema aus Abb. 11.1.

## 11.5 Fockdarstellung und zweite Quantisierung

Aus den bisherigen Betrachtungen wissen wir, daß der Zustand eines Systems von  $N$  identischen Teilchen vollständig durch die Besetzungszahlen  $(N_1, N_2, \dots, N_i, \dots)$  der (normierten) 1-Teilchenzustände  $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |i\rangle, \dots$  beschrieben werden kann. Bei vielen Quantenprozessen hat man es mit der Erzeugung und Vernichtung von Teilchen zu tun (z.B. werden Photonen absorbiert oder emittiert). Zur Beschreibung solcher Prozess benötigt man ein mathematisches Modell, welches eine veränderliche Teilchenzahl zuläßt. Zu diesem Zwecke bilden wir den **Fockraum**:

$$\mathcal{F} := \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_N, \quad (11.41)$$

wobei  $\mathcal{H}_N$  den  $N$ -Teilchen-Hilbertraum bezeichnet und  $\mathcal{H}_0 = \mathbb{C}$  ist. Ein beliebiger Vektor  $|\Phi\rangle \in \mathcal{F}$  ist eine Sequenz  $|\Phi\rangle \equiv \{|\phi_N\rangle\}_{N=0}^{\infty}$  mit  $|\phi_N\rangle \in \mathcal{H}_N$  und

$$\|\Phi\|^2 := \sum_N \|\phi_N\|^2 < \infty.$$

Das Skalarprodukt in  $\mathcal{F}$  ist definiert durch:

$$\langle \Phi | \Psi \rangle := \sum_{N=0}^{\infty} \langle \phi_N | \psi_N \rangle,$$

wobei  $\langle \phi_N | \psi_N \rangle$  das Skalarprodukt in  $\mathcal{H}_N$  bezeichnet. Der durch die Sequenz  $1, 0, 0, \dots$  gegebene Vektor enthält kein Teilchen. Er heißt **Fock-Vakuum** und wird mit  $|0\rangle$  bezeichnet. In Teilchenzahldarstellung ist das Fock-Vakuum durch

$$|0\rangle = |0, 0, \dots\rangle$$

gegeben. Wie wir wissen, bilden die Vektoren

$$|\phi_N\rangle = |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle, \quad \sum N_i = N,$$

eine Basis in  $\mathcal{H}_N$  und damit liefert die Sequenz  $\{|\phi_N\rangle\}_{N=0}^{\infty}$  eine Basis in  $\mathcal{F}$ . Ein Vektor  $|\Phi\rangle = \{|\phi_N\rangle\}_{N=0}^{\infty}$  heißt **fini**t, falls er nur endlich viele von 0 verschiedene Komponenten hat. Die Menge  $\mathcal{F}_0 \subset \mathcal{F}$  der finiten Vektoren bildet einen dichten Unterraum.

Wegen des Symmetrisierungsprinzips sind natürlich nur die symmetrischen bzw. die antisymmetrischen  $N$ -Teilchen-Hilberträume  $\mathcal{H}_N^s$  (für Bosonen) und  $\mathcal{H}_N^a$  (für Fermionen) zugelassen. Aus ihnen bildet man den **bosonischen** bzw. den **fermionischen Fockraum**

$$\mathcal{F}^s := \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_N^s, \quad \mathcal{F}^a := \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_N^a.$$

Dies sind Teilräume von  $\mathcal{F}$ .

Man kann nun, auf kanonische Weise, jeder Observablen im 1-Teilchen-Hilbertraum  $\mathcal{H}$  eine entsprechende Observable in  $\mathcal{F}$  zuordnen. Führt man, in Analogie zur Behandlung des harmonischen Oszillators, die Operatoren der Erzeugung und Vernichtung von Teilchen ein, so kann man jede Observable des Systems als Kombination dieser Operatoren aufschreiben. Diese gesamte Prozedur wird oft als **zweite Quantisierung** bezeichnet.

Zunächst behandeln wir den Fall von **Bosonen** ausführlich: Ist  $\hat{A}$  eine Observable in  $\mathcal{H}$ , so ist der **Operator der zweiten Quantisierung** von  $\hat{A}$  definiert durch:

$$\hat{A} \otimes \mathbf{1} \otimes \dots \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \hat{A} \otimes \dots \otimes \mathbf{1} + \dots + \mathbf{1} \otimes \dots \otimes \mathbf{1} \otimes \hat{A}, \quad (N \text{ Summanden}),$$

auf jedem Unterraum  $\mathcal{H}_N^s$ . Wir definieren den **Vernichtungsoperator** eines Bosons im Zustand  $|i\rangle$  durch:

$$\hat{a}_i |N_1, \dots, N_i, \dots\rangle_+ := \sqrt{N_i} |N_1, \dots, N_i - 1, \dots\rangle_+. \quad (11.42)$$

Offensichtlich gilt:

$$\hat{a}_i |0\rangle = 0,$$

für alle  $i$ . Wir berechnen den zu  $\hat{a}_i$  adjungierten Operator:

$$\hat{a}_i^\dagger |N_1, \dots, N_i, \dots\rangle_+ := \sqrt{N_i + 1} |N_1, \dots, N_i + 1, \dots\rangle_+. \quad (11.43)$$

Dieser heißt **Erzeugungsoperator** eines Bosons im Zustand  $|i\rangle$ .

### Bemerkungen 11.6

Die  $\hat{a}_i$  und  $\hat{a}_i^\dagger$  sind auf  $\mathcal{F}_0$  wohldefinierte, unbeschränkte (abschließbare) Operatoren.

Wir setzen

$$\hat{\mathcal{N}}_i := \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i. \quad (11.44)$$

Dies ist offenbar der **Teilchenzahl-** oder **Besetzungszahloperator** für den Zustand  $|i\rangle$ , denn es gilt:

$$\hat{\mathcal{N}}_i |N_1, \dots, N_i, \dots\rangle_+ = N_i |N_1, \dots, N_i, \dots\rangle_+. \quad (11.45)$$

Wir überzeugen uns nun davon, daß die Information über die Symmetrie der bosonischen Zustände in der Algebra der Erzeuger und Vernichter kodiert ist: Sei zunächst  $i \neq j$ , dann gilt:

$$\begin{aligned} & [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] |N_1, \dots, N_i, \dots, N_j, \dots\rangle_+ \\ &= \sqrt{N_j + 1} \sqrt{N_i} |N_1, \dots, N_i - 1, \dots, N_j + 1, \dots\rangle_+ \\ &\quad - \sqrt{N_i} \sqrt{N_j + 1} |N_1, \dots, N_i - 1, \dots, N_j + 1, \dots\rangle_+ = 0. \end{aligned}$$

Für  $i = j$  erhalten wir:

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger] |N_1, \dots, N_i, \dots\rangle_+ = (N_i + 1) |N_1, \dots, N_i, \dots\rangle_+ - N_i |N_1, \dots, N_i, \dots\rangle_+ = |N_1, \dots, N_i, \dots\rangle_+.$$

Außerdem bemerken wir, daß die Erzeuger und Vernichter offensichtlich untereinander kommutieren. Wir erhalten damit die **Algebra der kanonischen Vertauschungsregeln (CCR)**<sup>9</sup>:

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0, \quad [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0. \quad (11.46)$$

<sup>9</sup>Canonical Commutation Relations

Dies sind die Vertauschungsregeln für ein System unabhängiger harmonischer Oszillatoren. Offensichtlich gilt für beliebige  $N$ -Teilchen-Zustände die folgende **Fockdarstellung** der normierten Basisvektoren in  $\mathcal{H}_N^s$ :

$$|N_1, \dots, N_i, \dots\rangle_+ = \frac{1}{\sqrt{N_1! \dots N_i! \dots}} (\hat{a}_1^\dagger)^{N_1} \dots (\hat{a}_i^\dagger)^{N_i} \dots |0\rangle. \quad (11.47)$$

Die Vektoren auf der rechten Seite dieser Gleichung sind aufgrund der CCR automatisch vollständig symmetrisch.

### Bemerkungen 11.7

Für verschiedene Zwecke benötigt man die Erzeuger und Vernichter in unterschiedlichen Darstellungen:

i) Sei  $f \in \mathcal{H}$  ein beliebiger 1-Teilchen-Vektor. Wir definieren:

$$\hat{a}(f) := \sum_{i=1}^{\infty} \langle f|i \rangle \hat{a}_i, \quad \hat{a}^\dagger(f) := \sum_{i=1}^{\infty} \langle i|f \rangle \hat{a}_i^\dagger. \quad (11.48)$$

Dies sind wiederum (zunächst auf  $\mathcal{F}_0$ ) wohldefinierte (unbeschränkte und abschließbare) Operatoren, für die die folgende Version der CCR gilt:

$$[\hat{a}(f), \hat{a}(g)] = 0 = [\hat{a}^\dagger(f), \hat{a}^\dagger(g)] \quad \text{und} \quad [\hat{a}(f), \hat{a}^\dagger(g)] = \langle f|g \rangle.$$

Dabei ist  $\langle f|g \rangle$  das Skalarprodukt in  $\mathcal{H}$ .

ii) Insbesondere ist die Ortsdarstellung oft nützlich. Anstelle von  $f$  wählen wir den verallgemeinerten Eigenvektor  $|\xi\rangle \equiv |\vec{x}, \sigma\rangle$ . Formal gilt dann völlig analog zu (11.48)

$$\hat{a}(\xi) := \sum_{i=1}^{\infty} \langle \xi|i \rangle \hat{a}_i, \quad \hat{a}^\dagger(\xi') := \sum_{j=1}^{\infty} \langle i|\xi' \rangle \hat{a}_j^\dagger,$$

aber  $\hat{a}(\xi)$  und  $\hat{a}^\dagger(\xi')$  sind kompliziertere Objekte, sogenannte **operatorwertige Distributionen**. Dies wird auch durch die Gestalt der CCR reflektiert:

$$[\hat{a}(\xi), \hat{a}^\dagger(\xi')] = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \langle \xi|i \rangle \langle j|\xi' \rangle [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \sum_{i=1}^{\infty} \langle \xi|i \rangle \langle i|\xi' \rangle = \langle \xi|\xi' \rangle = \delta(\xi - \xi').$$

Dabei ist  $\delta(\xi - \xi') = \delta^3(\vec{x} - \vec{x}') \delta_{\sigma\sigma'}$ . Unter Verwendung von (11.17), (11.18) und (11.20) schreiben wir den vollständig symmetrischen  $N$ -Teilchenzustand (11.47) in dieser Darstellung auf:

$$\begin{aligned} |\Psi_N\rangle &= \int d\xi_1 \dots d\xi_N |\xi_1, \dots, \xi_N\rangle_+ \Psi_N(\xi_1, \dots, \xi_N) \\ &= \int d\xi_1 \dots d\xi_N \Psi_N(\xi_1, \dots, \xi_N) \sum_{i_1, i_2, \dots=0}^{\infty} |i_1, \dots, i_N\rangle_+ \langle i_1, \dots, i_N|\xi_1, \dots, \xi_N\rangle_+ \\ &= \int d\xi_1 \dots d\xi_N \Psi_N(\xi_1, \dots, \xi_N) \sum_{i_1, i_2, \dots=0}^{\infty} |i_1, \dots, i_N\rangle_+ \langle i_1|\xi_1\rangle \dots \langle i_N|\xi_N\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \int d\xi_1 \dots d\xi_N \Psi_N(\xi_1, \dots, \xi_N) \sum_{i_1, i_2, \dots=0}^{\infty} \langle i_1|\xi_1\rangle \dots \langle i_N|\xi_N\rangle \hat{a}_{i_N}^\dagger \dots \hat{a}_{i_1}^\dagger |0\rangle, \end{aligned}$$

denn

$$\hat{a}_{i_N}^\dagger \dots \hat{a}_{i_1}^\dagger |0\rangle = \sqrt{N!} |i_1, \dots, i_N\rangle_+.$$

Damit ergibt sich

$$|\Psi_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \int d\xi_1 \cdots d\xi_N \Psi_N(\xi_1, \dots, \xi_N) \hat{a}^\dagger(\xi_N) \cdots \hat{a}^\dagger(\xi_1) |0\rangle. \quad (11.49)$$

Wirkt man mit dem Vernichtungsoperator  $\hat{a}(\xi)$  auf diese Gleichung, so erhält man unter Verwendung der CCR, vgl. HA Nr. 18:

$$\hat{a}(\xi) |\Psi_N\rangle = \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{(N-1)!}} \int d\xi_1 \cdots d\xi_{N-1} \Psi_N(\xi_1, \dots, \xi_{N-1}, \xi) \hat{a}^\dagger(\xi_{N-1}) \cdots \hat{a}^\dagger(\xi_1) |0\rangle, \quad (11.50)$$

und damit

$$(\hat{a}(\xi) \psi)_{N-1}(\xi_1, \dots, \xi_{N-1}) = \sqrt{N} \Psi_N(\xi_1, \dots, \xi_{N-1}, \xi), \quad (11.51)$$

Die analoge Formel für  $\hat{a}^\dagger(\xi)$  lautet:

$$(\hat{a}^\dagger(\xi) \psi)_{N+1}(\xi_1, \dots, \xi_{N+1}) = \frac{1}{\sqrt{N+1}} \sum_{j=1}^{N+1} \Psi_N(\xi_1, \dots, \xi_{j-1}, \xi_{j+1}, \dots, \xi_{N+1}) \delta(\xi - \xi_j). \quad (11.52)$$

iii) Schließlich kann man in der **Impulsdarstellung** arbeiten. Wir bezeichnen  $q \equiv (\vec{p}, \sigma)$  und definieren die operatorwertigen Distributionen:

$$\hat{a}(q) := \sum_{i=1}^{\infty} \langle q|i\rangle \hat{a}_i, \quad \hat{a}^\dagger(q') := \sum_{j=1}^{\infty} \langle i|q'\rangle \hat{a}_j^\dagger,$$

die die folgenden CCR erfüllen:

$$[\hat{a}(q), \hat{a}^\dagger(q')] = \delta(q - q'), \quad [\hat{a}(q), \hat{a}(q')] = 0 = [\hat{a}^\dagger(q), \hat{a}^\dagger(q')].$$

Diese Operatoren erhält man offensichtlich durch Fouriertransformation aus den  $\hat{a}(\xi)$  und  $\hat{a}^\dagger(\xi)$ . Man zeigt, völlig analog zur Rechnung unter Punkt ii):

$$\begin{aligned} (\hat{a}(q) \Psi)_{N-1}(q_1, \dots, q_{N-1}) &= \sqrt{N} \Psi_N(q_1, \dots, q_{N-1}, q) \\ (\hat{a}^\dagger(q) \Psi)_{N+1}(q_1, \dots, q_{N+1}) &= \frac{1}{\sqrt{N+1}} \sum_{j=1}^{N+1} \Psi_N(q_1, \dots, q_{j-1}, q_{j+1}, \dots, q_{N+1}) \delta(q - q_j). \end{aligned} \quad (11.53)$$

Wir kommen nun zur Darstellung der Observablen unter Verwendung von Erzeugern und Vernichtern. Dazu betrachten wir zuerst den folgenden Fall: Sei  $\hat{A}$  eine Summe von 1-Teilchenoperatoren

$$\hat{A} = \sum_{\alpha=1}^N \hat{A}_1^{(\alpha)},$$

die alle gleich sind,  $\hat{A}_1^{(\alpha)} = \hat{A}_1$ . Dann gilt

$$\hat{A} = \sum_{i,j=1}^{\infty} A_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \quad (11.54)$$

wobei  $A_{ij} = \langle i|\hat{A}_1|j\rangle$  die Matrixelemente von  $\hat{A}_1$  bezeichnet. Zum Beweis dieser Formel bemerken wir zunächst:

$$\hat{A}_1 = \sum_{i,j} A_{ij} |i\rangle \langle j|$$

und damit für das  $N$ -Teilchensystem

$$\hat{A} = \sum_{\alpha, i, j} \langle i(\alpha) | \hat{A}_1 | j(\alpha) \rangle |i(\alpha)\rangle \langle j(\alpha)| = \sum_{i, j} A_{ij} \sum_{\alpha} |i(\alpha)\rangle \langle j(\alpha)|.$$

Es ist also der Operator  $\sum_{\alpha} |i(\alpha)\rangle \langle j(\alpha)|$  auf einem beliebigen  $N$ -Teilchen-Zustand zu berechnen:

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha} |i(\alpha)\rangle \langle j(\alpha)| |N_1, \dots, N_i, \dots, N_j, \dots\rangle_+ \\ &= \sum_{\alpha} |i(\alpha)\rangle \langle j(\alpha)| \frac{\sqrt{N!}}{\sqrt{\prod_k N_k!}} \hat{S} |N_1, \dots, N_i, \dots, N_j, \dots\rangle \\ &= \frac{\sqrt{N!}}{\sqrt{\prod_k N_k!}} \hat{S} \sum_{\alpha} |i(\alpha)\rangle \langle j(\alpha)| |N_1, \dots, N_i, \dots, N_j, \dots\rangle \\ &= \frac{\sqrt{N!}}{\sqrt{\dots (N_i + 1)! \dots (N_j - 1)! \dots}} \frac{\sqrt{N_i + 1}}{\sqrt{N_j}} N_j \hat{S} |N_1, \dots, N_i + 1, \dots, N_j - 1, \dots\rangle \\ &= \sqrt{N_i + 1} \sqrt{N_j} |N_1, \dots, N_i + 1, \dots, N_j - 1, \dots\rangle_+ \\ &= a_i^\dagger \hat{a}_j |N_1, \dots, N_i, \dots, N_j, \dots\rangle_+. \end{aligned}$$

Sei, z.B. der Hamiltonoperator eine Summe aus (gleichen) 1-Teilchenoperatoren,

$$\hat{H} = \sum_{\alpha=1}^N \hat{H}_1^{(\alpha)},$$

und seien  $E_i$  und  $|i\rangle$  die Energieeigenfunktionen und -eigenzustände des 1-Teilchenproblems,

$$\hat{H}_1^{(\alpha)} |i\rangle = E_i |i\rangle.$$

Dann gilt

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{\infty} E_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i. \quad (11.55)$$

Als nächstes betrachten wir einen 2-Teilchen-Operator (der die Wechselwirkung von Teilchenpaaren beschreibt)

$$\hat{A} = \sum_{\alpha < \beta} \hat{A}_2^{(\alpha\beta)},$$

wobei die Operatoren  $\hat{A}_2^{(\alpha\beta)} = \hat{A}_2$  wieder alle die gleiche Form haben sollen. Dann erhält man

$$\hat{A} = \frac{1}{2} \sum_{i, j=1}^{\infty} \langle ij | \hat{A}_2 | kl \rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l. \quad (11.56)$$

Dies wird im Seminar bewiesen. Die typischen, in der Quantenmechanik auftretenden Hamiltonoperatoren sind gerade Summen aus 1- und 2-Teilchenoperatoren, Diese Klasse wurde durch obige Betrachtungen in Termen von Erzeugern und Vernichtern dargestellt.

Abschließend behandeln wir noch den Fall der **Fermionen**. Dies geht völlig analog, allerdings sind die Zustände nun Vektoren im fermionischen Fockraum  $\mathcal{F}^a$ . Wir setzen für den **Vernichtungsoperator**

$$\hat{a}_i |N_1, \dots, N_i, \dots\rangle_- = (-1)^{\nu_i} N_i |N_1, \dots, 1 - N_i, \dots\rangle_-, \quad (11.57)$$

mit

$$\nu_i := \sum_{k=1}^{i-1} N_k.$$

Diese Formel ist plausibel, denn hier gilt  $N_i = 0$  oder  $N_i = 1$  und die Zustände sind antisymmetrisch. Bevor  $\hat{a}_i$  das  $i$ -te Teilchen vernichten kann, muß dessen Zustand erst über  $\nu_i$  andere Vektoren “springen”. Der **Erzeugungsoperator** wirkt wie folgt:

$$\hat{a}_i^\dagger |N_1, \dots, N_i, \dots\rangle_- = (-1)^{\nu_i} (1 - N_i) |N_1, \dots, 1 - N_i, \dots\rangle_-. \quad (11.58)$$

Man zeigt nun leicht die folgenden Vertauschungsrelationen:

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger]_+ = \delta_{ij}, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j]_+ = 0, \quad [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger]_+ = 0, \quad (11.59)$$

wobei  $[\cdot, \cdot]_+$  den Antikommutator bezeichnet. Im Falle von Fermionen erhalten wir also **kanonische Antivertauschungsregeln (CAR)**. Für einen beliebigen Zustand gilt wieder:

$$|N_1, \dots, N_i, \dots\rangle_- = (\hat{a}_1^\dagger)^{N_1} \dots (\hat{a}_i^\dagger)^{N_i} \dots |0\rangle, \quad (11.60)$$

wobei natürlich nur  $N_i = 0$  oder  $N_i = 1$  sein kann. Der Vektor  $|0\rangle$  heißt fermionisches Fockvakuum und hat die Eigenschaft:

$$\hat{a}_i |0\rangle = 0,$$

für alle  $i$ . Aufgrund der kanonischen Antivertauschungsrelationen ist der Zustand (11.60) automatisch antisymmetrisch. Wir bemerken noch, daß

$$\hat{a}_i^{\dagger 2} = 0$$

gilt. Dies ist das **Pauliprinzip**.

Eine Darstellung der Observablen unter Verwendung der Erzeuger und Vernichter ist wie im bosonischen Fall möglich.

## 11.6 Suprafluidität

Wir betrachten das Helium-Isotop  $\text{He}^4$ . Es hat Gesamtspin  $S = 0$  und bei niedrigen Drücken bleibt es bis zur Temperatur  $T = 0$  im flüssigen Zustand. Bei der kritischen Temperatur  $T_\lambda = 2.18\text{K}$  geht es in den **suprafluiden Zustand** über, d.h. die Bewegung der Flüssigkeit erfolgt bei Temperaturen unterhalb von  $T_\lambda$  **ohne Viskosität**. Dies bedeutet, daß die Flüssigkeit Körper umströmen kann, ohne diese mitzuziehen. Erst bei einem Druck von ungefähr  $30\text{bar}$  kristallisiert  $\text{He}^4$ .

In einem idealen (nichtwechselwirkenden) Bose-Gas findet unterhalb einer kritischen Temperatur **Bose-Einstein-Kondensation** statt, d.h. der 1-Teilchen-Grundzustand wird makroskopisch besetzt. Bogoljubov folgend<sup>10</sup>, wollen wir ein mikroskopisches Modell entwickeln, daß das Phänomen der Suprafluidität erklärt. Dabei fassen wir  $\text{He}^4$  als (verdünntes), schwach wechselwirkendes Bose-Gas (hier besser, Bose-Flüssigkeit) auf und werden unterstellen, daß bei tiefen Temperaturen – in Analogie zum idealen Gas – Bose-Einstein-Kondensation in den Grundzustand stattfindet. Es wird sich zeigen, daß es für die noch zu definierenden, das Quantensystem beschreibenden Quasiteilchen unterhalb einer kritischen Geschwindigkeit der Flüssigkeit energetisch günstig ist zu kondensieren, d.h. die für die Entstehung von Viskosität notwendigen mikroskopischen Anregungen werden unterhalb dieser Geschwindigkeit unterdrückt.

Ausgangspunkt ist der folgende Modell-Hamiltonian:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m} \sum_i^N \Delta_i + \sum_{1=i<j}^N U(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|). \quad (11.61)$$

<sup>10</sup>N.N.Bogoljubov, J.Phys. (USSR) 11, 23 (1947)

Dabei wird angenommen, daß  $U$  ein schwaches, abstoßendes Potential ist, (und es wurde der Einfachheit wegen  $\hbar = 1$  gesetzt).  $N$  bezeichnet die Zahl der Teilchen. Befinde sich die Flüssigkeit in einem (quaderförmigen) Volumen  $V$  mit den Abmessungen  $l_x, l_y$  und  $l_z$ , so werden nach Auferlegung periodischer Randbedingungen die Werte des Wellenzahlvektors  $\vec{k}$  auf das Gitter

$$\vec{k} \in 2\pi \left( \frac{n_x}{l_x}, \frac{n_y}{l_y}, \frac{n_z}{l_z} \right), \quad n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z},$$

eingeschränkt. Für  $\hat{H}$  erhält man, unter Verwendung von (11.56), nach Übergang zur Impulsdarstellung:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} \frac{\vec{k}^2}{2m} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{p}, \vec{q}} U_{\vec{q}} \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}-\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{k}}. \quad (11.62)$$

Die Impulserhaltung im Wechselwirkungsterm ist eine Folge der Translationsinvarianz im Ortsraum. Wie oben bereits angekündigt, nehmen wir nun an, daß aufgrund der schwachen Wechselwirkung bei tiefen Temperaturen die Mehrzahl der Teilchen in den Grundzustand kondensiert. Bezeichnen wir die Zahl der Teilchen im Kondensat mit  $N_0$ , dann gilt

$$N - N_0 \ll N,$$

d.h. nur wenige Teilchen sind im angeregten Zustand. Bezeichnen wir  $\hat{a}_0 \equiv \hat{a}_{\vec{k}=0}$ , so gilt:

$$\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 |N_1, \dots, N_0, \dots\rangle_+ = N_0 |N_1, \dots, N_0, \dots\rangle_+$$

und

$$\hat{a}_0 \hat{a}_0^\dagger |N_1, \dots, N_0, \dots\rangle_+ = (N_0 + 1) |N_1, \dots, N_0, \dots\rangle_+,$$

also in guter Näherung  $[\hat{a}_0, \hat{a}_0^\dagger] = 0$ . Wir können  $\hat{a}_0$  und  $\hat{a}_0^\dagger$  daher als kommutierende Größen, also als Zahlen auffassen. Wir setzen:

$$\hat{a}_0 = \hat{a}_0^\dagger = \sqrt{N_0}.$$

Damit können wir den Hamiltonoperator folgendermaßen aufschreiben:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{\vec{k}^2}{2m} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} + \frac{N_0^2 U_0}{2V} + \frac{N_0}{2V} \sum_{\vec{k} \neq 0} U_{\vec{k}} \left( \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{k}}^\dagger + \hat{a}_{\vec{k}} \hat{a}_{-\vec{k}} + 2\hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} \right) + \frac{N_0 U_0}{V} \sum_{\vec{k} \neq 0} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} + \hat{H}_1.$$

Der Term  $H_1$  enthält 4 Erzeuger bzw. Vernichter angeregter Zustände. In der Wirkung auf einen Zustandsvektor liefert er Terme der Größenordnung  $\left(\frac{N-N_0}{V}\right)^2$ . Diese sind, verglichen mit den Beiträgen der anderen Terme, sehr klein. Die Wechselwirkung außerhalb des Kondensats kann also vernachlässigt werden, wir lassen  $\hat{H}_1$  weg. Da

$$N = N_0 + \sum_{\vec{k} \neq 0} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}}$$

gilt, können wir im Hamiltonian  $N_0$  durch  $N$  ausdrücken (dabei entstehende Terme vierter Ordnung in Erzeugern bzw. Vernichtern angeregter Zustände werden wieder weggelassen):

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{\vec{k}^2}{2m} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} + \frac{N^2 U_0}{2V} + \frac{N}{V} \sum_{\vec{k} \neq 0} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} + \frac{N}{2V} \sum_{\vec{k} \neq 0} U_{\vec{k}} \left( \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{k}}^\dagger + \hat{a}_{\vec{k}} \hat{a}_{-\vec{k}} \right). \quad (11.63)$$

Dies ist der **Bogoljubov-Hamiltonian**. Wir diagonalisieren diese quadratische Form in Erzeugern und Vernichtern mit Hilfe einer **Bogoljubov-Transformation**:

$$\hat{a}_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} \hat{A}_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} \hat{A}_{-\vec{k}}^\dagger, \quad \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger = u_{\vec{k}} \hat{A}_{\vec{k}}^\dagger + v_{\vec{k}} \hat{A}_{-\vec{k}}.$$

Dabei sind  $u_{\vec{k}}$  und  $v_{\vec{k}}$  reelle Koeffizienten. Man zeigt, vgl. Hausaufgabe Nr. 19 i), daß die  $\hat{A}_{\vec{k}}$  und  $\hat{A}_{\vec{k}}^\dagger$ , genau dann die kanonischen Vertauschungsrelationen

$$[\hat{A}_{\vec{k}}, \hat{A}_{\vec{k}'}^\dagger] = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}, \quad [\hat{A}_{\vec{k}}, \hat{A}_{\vec{k}'}] = [\hat{A}_{\vec{k}}^\dagger, \hat{A}_{\vec{k}'}^\dagger] = 0$$

erfüllen, wenn

$$u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 = 1 \quad (11.64)$$

gilt. Die Forderung, daß die nichtdiagonalen Terme im Bogoljubov-Hamiltonian (nach der Bogoljubov-Transformation) verschwinden, ist genau dann erfüllt, vgl. Hausaufgabe Nr. 19 ii), wenn gilt:

$$\left( \frac{\vec{k}^2}{2m} + nU_{\vec{k}} \right) u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} + \frac{n}{2} U_{\vec{k}} (u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2) = 0, \quad n = \frac{N}{V}. \quad (11.65)$$

Aus Gleichung (11.64) und (11.65) kann man die Koeffizienten  $u_{\vec{k}}$  und  $v_{\vec{k}}$  explizit bestimmen, vgl. Hausaufgabe Nr. 20. Einsetzen dieser Resultate in den Bogoljubov-Hamiltonian liefert:

$$\hat{H} = \frac{N^2 U_0}{2V} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} \left( \frac{\vec{k}^2}{2m} + nU_{\vec{k}} - \omega_{\vec{k}} \right) + \sum_{\vec{k} \neq 0} \omega_{\vec{k}} \hat{A}_{\vec{k}}^\dagger \hat{A}_{\vec{k}}, \quad (11.66)$$

mit

$$\omega_{\vec{k}} = \sqrt{\left( \frac{\vec{k}^2}{2m} \right)^2 + \frac{n\vec{k}^2 U_{\vec{k}}}{m}}. \quad (11.67)$$

Dies ist die **Dispersionsrelation** der Theorie. Die ersten beiden Terme in (11.66) werden als Grundzustandsenergie interpretiert. Der dritte Term beschreibt offensichtlich eine Summe von Oszillatoren, die im vorliegenden Kontext **Quasiteilchen** genannt werden. Diese sind verantwortlich für die Anregungen des Quantensystems.

Wir werten obige Dispersionsrelation aus: Für kleine  $\vec{k}$  dominiert offenbar der zweite Term unter der Wurzel. Wir erhalten eine lineare Relation

$$\omega_{\vec{k}} = k v, \quad v = \sqrt{\frac{nU_0}{m}}.$$

Dem entsprechen langwellige Anregungen (**Phononen**),  $v$  ist die Schallgeschwindigkeit im Gas ( $238m \cdot s^{-1}$  für He<sup>4</sup>). Für große  $\vec{k}$  dominiert der erste Term und nach Taylorentwicklung bis zur ersten Ordnung erhalten wir:

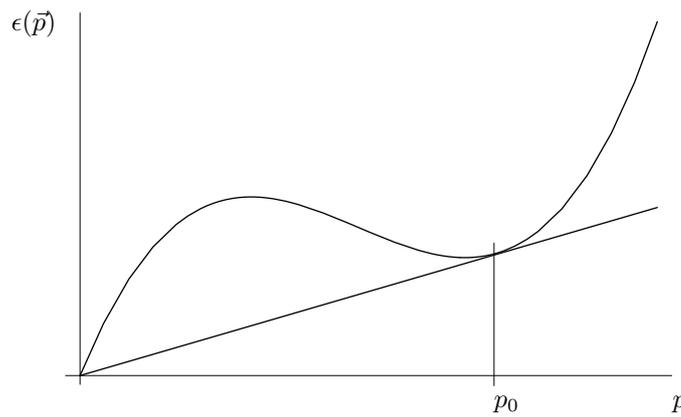
$$\omega_{\vec{k}} = \frac{\vec{k}^2}{2m} + nU_{\vec{k}}.$$

Dies ist die Dispersionsrelation von freien Teilchen, verschoben um ein mittleres Potential  $nU_{\vec{k}}$ . Dazwischen, bei einem  $k_0$ , liegt ein **Minimum**, siehe Abbildung 11.2. Entwickelt man um das Minimum, so ergibt sich

$$\omega_{\vec{k}} = \omega_{\vec{k}_0} + \frac{(\vec{k} - \vec{k}_0)^2}{2m}.$$

Quasiteilchen mit dieser Dispersionsrelation nennt man **Rotonen**. Im thermodynamischen Gleichgewicht hat die Mehrzahl der Quasiteilchen eine Energie in der Nähe des Minimums der Funktion  $\omega_{\vec{k}}$ , also entweder in der Nähe von  $\omega = 0$  oder in der Nähe von  $\omega_{\vec{k}_0}$ .

Wir zeigen nun, daß eine Quantenflüssigkeit mit obiger Dispersionsrelation die Eigenschaft der **Suprafluidität** haben muß: Wir betrachten den Fluß durch eine Kapillare mit Geschwindigkeit  $\vec{v}$ . Bei Vorliegen von Viskosität wird ein Teil der kinetischen Energie in innere Energie umgewandelt. Dazu sind, wie bereits eingangs diskutiert, elementare Anregungen erforderlich. Wir fragen uns, unter welchen Bedingungen es

Abbildung 11.2: Die Energie besitzt ein lokales Minimum bei  $p_0$ .

energetisch günstig für die Quantenflüssigkeit ist, solche Anregungen (Quasiteilchen) zu bilden. Sei  $K$  das Ruhesystem der Röhre und bewege sich die Flüssigkeit in diesem System mit  $-\vec{v}$ . Sei  $K_0$  das Ruhesystem der Flüssigkeit. In  $K_0$  bewegt sich die Röhre mit  $\vec{v}$ . Wir bezeichnen Energie und Gesamtimpuls in diesen Bezugssystemen mit  $(E, \vec{P})$  bzw.  $(E_0, \vec{P}_0)$ . Diese Größen sind durch eine Galilei-Transformation verknüpft:

$$E = E_0 - \vec{P}_0 \cdot \vec{v} + \frac{M\vec{v}^2}{2}, \quad \vec{P} = \vec{P}_0 - M\vec{v},$$

wobei  $M$  die Masse der Flüssigkeit bezeichnet. Bei  $T = 0$  sind alle Teilchen im Grundzustand ( $E_0^g, \vec{P}_0^g = 0$ ). Die Anregung eines Quasiteilchens mit Impuls  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$  und Energie  $\epsilon(\vec{p}) = \hbar\omega_{\vec{k}}$  liefert

$$E_0 = E_0^g + \epsilon(\vec{p}), \quad \vec{P}_0^g = \vec{p}.$$

Damit erhalten wir im System  $K$

$$E = E_0^g + \epsilon(\vec{p}) - \vec{p} \cdot \vec{v} + \frac{M\vec{v}^2}{2},$$

also eine Anregungsenergie

$$\Delta E = \epsilon(\vec{p}) - \vec{p} \cdot \vec{v}.$$

Nur wenn diese negativ ist, ist die Anregung von Quasiteilchen energetisch günstig.  $\Delta E$  wird am kleinsten, wenn  $\vec{v}$  und  $\vec{p}$  parallel zueinander liegen, also wenn

$$v > \frac{\epsilon(\vec{p})}{p}, \quad p = |\vec{p}|, \quad v = |\vec{v}|, \quad (11.68)$$

gilt. Die obige Dispersionsrelation liefert nun in der Tat eine solche kritische Geschwindigkeit. Da  $\frac{\epsilon(\vec{p})}{p}$  mit dem Anstieg der Geraden vom Nullpunkt zum Schnittpunkt mit dem Graphen von  $\epsilon$  identisch ist, erhält man das Minimum dieser Größe an der Stelle, wo diese Gerade tangential wird. Unterhalb der kritischen Geschwindigkeit

$$v_c = \min \left\{ \frac{\epsilon(\vec{p})}{p} \right\}$$

haben wir Suprafluidität. (Für  $\text{He}^4$  erhält man  $v_c = 60 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ .)



# Kapitel 12

## Näherungsmethoden für gebundene Zustände

### 12.1 Zeitunabhängige Störungstheorie

#### 12.1.1 Der Fall ohne Entartung

Wir betrachten das **nicht exakt** lösbares Eigenwertproblem für den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1.$$

Wir nehmen an, daß das Eigenwertproblem

$$\hat{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$$

für  $\hat{H}_0$  exakt lösbar ist und wollen  $\lambda \hat{H}_1$  als kleine Störung auffassen. Unsere Aufgabe wird sein, das Eigenwertproblem für  $\hat{H}_1$  näherungsweise zu lösen<sup>1</sup>.

Sei  $E_0$  ein **nicht entarteter, diskreter** Eigenwert mit Eigenvektor  $|0\rangle$  (nicht notwendigerweise der Grundzustand). Wir machen die folgende **Annahme**: Es existiere, für ein hinreichend kleines  $\lambda$ , ein nichtentarteter Eigenwert  $E(\lambda)$  mit Eigenvektor  $|\psi(\lambda)\rangle$  (beide analytisch in  $\lambda$ ) für den Operator  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1$ . Damit können wir die folgenden Reihenentwicklungen aufschreiben:

$$\begin{aligned} E(\lambda) &= \sum_{r=0}^{\infty} \lambda^r E^{(r)}; & E^{(0)} &\equiv E_0 \\ |\psi(\lambda)\rangle &= \sum_{r=0}^{\infty} \lambda^r |\psi^{(r)}\rangle; & |\psi^{(0)}\rangle &\equiv |0\rangle. \end{aligned} \tag{12.1}$$

Dies sind die Rayleigh–Schrödinger-Reihen. Zu lösen ist das Problem

$$\hat{H} |\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle. \tag{12.2}$$

Wir stellen die folgende Normierungsbedingung an  $|\psi(\lambda)\rangle$ :

$$\langle 0 | \psi(\lambda) \rangle = \langle 0 | 0 \rangle = 1.$$

Damit ergibt sich  $\langle 0 | \psi^{(r)} \rangle = 0$ , für alle  $r > 0$ . Einsetzen der Reihen (12.1) in (12.2) liefert:

$$\left( \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1 \right) \sum_{r=0}^{\infty} \lambda^r |\psi^{(r)}\rangle = \left( \sum_{r=0}^{\infty} \lambda^r E^{(r)} \right) \left( \sum_{s=0}^{\infty} \lambda^s |\psi^{(s)}\rangle \right).$$

---

<sup>1</sup>Die mathematischen Hintergründe der Störungstheorie werden hier nicht behandelt, wir verweisen auf T. Kato: *Perturbation Theory for Linear Operators*, Springer 1966

Wir multiplizieren die Reihen aus und ordnen nach Potenzen von  $\lambda$ :

$$(\hat{H}_0 - E^{(0)})|\psi^{(0)}\rangle + \sum_{r=1}^{\infty} \lambda^r \left\{ \hat{H}_0|\psi^{(r)}\rangle + \hat{H}_1|\psi^{(r-1)}\rangle - \sum_{k=0}^r E^{(k)}|\psi^{(r-k)}\rangle \right\} = 0.$$

Diese Gleichung ist für alle  $\lambda$  erfüllt, falls gilt:

$$(\hat{H}_0 - E^{(0)})|\psi^{(0)}\rangle = 0 \quad (12.3)$$

$$(\hat{H}_0 - E^{(0)})|\psi^{(1)}\rangle = (E^{(1)} - \hat{H}_1)|\psi^{(0)}\rangle \quad (12.4)$$

$$(\hat{H}_0 - E^{(0)})|\psi^{(r)}\rangle = (E^{(1)} - \hat{H}_1)|\psi^{(r-1)}\rangle + \sum_{k=2}^r E^{(k)}|\psi^{(r-k)}\rangle; \quad r \geq 2 \quad (12.5)$$

$$\langle 0|\psi^{(r)}\rangle = 0, \quad r \geq 1. \quad (12.6)$$

Daraus können wir, Ordnung für Ordnung, die Terme der Rayleigh–Schrödinger-Reihen bestimmen. Unter Verwendung von (12.6) bilden wir Skalarprodukte der ersten drei Gleichungen mit  $\langle 0|$ . (12.3) liefert uns die triviale Identität  $E_0 = \langle 0|\hat{H}_0|0\rangle$ . Aus (12.4) erhalten wir die erste Korrektur des Energieniveaus,

$$E^{(1)} = \langle 0|\hat{H}_1|0\rangle, \quad (12.7)$$

und (12.5) liefert

$$E^{(r)} = \langle 0|\hat{H}_1|\psi^{(r-1)}\rangle. \quad (12.8)$$

Als nächstes bilden wir die Skalarprodukte mit  $\langle n|$ ,  $n \neq 0$ . Gleichung (12.3) liefert wieder eine triviale Identität und aus (12.4) erhalten wir:  $(E_n - E_0)\langle n|\psi^{(1)}\rangle = -\langle n|\hat{H}_1|0\rangle$ , also

$$\langle n|\psi^{(1)}\rangle = \frac{\langle n|\hat{H}_1|0\rangle}{E_0 - E_n}, \quad n \neq 0.$$

Da aber die  $|n\rangle$  eine Basis bilden und da  $|\psi^{(1)}\rangle$  orthogonal zu  $|0\rangle$  ist, erhalten wir für die erste Störung des Zustandes:

$$|\psi^{(1)}\rangle = \sum_{n \neq 0} |n\rangle \langle n|\psi^{(1)}\rangle = \sum_{n \neq 0} |n\rangle \frac{\langle n|\hat{H}_1|0\rangle}{E_0 - E_n}. \quad (12.9)$$

Setzen wir (12.9) in (12.8) für  $r = 2$  ein, so ergibt sich:

$$E^{(2)} = \sum_{n \neq 0} \frac{\langle 0|\hat{H}_1|n\rangle \langle n|\hat{H}_1|0\rangle}{E_0 - E_n}. \quad (12.10)$$

Mit (12.5) erhalten wir für  $r \geq 2$  die Rekursionsformel:

$$(E_n - E_0)\langle n|\psi^{(r)}\rangle = E^{(1)}\langle n|\psi^{(r-1)}\rangle - \langle n|\hat{H}_1|\psi^{(r-1)}\rangle + \sum_{k=2}^{r-1} E^{(k)}\langle n|\psi^{(r-k)}\rangle.$$

Aber der letzte Term der Summe verschwindet wegen  $\langle n|\psi^{(0)}\rangle = 0$ . Damit ergibt sich :

$$|\psi^{(r)}\rangle = \sum_{n \neq 0} |n\rangle \frac{1}{E_0 - E_n} \left\{ \langle n|\hat{H}_1|\psi^{(r-1)}\rangle - \sum_{k=1}^r E^{(k)}\langle n|\psi^{(r-k)}\rangle \right\}. \quad (12.11)$$

Zusammen mit (12.8) liefert dies die vollständige Lösung des Problems.

**Bemerkungen 12.1**

- i) Die Änderung des Energieniveaus in 1. Näherung ist gleich dem Erwartungswert der Störung im ungestörten Zustand, siehe (12.7). Wenn  $|0\rangle$  der Grundzustand von  $\hat{H}_0$  ist, dann ist  $E_n^{(2)}$  immer negativ.
- ii) Die Frage nach der Konvergenz der auftretenden Reihen ist i.a. schwierig und wird hier nicht diskutiert. Die Entwicklungen sind nur nützlich, wenn schon wenige Terme eine gute Approximation des exakten Resultats liefern<sup>2</sup>. Ein aus physikalischer Sicht plausibles Kriterium lautet:

$$|\lambda \langle n | \hat{H}_1 | 0 \rangle| \ll |E_0 - E_n|,$$

d.h. die Energiedifferenz zwischen den Niveaus muß viel größer sein als die Matrixelemente der Störung.

- iii) Die  $|\psi(\lambda)\rangle$  sind nicht automatisch normiert. Man führt eine  $\lambda$ -abhängige Normierungskonstante  $Z$  ein, setzt  $|\tilde{\psi}(\lambda)\rangle = \sqrt{Z(\lambda)} |\psi(\lambda)\rangle$  und fordert

$$\|\tilde{\psi}(\lambda)\|^2 = \langle \tilde{\psi}(\lambda) | \tilde{\psi}(\lambda) \rangle = Z(\lambda) \langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle = 1.$$

Der Ansatz

$$Z(\lambda) = \sum_{r=0}^{\infty} \lambda^r Z^{(r)}, \quad Z^{(0)} = 1,$$

liefert eine Rekursionsformel zur Bestimmung von  $Z(\lambda)$ :

$$\sum_{k=0}^r \sum_{i=0}^{r-k} Z^{(k)} \langle \psi^{(i)} | \psi^{(r-k-i)} \rangle = 0; \quad r \geq 1.$$

Dies liefert uns  $Z^{(1)} = 0$ ,  $Z^{(2)} = -\langle \psi^{(1)} | \psi^{(1)} \rangle$ , ...

**12.1.2 Der Fall mit Entartung**

Sei nun  $E_0$  ein  $m$ -fach **entarteter** Eigenwert von  $\hat{H}_0$  und sei  $\{|0, \alpha\rangle\}$ ,  $\alpha = 1, \dots, m$ , ein vollständiges Orthonormalsystem von Eigenvektoren im Eigenraum zu  $E_0$ . Dann gilt

$$\langle 0, \alpha' | 0, \alpha \rangle = \delta_{\alpha' \alpha}.$$

Damit haben wir

$$E^{(0)} = E_0; \quad |\psi^{(0)}\rangle = \sum_{\alpha} |0, \alpha\rangle c_{\alpha}, \quad (12.12)$$

wobei die  $c_{\alpha}$  zunächst noch freie Koeffizienten sind. Das Einsetzen dieser Bedingungen in (12.4) liefert, nach Multiplikation mit  $\langle 0, \alpha' |$ :

$$\langle 0, \alpha' | \hat{H}_0 | \psi^{(1)} \rangle + \sum_{\alpha} \langle 0, \alpha' | \hat{H}_1 | 0, \alpha \rangle c_{\alpha} = E^{(0)} \langle 0, \alpha' | \psi^{(1)} \rangle + E^{(1)} \sum_{\alpha} \langle 0, \alpha' | 0, \alpha \rangle.$$

Da  $\langle 0, \alpha' | \hat{H}_0 | \psi^{(1)} \rangle = E^{(0)} \langle 0, \alpha' | \psi^{(1)} \rangle$  gilt, folgt:

$$\sum_{\alpha} \left\{ \langle 0, \alpha' | \hat{H}_1 | 0, \alpha \rangle - E^{(1)} \delta_{\alpha' \alpha} \right\} c_{\alpha} = 0. \quad (12.13)$$

<sup>2</sup>Man kann strenge Kriterien für die Existenz der Störungsreihe in Termen der Resolvente des Hamiltonoperators aufschreiben, vgl. [Thirring], Bd III, Abschnitt 3.5. Diese Kriterien sind allerdings für physikalische Standardbeispiele nicht erfüllt – und trotzdem liefert die Störungstheorie in niedrigen Ordnungen vernünftige Resultate.

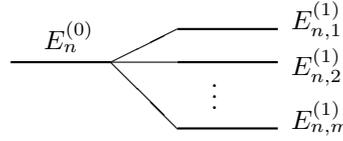


Abbildung 12.1: Aufspaltung der Spektrallinien bei einem entarteten Niveau

Von Null verschiedene Lösungen für die Koeffizienten  $c_\alpha$  gibt es genau dann, wenn

$$\det \left( \langle 0, \alpha | \hat{H}_1 | 0, \alpha \rangle - E^{(1)} \delta_{\alpha\alpha'} \right) = 0 \quad (12.14)$$

gilt. Dies ist die **Säkulargleichung** zur Bestimmung der Energiekorrekturen in **erster Ordnung**. Für  $\alpha = 1, \dots, m$  ist (12.14) die Determinante einer  $m \times m$ -Matrix. In Abhängigkeit vom Rang dieser Matrix können für die Eigenwerte  $E^{(1)}$  weiterhin Entartungen auftreten. Im einfachsten Fall sind alle  $E_\alpha^{(1)}$  verschieden, dann wird die Entartung **vollständig aufgehoben**. Dies führt zu einer Aufspaltung der Spektrallinien, siehe Abbildung 12.1.

Wir bezeichnen die zu den Lösungen  $E_\beta^{(1)}$  der Säkulargleichung gehörigen Eigenvektoren mit

$$c_\alpha^\beta = (c_1^\beta, \dots, c_m^\beta).$$

Diese können orthonormal gewählt werden,

$$\sum_\gamma c_\gamma^{*\alpha} c_\gamma^\beta = \delta_{\alpha\beta}. \quad (12.15)$$

Zerlegen wir nun den Hilbertraum des Systems in die orthogonale Summe

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1,$$

wobei  $\mathcal{H}_0$  der Teilraum zum Eigenwert  $E_0$  (mit Basis  $\{|0, \alpha\rangle\}$ ) ist und  $\mathcal{H}_1$  das orthogonale Komplement (mit Basis  $\{|n\rangle, n \neq 0\}$ ) bezeichnet. Für jedes  $\alpha$  ergibt sich aus (12.12):

$$|\psi_\alpha^{(0)}\rangle = \sum_\beta |0, \beta\rangle c_\beta^\alpha.$$

Aus (12.15) folgt aber:

$$\langle \psi_\alpha^{(0)} | \psi_\beta^{(0)} \rangle = \sum_{\gamma, \gamma'} c_\gamma^{*\alpha} c_{\gamma'}^\beta \langle 0, \gamma | 0, \gamma' \rangle = \sum_{\gamma, \gamma'} c_\gamma^{*\alpha} c_{\gamma'}^\beta \delta_{\gamma\gamma'} = \sum_\gamma c_\gamma^{*\alpha} c_\gamma^\beta = \delta_{\alpha\beta},$$

d.h.: die  $\{|\psi_\alpha^{(0)}\rangle\}$  bilden eine Basis in  $\mathcal{H}_0$ . Damit gilt für jeden Vektor, also auch für die 1. Störung des Zustandes zum Eigenwert  $E_\alpha^{(1)}$ :

$$|\psi_\alpha^{(1)}\rangle = \sum_{n \neq 0} |n\rangle \langle n | \psi_\alpha^{(1)} \rangle + \sum_{\beta \neq \alpha} b_\beta |\psi_\beta^{(0)}\rangle. \quad (12.16)$$

Der Vektor  $|\psi_\alpha^{(1)}\rangle$  ist wegen (12.6) orthogonal zu  $|\psi_\alpha^{(0)}\rangle$ . Die Koeffizienten  $\langle n | \psi_\alpha^{(1)} \rangle$  sind im Rahmen dieser Näherung berechenbar, die  $b_\beta$  aber sind erst in höherer Ordnung bestimmbar. In der Tat folgt aus (12.4) für  $n \neq 0$  sofort

$$\langle n | \psi_\alpha^{(1)} \rangle = \frac{1}{E_0 - E_n} \langle n | \hat{H}_1 | \psi_\alpha^{(0)} \rangle.$$

Damit ergibt sich für die zweite Korrektur der Energie aus (12.5) für  $r = 2$ :

$$(\hat{H}_0 - E^{(0)})|\psi_\alpha^{(2)}\rangle = (E_\alpha^{(1)} - \hat{H}_1)|\psi_\alpha^{(1)}\rangle + E_\alpha^{(2)}|\psi_\alpha^{(0)}\rangle,$$

und wegen  $\langle \psi_\alpha^{(0)} | \psi_\alpha^{(1)} \rangle = 0$  folgt:

$$E_\alpha^{(2)} = \langle \psi_\alpha^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_\alpha^{(1)} \rangle, \quad (12.17)$$

in Analogie zur Formel (12.8). Unter Verwendung von (12.16) haben wir:

$$E_\alpha^{(2)} = \sum_{n \neq 0} \langle \psi_\alpha^{(0)} | \hat{H}_1 | n \rangle \langle n | \psi_\alpha^{(1)} \rangle + \sum_{\beta \neq \alpha} b_\beta \langle \psi_\alpha^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_\beta^{(0)} \rangle.$$

Aber für  $\alpha \neq \beta$  gilt:

$$\begin{aligned} \langle \psi_\alpha^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_\beta^{(0)} \rangle &= \sum_{\gamma, \gamma'} c_\gamma^{*\alpha} \langle 0, \gamma | \hat{H}_1 | 0, \gamma' \rangle c_{\gamma'}^\beta \\ &= \sum_\gamma c_\gamma^{*\alpha} \left\{ \sum_{\gamma'} \left( \langle 0, \gamma | \hat{H}_1 | 0, \gamma' \rangle - \delta_{\gamma\gamma'} E_\beta^{(1)} \right) c_{\gamma'}^\beta + \sum_{\gamma'} \delta_{\gamma, \gamma'} E_\beta^{(1)} c_{\gamma'}^\beta \right\} \\ &= \sum_{\gamma, \gamma'} c_{\gamma'}^\beta c_\gamma^{*\alpha} \delta_{\gamma\gamma'} E_\beta^{(1)} = \left( \sum_\gamma c_\gamma^\beta c_\gamma^{*\alpha} \right) E_\beta^{(1)} = \delta_{\alpha\beta} E_\beta^{(1)} = 0. \end{aligned}$$

Damit erhalten wir die folgende Korrektur des Energieniveaus in zweiter Ordnung:

$$E_\alpha^{(2)} = \sum_{n \neq 0} \frac{1}{E_0 - E_n} \langle \psi_\alpha^{(0)} | \hat{H}_1 | n \rangle \langle n | \hat{H}_1 | \psi_\alpha^{(0)} \rangle. \quad (12.18)$$

## 12.2 Atome

### 12.2.1 Alkaliatome

Die Alkaliatome (Lithium, Natrium, Kalium, ...) besitzen alle ein Valenzelektron. Wir behandeln diese durch Betrachtung eines 1-Teilchenproblems für das Valenzelektron im zentralsymmetrischen Feld des Atomrumpfes, bestehend aus dem Kern und den inneren Elektronenschalen. Die Kerneffekte werden zunächst vernachlässigt. Dies führt zum folgenden Ansatz für den Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{r} + V_1(r),$$

wobei  $V_1$  ein effektives, zentralsymmetrisches Potential beschreibt, das den Abschirmeffekten der  $Z - 1$  Elektronen der inneren Schalen Rechnung trägt. Für große  $r$  schirmen diese  $(Z - 1)$  Elektronen die Ladung  $Ze$  des Kerns gut ab, so daß sich  $e$  als effektive Ladung ergibt. Für große  $r$  muß  $V_1$  folglich verschwinden. Für Abstände  $r$ , die kleiner als die Radien der inneren Elektronenschalen sind, wirkt dagegen das Potential  $-\frac{Ze^2}{r}$ , d.h.  $V_1$  ist in der Umgebung des Kerns ungleich Null. Wir wollen im weiteren  $V_1$  als kleine Störung auffassen. Dazu schreiben wir

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1,$$

mit

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{r} \quad \text{und} \quad \lambda \hat{H}_1 = V_1(r) \equiv \lambda \tilde{V}(r).$$

Der ungestörte Hamiltonian  $\hat{H}_0$  ist also identisch mit dem Hamiltonian des Wasserstoffatoms. In den Bezeichnungen von Teil I, Abschnitt 6.2, haben wir für  $\hat{H}_0$  die ungestörten Eigenfunktionen  $|nlm\rangle$  zu den **ungestörten** Eigenwerten  $-\frac{\alpha}{n^2}$ . Die Entartung ist  $n^2$ , bzw., unter Berücksichtigung des Spins  $2n^2$ .

Wir erhalten also die folgende Säkulargleichung, vgl. (12.13), für diesen Fall:

$$\sum_{l,m} \left( \langle n l m | \hat{H}_1 | n l m \rangle - \delta_{ll'} \delta_{mm'} E^{(1)} \right) c_{lm} = 0,$$

bzw. die Eigenwertgleichung, siehe (12.14):

$$\det \left( \langle n l m | \tilde{V} | n l m \rangle - \delta_{ll'} \delta_{mm'} E^{(1)} \right) = 0.$$

Offensichtlich liegt die einfachste aller möglichen Situationen vor: Da  $\hat{H}_0$  und  $\tilde{V}$  mit  $\hat{L}_3$  und  $\hat{L}^2$  kommutieren, ist der gestörte Hamiltonian  $\hat{H}$  auch **diagonal** in der Basis  $|nlm\rangle$ . Es gilt:

$$\begin{aligned} & \langle n l m | \tilde{V}(r) | n l m \rangle \\ &= \int_0^\infty r^2 dr R_{nl}^*(r) R_{nl}(r) \tilde{V}(r) \int d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ &= \delta_{ll'} \delta_{mm'} \int r^2 dr |R_{nl}(r)|^2 \tilde{V}(r), \end{aligned}$$

und wir lesen die folgenden Eigenwerte ab:

$$E_{nl}^{(1)} = \int |R_{nl}(r)|^2 \tilde{V}(r) r^2 dr$$

Natürlich gilt  $E_{nl}^{(1)} < 0$ , denn  $\tilde{V}(r) < 0$ .

### Bemerkungen 12.2

- i) Die Entartung wird nur teilweise aufgehoben, für verschiedene  $l$ -Werte gibt es keine Entartung mehr, aber die Entartung für gegebenes  $(n, l)$  zu verschiedenen  $m$  bleibt bestehen. So spaltet der durch  $n = 2$  und  $l = 0, 1$  charakterisierte 8-fach entartete Term in einen 2-fach entarteten  $2s$ -Term und einen 6-fach entarteten  $2p$ -Term auf.
- ii) Wir diskutieren die relative Lage der verschiedenen Terme für fixiertes  $n$ : Es gilt  $E_{nl}^{(1)} < 0$ ,  $\tilde{V}$  wird zum Nullpunkt hin immer stärker negativ (für sehr kleine  $r$  gilt  $\sim \frac{Ze^2}{r}$ ) und  $|R_{nl}(r)|^2$  ist in der Nähe des Nullpunktes um so stärker von Null verschieden, je kleiner  $l$  ist. Dies folgt aus den Eigenschaften der Laguerreschen Polynome und ist außerdem auch plausibel: Die Zentrifugalkräfte "drücken die Wellenfunktion für höhere  $l$  immer weiter nach außen". Damit erhalten wir:

$$|E_{n,l}^{(1)}| > |E_{n,l'}^{(1)}|, \quad l < l',$$

d.h. der  $2s$ -Term wird tiefer liegen als der  $2p$ -Term. Diese Betrachtungen liefern uns, ohne explizite Rechnung (und ohne explizite Angabe von  $\tilde{V}(r)$ ) ein qualitativ richtiges Bild des Termschemas eines Alkaliatoms, siehe Abb. 12.2.

- iii) Will man  $E_{n,l}^{(1)}$  explizit berechnen, muß man ein Modell für  $\tilde{V}$  formulieren. Typischerweise entwickelt man  $\tilde{V}$  nach Potenzen von  $r^{-k}$ , die einzelnen Terme können als Beiträge aus der Multipolentwicklung der Ladungswolke der  $Z - 1$  Elektronen der inneren Schalen interpretiert werden, vgl. Hausaufgabe Nr. 23 und [Bohm], Kapitel VII.

## 12.2.2 Das Heliumatom

Dies ist ein 2-Elektronen-Problem. Analog werden  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Be}^{++}$ , ... behandelt. Wir setzen, für eine gegebene Kernladungszahl  $Z$ , den folgenden Hamiltonoperator an, vgl. Abschnitt 11.4:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1,$$

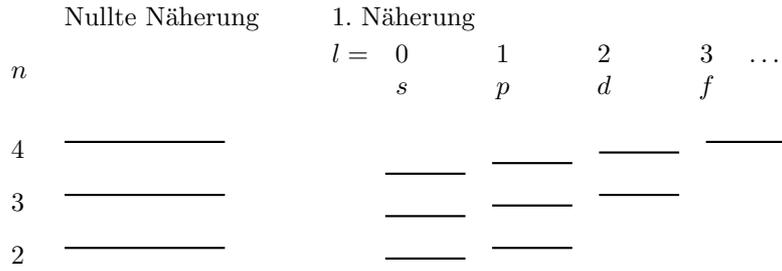


Abbildung 12.2: Schematisches Termschema von Lithium

mit

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2}$$

und

$$\hat{H}_1 = \frac{e^2}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}.$$

Mit wachsendem  $Z$  wird es immer sinnvoller,  $\hat{H}_1$  als Störung aufzufassen. Das Eigenwertproblem für  $\hat{H}_0$  wurde in Abschnitt 11.4 streng gelöst. Das Punktspektrum von  $\hat{H}_0$  ist gegeben durch

$$E_{n_1, n_2} = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2} \left( \frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} \right).$$

Das kontinuierliche Spektrum beginnt aber schon bei

$$E = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2},$$

d.h. das diskrete Spektrum (Eigenwerte, die nicht im Kontinuum liegen) ist gegeben durch

$$E_n = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2} \left( 1 + \frac{1}{n^2} \right).$$

Nur auf diese **isolierten** Elemente des Punktspektrums ist die Störungstheorie ohne weiteres anwendbar, auf in das Kontinuum eingebettete Eigenwerte dagegen **nicht**. Wir erinnern noch an die zugehörigen Eigenfunktionen: Für den Grundzustand  $n = 1$  ist die Ortswellenfunktion symmetrisch und die Spinwellenfunktion antisymmetrisch (Parahelium):

$$\psi_1 = \varphi_{100}(\vec{x}^{(1)}) \varphi_{100}(\vec{x}^{(2)}) \chi^a,$$

wobei  $\chi^a$  den antisymmetrischen Spin-Singulett-Zustand bezeichnet. Für angeregte Zustände  $n > 1$  haben wir Eigenfunktionen mit symmetrischen (Parahelium) und antisymmetrischen Ortswellenfunktionen (Orthohelium):

$$\begin{aligned} \psi_{nlm0}^{(+)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_{100}(\vec{x}^{(1)}) \varphi_{nlm}(\vec{x}^{(2)}) + \varphi_{nlm}(\vec{x}^{(1)}) \varphi_{100}(\vec{x}^{(2)})) \chi^a \\ \psi_{nlmm_s}^{(-)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_{100}(\vec{x}^{(1)}) \varphi_{nlm}(\vec{x}^{(2)}) - \varphi_{nlm}(\vec{x}^{(1)}) \varphi_{100}(\vec{x}^{(2)})) \chi_{1, m_s}^s. \end{aligned} \tag{12.19}$$

wobei  $\chi_{1, m_s}^s$  den symmetrischen Spin-Triplett-Zustand bezeichnet. Die Zeichen (+) und (−) entsprechen dem Gesamtspin  $S = 0$  und  $S = 1$ . Die Energiewerte  $E_n$  des ungestörten Hamiltonoperators sind, für  $n > 1$ , demnach  $4n^2$ -fach entartet.

Wir behandeln die **Störung**: Dazu bemerken wir zunächst, daß die durch (12.19) gegebenen Eigenfunktionen von  $\hat{H}_0$  zugleich Eigenfunktionen von  $\{\hat{L}^2, \hat{L}_3, \hat{S}^2, \hat{S}_3\}$  sind. Dabei ist  $\hat{L} = \hat{L}_{(1)} + \hat{L}_{(2)}$  der Gesamtdrehimpuls und  $\hat{S} = \hat{S}_{(1)} + \hat{S}_{(2)}$  der Gesamtspin. Die zugehörigen Quantenzahlen sind  $l, m, s, m_s$ . Diese vier Operatoren vertauschen aber offensichtlich auch mit  $\hat{H}_1$ . Die Säkulargleichung hat also die Form

$$\sum_{l,m,m_s} \left( \langle \psi_{nlm}^{(\pm)} | \hat{H}_1 | \psi_{nlmm_s}^{(\pm)} \rangle - \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta_{m_s m'_s} E^{(1)} \right) c_{lm m_s} = 0,$$

und wegen

$$\langle \psi_{nlm}^{(\pm)} | \hat{H}_1 | \psi_{nlmm_s}^{(\pm)} \rangle = \langle \psi_{nlmm_s}^{(\pm)} | \hat{H}_1 | \psi_{nlmm_s}^{(\pm)} \rangle \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta_{m_s m'_s}$$

ergibt sich

$$E_{nl,\pm}^{(1)} = \langle \psi_{nlmm_s}^{(\pm)} | \hat{H}_1 | \psi_{nlmm_s}^{(\pm)} \rangle.$$

Einsetzen der obigen Wellenfunktionen liefert, unter Verwendung der Symmetrie zwischen  $\vec{x}$  und  $\vec{y}$  in den auftretenden Ausdrücken:

$$\begin{aligned} E_{nl,\pm}^{(1)} &= \frac{1}{2} e^2 \int d^3x d^3y \frac{1}{|\vec{x} - \vec{y}|} \left\{ (\varphi_{100}^*(\vec{x}) \varphi_{nlm}^*(\vec{y}) \pm \varphi_{nlm}^*(\vec{x}) \varphi_{100}^*(\vec{y})) \right. \\ &\quad \left. \times (\varphi_{100}(\vec{x}) \varphi_{nlm}(\vec{y}) \pm \varphi_{nlm}(\vec{x}) \varphi_{100}(\vec{y})) \right\} \\ &= e^2 \int d^3x d^3y \frac{|\varphi_{100}(\vec{x})|^2 |\varphi_{nlm}(\vec{y})|^2}{|\vec{x} - \vec{y}|} \\ &\quad \pm e^2 \int d^3x d^3y \frac{\varphi_{100}^*(\vec{x}) \varphi_{100}(\vec{y}) \varphi_{nlm}^*(\vec{y}) \varphi_{nlm}(\vec{x})}{|\vec{x} - \vec{y}|} \\ &\equiv C_{nl} \pm A_{nl}. \end{aligned}$$

Die (normierten) Spinanteile fallen sofort heraus, denn  $\hat{H}_1$  ist spin-unabhängig. Die Beiträge  $C_{nl}$  heißen, aus offensichtlichen Gründen, **Coulombintegrale** und die  $A_{nl}$  **Austauschintegrale**. Für  $n = 1$  erhalten wir:

$$E_1^{(1)} = \langle \psi_1 | \hat{H}_1 | \psi_1 \rangle \equiv C_{10}.$$

### Bemerkungen 12.3

- i) Die Entartung der Energiewerte in 0-ter Näherung wird wieder teilweise aufgehoben. Für  $n = 2$  (16-fache Entartung) ergeben sich in 1. Näherung vier Terme:  $E_{2,0,+} \sim {}^1S$  (einfach),  $E_{2,0,-} \sim {}^3S$  (3-fach entartet),  $E_{2,1,+} \sim {}^1P$  (3-fach entartet) und  $E_{2,1,-} \sim {}^1P$  (9-fach entartet).
- ii) Sei  $E_B$  die Bindungsenergie des Grundzustandes (Differenz zwischen dem Grundzustand  $E_1$  und dem Beginn des kontinuierlichen Spektrums). Man zeigt, vgl. Hausaufgabe Nr. 24, daß in 1. Näherung

$$E_B \sim -\frac{m e^4}{2\hbar^2} \left( Z^2 - \frac{5}{4} Z \right)$$

gilt. Für Helium erhält man  $E_B \sim -54.12 eV$  in nullter und  $-20.3 eV$  in erster Näherung. Der experimentelle Wert beträgt  $E_{B,\text{exp}} = -24.46 eV$ .

### 12.2.3 Spin–Bahn–Kopplung und Feinstruktur

Das bisherige Modell für ein  $Z$ -Elektronen-Atom war

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^Z \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{(i)} - \frac{Z e^2}{r_i} \right\} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|}$$

und die einfachste Näherung war die Zentralfeldnäherung<sup>3</sup>

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^Z \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{(i)} + V(r_i) \right\}.$$

Dabei ist  $V(r_i)$  das effektive Potential für das  $i$ -te Elektron. Es berücksichtigt die Wechselwirkung mit dem Kern und mit den anderen  $(Z - 1)$  Elektronen. Die konkrete Gestalt von  $V(r_i)$  wird nach wie vor offen gelassen. Wir zerlegen den Hamiltonoperator folgendermaßen:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 + \hat{H}_2,$$

mit

$$\hat{H}_1 = \sum_{i=1}^Z \left\{ -\frac{Ze^2}{r_i} - V(r_i) \right\}, \quad \hat{H}_2 = \sum_{i < j}^Z \frac{e^2}{r_{ij}}.$$

D.h., der Operator  $\hat{H}_1 + \hat{H}_2$  beschreibt die Abweichung der exakten Atomstruktur vom Zentralfeldmodell. Wir zeigen nun, daß die Berücksichtigung des Elektronenspins zu weiteren Modifikationen führt, nämlich zum Effekt der **Spin-Bahn-Kopplung**. Wir legen den Hamiltonoperator hier auf der Basis der klassischen speziellen Relativitätstheorie nahe. Eine tiefere Begründung erfolgt im nächsten Kapitel.

Das Transformationsgesetz für das elektromagnetische Feld beim Übergang von einem Lorentzsystem  $K$  zu einem System  $K'$ , das sich bezüglich  $K$  mit der (konstanten) Geschwindigkeit  $\vec{v}$  bewegt, lautet<sup>4</sup>

$$\begin{aligned} \vec{B}'_{\parallel} &= \vec{B}_{\parallel}; & \vec{B}'_{\perp} &= \frac{\vec{B}_{\perp} - \frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{E}}{\sqrt{1 - \beta^2}} \\ \vec{E}'_{\parallel} &= \vec{E}_{\parallel}; & \vec{E}'_{\perp} &= \frac{\vec{E}_{\perp} + \frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{B}}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \end{aligned}$$

wobei  $\beta^2 = \vec{v}^2/c^2$  bedeutet. Bewegt sich also ein Elektron mit  $\vec{v}$  im Zentralfeld (statisches elektrisches Feld), beschrieben durch das Potential  $\frac{V(r)}{e}$ , so "sieht" das Elektron in seinem Ruhesystem  $K'$  ein Magnetfeld:

$$\vec{B}_{\text{Bahn}} (= \vec{B}'_{\perp}) = \frac{-\frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{E}}{\sqrt{1 - \beta^2}}.$$

Wir verwenden die Näherung  $\vec{B}_{\text{Bahn}} = \vec{E} \times \frac{\vec{v}}{c}$  und mit  $\vec{E}(\vec{x}) = -\frac{1}{e} \nabla_x V(r) = -\frac{1}{e} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \cdot \vec{x}$  erhalten wir

$$\vec{B}_{\text{Bahn}} = -\frac{1}{e} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \left( \vec{x} \times \frac{\vec{v}}{c} \right) = -\frac{1}{emc} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} (\vec{x} \times \vec{v}) = -\frac{1}{emc} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{L} \equiv -U(r) \vec{L}.$$

Das Magnetfeld, welches das Elektron sieht, ist proportional zu seinem Bahndrehimpuls. Andererseits ist mit dem Spin des Elektrons das magnetische Moment

$$\vec{\mu}_{\text{Spin}} = \frac{e}{mc} \vec{S}$$

verknüpft. Die klassische Maxwelltheorie liefert für die Energie eines magnetischen Momentes im Magnetfeld:

$$E \sim \vec{\mu}_{\text{Spin}} \cdot \vec{B}_{\text{Bahn}}.$$

Ein konkreter Zahlenfaktor kann hier nicht fixiert werden. Im Rahmen der relativistischen Theorie ergibt sich der Koeffizient  $-\frac{1}{2}$ . Wir setzen also an:

$$\hat{H}_3 = \sum_{i=1}^Z U(r_i) \vec{L}_i \cdot \vec{S}_i, \quad U(r) = \frac{1}{2em^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr}. \quad (12.20)$$

<sup>3</sup>vgl. mit Abschnitt 11.3

<sup>4</sup>im CGS-System

Dies ist der Hamiltonoperator der **Spin–Bahn–Kopplung**. Wir wollen nun diesen Term in unsere Betrachtungen einbeziehen. Ausgangspunkt ist  $\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^Z \hat{H}_0^{(i)}$  aus der Zentralfeldnäherung. Die 1–Teilchenzustände zu den  $(2(2l+1))$ –fach entarteten) Energieniveaus  $E_{\lambda_i} = E_{nl}^{(i)}$  werden mit  $|\lambda_i\rangle = |nlm m_s\rangle$  bezeichnet. Die Eigenzustände für  $\hat{H}_0$  sind dann Slater–Determinanten<sup>5</sup>, die wir hier einfach mit

$$|\{\lambda_i\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{Z!}} \sum_{\Pi \in S_Z} \epsilon(\Pi) |\lambda_1(\Pi(1))\rangle \cdots |\lambda_Z(\Pi(Z))\rangle$$

bezeichnen. Es gilt

$$\hat{H}_0 |\{\lambda_i\}\rangle = \sum_i E_{\lambda_i} |\{\lambda_i\}\rangle \equiv E_{\{\lambda_i\}} |\{\lambda_i\}\rangle,$$

d. h., der Energiewert der Konfiguration  $\{\lambda_i\}$  ist gegeben durch

$$E_{\{\lambda_i\}} = \sum_i E_{\lambda_i}.$$

Die **Entartung** einer gegebenen Konfiguration  $\{\lambda_i\}$  ist

$$d_{\{\lambda_i\}} = \binom{2(2l_1+1)}{N_1} \cdots \binom{2(2l_m+1)}{N_m}, \quad (12.21)$$

wobei  $N_i$  die Besetzungszahl des Niveaus  $(n_i, l_i)$  ist.

**Beweis:** Jede Konfiguration  $\{\lambda_i\}$  ist vollständig charakterisiert durch die Besetzungszahlen  $N_i$ , wobei

$$\sum_{i=1}^m N_i = Z$$

gilt. Zu einem 1–Teilchenniveau  $(n_i, l_i)$  gehören  $2(2l_i+1)$  orthogonale 1–Teilchenfunktionen. Bei einer Besetzung mit  $N_i$  Elektronen können aus diesen genau  $\binom{2(2l_i+1)}{N_i}$  linear unabhängige vollständig antisymmetrische  $N_i$ –Teilchenfunktionen gebildet werden. (Die Dimension des Raumes der vollständig antisymmetrischen  $p$ –Linearformen im  $r$ –dimensionalen Vektorraum ist  $\binom{r}{p}$ .) Da wir es mit einem Tensorprodukt von  $N_i$ –Teilchenräumen zu tun haben, müssen schließlich die Produkte aller dieser Dimensionen gebildet werden.

Wir bemerken, daß ein vollständig besetztes Orbital **keinen** Beitrag zur Entartung liefert.

**Beispiel:** Für den Grundzustand  $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$  des Kohlenstoffatoms erhalten wir:

$$d = \binom{2(2 \cdot 0 + 1)}{2} \binom{2(2 \cdot 0 + 1)}{2} \binom{2(2 \cdot 1 + 1)}{2} = 1 \cdot 1 \cdot \binom{6}{2} = 15.$$

Es gibt nun zwei einfach behandelbare Fälle:

i)

$$\langle \hat{H}_2 \rangle \gg \langle \hat{H}_3 \rangle,$$

d. h., die Coulombabstoßung ist sehr groß, verglichen mit der Spin–Bahn–Kopplung. Dies gilt für leichte und mittlere Elemente.

ii)

$$\langle \hat{H}_3 \rangle \gg \langle \hat{H}_2 \rangle.$$

Dies ist von Relevanz in der Kernphysik (Schalenmodell).

Wir befassen uns hier nur mit den ersten Fall, d. h., im weiteren ist die Spin–Bahn–Kopplung eine kleine Störung, die in 1. Näherung gegenüber  $\hat{H}_1 + \hat{H}_2$  vernachlässigt wird. Wir betrachten also zunächst

<sup>5</sup>siehe Abschnitt 11.2

$\hat{H}_0 + \hat{H}_1 + \hat{H}_2$  und fassen  $\hat{H}_1 + \hat{H}_2$  als kleine Störung auf. Prinzipiell hat man dafür die Säkulargleichung mit der Matrix

$$\langle E, \{\lambda_i\} | (\hat{H}_1 + \hat{H}_2) | E, \{\lambda'_i\} \rangle$$

auszuwerten. Der Entartungsgrad ist, selbst für einfache Beispiele, sehr hoch. Im Falle des Grundzustandes von Kohlenstoff hat man es z. B. mit einer  $15 \times 15$ -Matrix zu tun. Es ist also sinnvoll, zunächst eine geeignete Basis im Unterraum zum Eigenwert  $E$  zu wählen: Seien  $\hat{L}$  der Gesamtbahndrehimpuls und  $\hat{S}$  der Gesamtspin des Elektronensystems. Offenbar gilt  $[\hat{L}, \hat{H}_0 + \hat{H}_1] = 0$ . Aber wegen  $[\hat{L}_{(i)} + \hat{L}_{(j)}, f(r_{ij})] = 0$ , für eine beliebige Funktion  $f(r_{ij})$  von  $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ , folgt auch

$$[\hat{L}, \hat{H}_2] = 0.$$

Da vorerst  $\hat{H}_3$  nicht berücksichtigt wird, gilt außerdem

$$[\hat{H}, \hat{S}] = 0.$$

Wir wählen gemeinsame Eigenzustände

$$|E, \alpha, L, L_3, S, S_3\rangle$$

des Systems kommutierender Observabler ( $\hat{L}^2, \hat{L}_3, \hat{S}^2, \hat{S}_3, \hat{H}$ ). Dabei steht  $\alpha$  für restliche, eventuell auftretende Quantenzahlen, die eine weiterhin prinzipiell mögliche Entartung bezüglich  $(E, L, L_3, S, S_3)$  beschreiben. Das damit entstehende Rechenschema heißt LS- oder **Russel–Saunders–Kopplung**. Es gilt:

$$\begin{aligned} & \langle E, \alpha, L, L_3, S, S_3 | (\hat{H}_1 + \hat{H}_2) | E, \alpha', L', L'_3, S', S'_3 \rangle \\ &= \delta_{LL'} \delta_{L_3L'_3} \delta_{SS'} \delta_{S_3S'_3} \langle \alpha | (\hat{H}_1 + \hat{H}_2) | \alpha' \rangle, \end{aligned} \quad (12.22)$$

wobei  $\langle \alpha | (\hat{H}_1 + \hat{H}_2) | \alpha' \rangle$  ein reduziertes, im allgemeinen nicht diagonales Matrixelement bezeichnet.

Wir beschränken uns nun auf den praktisch wichtigen Fall, daß  $\langle \hat{H}_1 + \hat{H}_2 \rangle$  bei obiger Prozedur **diagonal** wird, d.h., der Entartungsparameter  $\alpha$  tritt nicht auf. Es soll auch keine zufällige Entartung, die sich für spezielle effektive Potentiale  $V(r_i)$  der Zentralfeldnäherung ergeben könnten, auftreten. Außerdem beschränken wir uns im weiteren auf den Fall von **2 Valenzelektronen**.

Sei eine Konfiguration  $\{\lambda_i\}$  von  $Z$  Elektronen gegeben, charakterisiert durch einen Satz von Schalen (die, wie oben bemerkt, keinen Beitrag zur Entartung liefern) und durch die Quantenzahlen  $(n_1, l_1)$  und  $(n_2, l_2)$  der Valenzelektronen. Der zu dieser Konfiguration gehörende Unterraum  $\mathcal{H}_{\{\lambda_i\}}$  wird aufgespannt durch Slater–Determinanten, die sich nur in den 1–Teilchen–Wellenfunktionen der Valenzelektronen unterscheiden. Er ist also vollständig durch den Satz  $(m_1, m_{s1}, m_2, m_{s2})$  von Quantenzahlen der Valenzelektronen charakterisiert. Wir schreiben für diese Zustände

$$\{ \{ \lambda_i \}, m_1, m_{s1}, m_2, m_{s2} \} . \quad (12.23)$$

Es ist klar, daß in der vorliegenden Näherung Gesamtbahndrehimpuls und Gesamtspin einer vollen Schale jeweils Null ist. Folglich reduziert sich die Addition der Drehimpulse auf die Addition dieser Größen für die zwei Valenzelektronen:

$$\begin{aligned} \hat{L}_3 | \{ \lambda_i \}, m_1, m_{s1}, m_2, m_{s2} \rangle &= (m_1 + m_2) \hbar | \{ \lambda_i \}, m_1, m_{s1}, m_2, m_{s2} \rangle \\ \hat{S}_3 | \{ \lambda_i \}, m_1, m_{s1}, m_2, m_{s2} \rangle &= (m_{s1} + m_{s2}) \hbar | \{ \lambda_i \}, m_1, m_{s1}, m_2, m_{s2} \rangle . \end{aligned}$$

Die Zustände (12.23) bilden eine Basis im Tensorprodukt

$$(D^{l_1} \otimes C^2) \otimes (D^{l_2} \otimes C^2) . \quad (12.24)$$

Der Übergang zur Basis  $|\{\lambda_i\}, L, L_3, S, S_3\rangle$  bedeutet eine Ausreduktion dieses Tensorprodukts nach irreduziblen Komponenten bezüglich  $(L, S)$ :

$$\begin{aligned} (D^{l_1} \otimes \mathbb{C}^2) \otimes (D^{l_2} \otimes \mathbb{C}^2) &= (D^{l_1} \otimes D^{l_2}) \otimes (\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2) \\ &= \bigoplus_{L=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} D^L \otimes \left\{ (\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2)_+ \oplus (\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2)_- \right\}. \end{aligned} \quad (12.25)$$

Dabei bezeichnet  $+$  den Spin-1- und  $-$  den Spin-0-Anteil in der Zerlegung von  $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ . Man hat nun zwei Fälle zu betrachten:

**Fall 1:** Sei  $(n_1, l_1) \neq (n_2, l_2)$ . Dann hat  $\mathcal{H}_{\{\lambda_i\}}$  nach (12.21) die Dimension

$$d = \binom{2(2l_1+1)}{1} \binom{2(2l_2+1)}{1} = 4(2l_1+1)(2l_2+1)$$

und (12.25) liefert die Zerlegung dieses Raumes in irreduzible Komponenten. Als Beispiel betrachten wir Kohlenstoff im angeregten Zustand  $(1s)^2(2s)^2(2p)^1(np)^1$ ;  $n > 2$ :

$$\begin{aligned} (D^1 \otimes \mathbb{C}^2) \otimes (D^1 \otimes \mathbb{C}^2) &= (D^0 \oplus D^1 \oplus D^2) \otimes (D_+ \oplus D_-) \\ &= (D^0 \otimes D_+) \oplus (D^0 \otimes D_-) \oplus (D^1 \otimes D_+) \oplus (D^1 \otimes D_-) \oplus (D^2 \otimes D_+) \oplus (D^2 \otimes D_-) \\ &\equiv \quad {}^3S \quad \oplus \quad {}^1S \quad \oplus \quad {}^3P \quad \oplus \quad {}^1P \quad \oplus \quad {}^3D \quad \oplus \quad {}^1D. \end{aligned}$$

Dabei wurde die Standardbezeichnung  ${}^{2S+1}L$ , mit  $L = S, P, D, F, \dots$  aus der Spektroskopie verwendet. Ein Vergleich der Dimensionen liefert einerseits, aus der allgemeinen Formel für die Entartung,

$$d = 4(2 \cdot 1 + 1)(2 \cdot 1 + 1) = 36$$

und, andererseits, durch Aufsummieren der Dimensionen der irreduziblen Komponenten:

$$3 + 1 + 9 + 3 + 15 + 5 = 36.$$

Der Energieterm  $E$  der Konfiguration  $\{\lambda_i\}$  spaltet also durch die Störung  $\hat{H}_1 + \hat{H}_2$  in 6 Terme auf. Um deren relative Lage zu bestimmen, hat man die entsprechenden Matrixelemente zu berechnen (und mit dem Experiment zu vergleichen). Das Resultat ist in Abb. 12.3 skizziert.

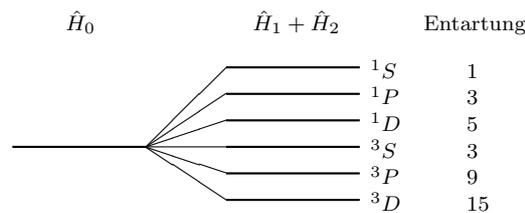


Abbildung 12.3: Die Termaufspaltung von angeregtem Kohlenstoff  $1s^2 2s^2 2p^1 np^1$ ,  $n > 2$ , durch die Störung  $\hat{H}_1 + \hat{H}_2$

Für die Reihenfolge der Terme gilt die **Hundsche Regel**: Die niedrigste Energie liegt für höchstes  $S$  vor. Bei gleichen  $S$  erhält man die niedrigste Energie für das höchste  $L$ .

**Fall 2:** Seien  $n_1 = n_2$  und  $l_1 = l_2$ . Dann ist die Entartung:

$$d_{\{\lambda_i\}} = \binom{2(2l_1+1)}{2} = (2l_1+1)(4l_1+1).$$

Wegen des Pauli-Prinzips hat man hier die Nebenbedingungen  $(m_1, m_{s1}) \neq (m_2, m_{s2})$  und es muß gelten:

$$|\{\lambda_i\}, m_1, m_{s1}, m_2, m_{s2}\rangle = -|\{\lambda_i\}, m_2, m_{s2}, m_1, m_{s1}\rangle. \quad (12.26)$$

Man kann zeigen, daß dann

$$\langle \{\lambda_i\}, L, L_3, S, S_3 | \{\lambda_i\}, L, L_3, S, S_3 \rangle = N^2 (1 + (-1)^{L+S}),$$

gilt, wobei  $N$  eine Normierungskonstante ist. Daraus folgt  $L + S = 2k$ . D.h.: entweder ist die Ortswellenfunktion symmetrisch und die Spinwellenfunktion antisymmetrisch ( $L$  gerade und  $S$  gerade, also  $S = 0$ ) oder umgekehrt ( $L$  ungerade und  $S$  ungerade, also  $S = 1$ ). Als Beispiel betrachten wir Kohlenstoff im Grundzustand  $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$ : Dann ist die Entartung  $d = 15$  und da  $n_1 = n_2$  und  $l_1 = l_2$  gilt, muß  $L + S = 2k$  erfüllt sein. Deswegen überleben in (12.25) nur

$${}^1S \oplus {}^3P \oplus {}^1D.$$

Abzählen der Dimensionen liefert  $1 + 9 + 5 = 15$ . Damit wird  ${}^3P$  der neue Grundzustand und wir haben die in Abbildung 12.4 gezeigte Termaufspaltung.

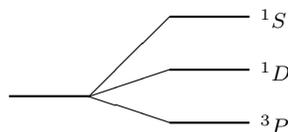


Abbildung 12.4: Die Termaufspaltung des Kohlenstoff-Grundzustandes

Schließlich wollen wir die **Spin-Bahn-Kopplung**, also

$$\hat{H}_3 = \sum_{i=1}^Z U(r_i) \hat{L}_{(i)} \cdot \hat{S}_{(i)}$$

in die Betrachtungen einbeziehen. Dann sind  $|\{\lambda_i\}, L, L_3, S, S_3\rangle$  die bekannten Funktionen der nullten Näherung und wir haben die folgende Säkulargleichung:

$$\det \left( \langle \{\lambda_i\}, L, L_3, S, S_3 | \hat{H}_3 | \{\lambda_i\}, L, L_3, S, S_3 \rangle - \delta_{L_3 L_3} \delta_{S_3 S_3} E^{(1)} \right) = 0. \quad (12.27)$$

Da  $\hat{L}$ ,  $\hat{S}$ , genauso wie die einzelnen  $\hat{L}_{(i)}$  und  $\hat{S}_{(i)}$ , allesamt Vektoroperatoren sind, lassen sich die Matrixelemente von  $\hat{L}_{(i)}$  und  $\hat{S}_{(i)}$  unter Verwendung des Wigner-Eckart-Theorems, bis auf eine von  $L_3, S_3$  und  $i$  unabhängige Konstante, durch die Matrixelemente von  $\hat{L}$  und  $\hat{S}$  ausdrücken. Damit erhält man

$$\langle \{\lambda_i\}, L, L_3, S, S_3 | \hat{H}_3 | \{\lambda_i\}, L, L_3, S, S_3 \rangle = A \langle \{\lambda_i\}, L, L_3, S, S_3 | \hat{L} \cdot \hat{S} | \{\lambda_i\}, L, L_3, S, S_3 \rangle, \quad (12.28)$$

wobei  $A$  nicht von  $L_3, S_3$  und  $i$  abhängt. Nun bemerken wir, daß  $\hat{H}_3$  bzw.  $\hat{L} \cdot \hat{S}$  weder mit  $\hat{L}$  noch mit  $\hat{S}$  kommutiert. Diese Operatoren kommutieren aber mit dem Gesamtdrehimpuls  $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ :

$$[\hat{H}_3, \hat{J}] = 0 = [\hat{L} \cdot \hat{S}, \hat{J}].$$

Wir empfehlen dem Leser, dies zu beweisen.

Es ist also sehr nützlich, von der Basis  $\{|\{\lambda_i\}, L, L_3, S, S_3\rangle\}$  zur Basis  $|\{\lambda_i\}, L, S, J, J_3\rangle$  überzugehen. Dazu zerlegen wir für jedes Paar  $(L, S)$  den durch die Vektoren  $\{|\{\lambda_i\}, L, L_3, S, S_3\rangle\}$  aufgespannten  $((2L+1) \cdot (2S+1))$ -dimensionalen Darstellungsraum  $D^L \otimes D^S$  in seine irreduziblen Komponenten bezüglich  $\hat{J}$  nach der bekannten Regel:

$$D^L \otimes D^S = \bigoplus_{J=|L-S|}^{L+S} D^J.$$

In der neuen Basis gilt aufgrund der Invarianz von  $\hat{H}_3$  unter Drehungen erzeugt durch  $\hat{J}$ :

$$\langle \{\lambda_i\}, L, S, J, J_3 | \hat{H}_3 | \{\lambda_i\}, L, S, J, J_3 \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{J_3 J_3'} E^{(1)}(\{\lambda_i\}, {}^{2S+1}L, J).$$

Um die Aufspaltung des Eigenwertes  $E^{(0)}(\{\lambda_i\}, {}^{2S+1}L)$  der nullten Näherung zu berechnen, sind nun die Matrixelemente von  $\hat{H}_3$  in der Basis  $|\{\lambda_i\}, L, S, J, J_3\rangle$  auszuwerten. Unter Verwendung von (12.28) erhalten wir:

$$\begin{aligned} \langle \{\lambda_i\}, L, S, J, J_3 | \hat{H}_3 | \{\lambda_i\}, L, S, J, J_3 \rangle &= A \langle \{\lambda_i\}, L, S, J, J_3 | \hat{L} \cdot \hat{S} | \{\lambda_i\}, L, S, J, J_3 \rangle \\ &= \frac{A}{2} \langle \{\lambda_i\}, L, S, J, J_3 | (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) | \{\lambda_i\}, L, S, J, J_3 \rangle, \end{aligned}$$

also

$$\langle \{\lambda_i\}, L, S, J, J_3 | \hat{H}_3 | \{\lambda_i\}, L, S, J, J_3 \rangle = \frac{A}{2} \hbar^2 (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)). \quad (12.29)$$

Für  $S = 0$  ist  $J = L$  und damit  $\langle \hat{H}_3 \rangle = 0$ . In diesem Falle haben wir keine Term-aufspaltung. Ist  $L, S > 0$ , dann ergeben sich mehrere Terme, die durch  $J$  charakterisiert sind und die alle  $(2J+1)$ -fach entartet sind, denn  $J = |L-S|, \dots, L+S$ .

**Beispiel:** Für den Grundzustand  $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$  des Kohlenstoffatoms erhalten wir für  ${}^1S$  und  ${}^1D$  offensichtlich keine Aufspaltung, für  ${}^3P$  dagegen eine Aufspaltung in drei Linien  $D^0 + D^1 + D^2$ , die einfach, 3-fach bzw. 5-fach entartet sind, siehe Abbildung 12.5.

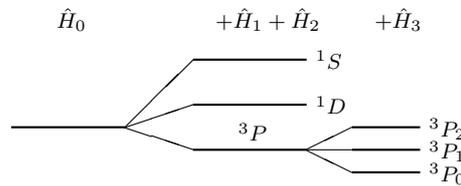


Abbildung 12.5: Feinstruktur des Kohlenstoff-Grundzustandes

#### Bemerkungen 12.4

- i)  $\hat{H}_3$  ist nur ein Anteil, der relativistische Effekte beschreibt, siehe nächstes Kapitel.
- ii) Die Berücksichtigung der Kopplung des magnetischen Moments des Kerns an den Elektronendrehimpuls liefert eine weitere Aufspaltung, die **Hyperfeinstruktur**.

## 12.3 Atome im statischen äußeren Feld

### 12.3.1 Zeeman- und Paschen-Back-Effekt

Sei  $\vec{B} = (0, 0, B)$  ein homogenes, äußeres (d.h.: nicht quantisiertes) Magnetfeld in  $z$ -Richtung. Dann ergibt sich, mit der gleichen Begründung wie für  $\hat{H}_3$ , ein weiterer Term:

$$\hat{H}_4 = -\mu_B (\hat{L} + 2\hat{S}) \cdot \vec{B} = -\mu_B B (\hat{J}_3 + \hat{S}_3), \quad (12.30)$$

mit

$$\mu_B = -\frac{e\hbar}{2mc}.$$

Wir betrachten zwei Fälle:

**Fall 1:** Sei

$$\langle \hat{H}_4 \rangle \ll \langle \hat{H}_3 \rangle \ll \langle \hat{H}_1 + \hat{H}_2 \rangle.$$

Dann gehen wir vom LS-Kopplungsschema aus und betrachten  $\langle \hat{H}_4 \rangle$  als kleine Störung der Feinstruktur. Damit ist das folgende Matrixelement auszuwerten:

$$\langle \{\lambda_i\}, L, S, J, J_3 | \hat{H}_4 | \{\lambda_i\}, L, S, J, J_3 \rangle \quad (12.31)$$

Natürlich gilt  $[\hat{H}_4, \hat{J}_3] = 0$ , d.h., obiges Matrixelement ist diagonal. Sei  $E_0 = E(\{\lambda_i\}, {}^{2S+1}L, J)$  ein ungestörtes Feinstrukturniveau und seien, wie oben,  $\{|\{\lambda_i\}, L, S, J, J_3\rangle\}$  die zugehörigen Eigenvektoren. Sind die Quantenzahlen  $\{\lambda_i\}, L, S$  fixiert, so schreiben wir für diese Eigenvektoren einfach  $|J, J_3\rangle$ . Das Niveau  $E(\{\lambda_i\}, {}^{2S+1}L, J)$  ist  $(2J+1)$ -fach entartet. Da  $\hat{H}_4$  explizit von  $\hat{J}_3$  abhängt, ist eine Aufhebung dieser Entartung – also eine weitere Term-aufspaltung – zu erwarten.

Wir berechnen die Matrixelemente von  $\hat{H}_4$ . Für den Summanden proportional zu  $J_3$  ist dies trivial. Es ist also das Matrixelement  $\langle J, J_3 | \hat{S}_3 | J, J_3 \rangle$  zu analysieren. Dazu bilden wir den mit dem Vektoroperator  $\hat{S}$  assoziierten Tensoroperator  $\hat{S}_q^1$ ,

$$\hat{S}_{\pm 1}^1 = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{S}_1 \pm i\hat{S}_2), \quad \hat{S}_0^1 = \hat{S}_3.$$

Analog bilden wir für  $\hat{J}$  den Tensoroperator  $J_q^1$ . Aus dem Wigner-Eckart-Theorem folgt

$$\langle J, J_3 | \hat{S}_q^1 | J, J_3 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2J+1}} \langle J || \hat{S}^1 || J \rangle \langle 1, q, J, J_3 | J, J_3 \rangle,$$

wobei  $\langle J || \hat{S}^1 || J \rangle$  nicht von  $J_3, J_3'$  und  $q$  abhängt. Für jedes fixierte  $J$  im Unterraum von  $E_0$  gilt also:

$$\langle J, J_3 | \hat{S}_q^1 | J, J_3 \rangle = c_1 \langle J, J_3 | 1, q, J, J_3 \rangle, \quad \langle J, J_3 | \hat{J}_q^1 | J, J_3 \rangle = c_2 \langle J, J_3 | 1, q, J, J_3 \rangle$$

und damit

$$\langle J, J_3 | \hat{S} | J, J_3 \rangle = c \langle J, J_3 | \hat{J} | J, J_3 \rangle, \quad (12.32)$$

mit einem von  $J_3$  und  $J_3'$  unabhängigen  $c$ . Weiter gilt:

$$\begin{aligned} \langle J, J_3 | \hat{S} \cdot \hat{J} | J, J_3 \rangle &= \sum_{i=1}^3 \langle J, J_3 | \hat{S}_i \cdot \hat{J}_i | J, J_3 \rangle \\ &= \sum_{i=1}^3 \sum_{J_3''=-J}^J \langle J, J_3 | \hat{S}_i | J, J_3'' \rangle \langle J, J_3'' | \hat{J}_i | J, J_3 \rangle \\ &= c \sum_{i=1}^3 \sum_{J_3''=-J}^J \langle J, J_3 | \hat{J}_i | J, J_3'' \rangle \langle J, J_3'' | \hat{J}_i | J, J_3 \rangle \\ &= c \langle J, J_3 | \hat{J}^2 | J, J_3 \rangle = c \hbar^2 J(J+1) \delta_{J_3, J_3}. \end{aligned}$$

Daraus ist  $c$  berechenbar:

$$c = \frac{1}{\hbar^2 J(J+1)} \langle J, J_3 | \hat{S} \cdot \hat{J} | J, J_3 \rangle. \quad (12.33)$$

Einsetzen in (12.32) liefert:

$$\langle J, J_3 | \hat{S} | J, J_3 \rangle = \langle J, J_3 | \hat{J} | J, J_3 \rangle \frac{\langle J, J_3 | \hat{S} \cdot \hat{J} | J, J_3 \rangle}{\hbar^2 J(J+1)}.$$

Nun verwenden wir  $\hat{S} \cdot \hat{J} = \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 + \hat{S}^2)$  und erhalten:

$$\langle J, J_3 | \hat{S} | J, J_3 \rangle = \langle J, J_3 | \hat{J} | J, J_3 \rangle \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}.$$

Dies setzen wir in (12.31) ein,

$$\langle J, J_3 | \hat{H}_4 | J, J_3 \rangle = -\mu_B B \hbar J_3 \left( 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} \right) \delta_{J_3 J_3},$$

also

$$\langle \{\lambda_i\}, L, S, J, J_3 | \hat{H}_4 | \{\lambda_i\}, L, S, J, J_3 \rangle = -g \mu_B B \hbar J_3 \delta_{J_3 J_3}. \quad (12.34)$$

Der Koeffizient

$$g = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} \quad (12.35)$$

heißt **Landé-Faktor**. Wir erhalten in 1. Näherung:

$$E = E_0 - g \mu_B B J_3 \hbar, \quad J_3 = -J, \dots, J,$$

d.h. die Störung durch das angelegte Magnetfeld hebt die Entartung vollständig auf. Dies ist der **Zeeman-Effekt**. Bei der Diskussion von Emissionsspektren unterscheidet man zwischen **normalem** und **anomalem Zeeman-Effekt**. Aufgrund von Auswahlregeln wird die Zahl der Linienaufspaltung reduziert und für relativ große Magnetfelder fallen zusätzlich gewisse Spektrallinien praktisch zusammen, was zu einer weiteren Reduktion der Aufspaltung führt, siehe [Galindo/Pascual, Teil II, Abschnitt 12.8].

**Fall 2:** Sei  $\langle \hat{H}_4 \rangle \gg \langle \hat{H}_3 \rangle$ . Dieser Fall tritt für starke Magnetfelder ein. Dann ist die Spin-Bahn-Kopplung eine kleine Störung und man hat von Eigenfunktionen von  $\hat{H}_0 + \hat{H}_1 + \hat{H}_2$  auszugehen. Dann gilt

$$\langle \{\lambda_i\}, L, S, L_3, S_3 | \hat{L}_3 + 2\hat{S}_3 | \{\lambda_i\}, L, S, L_3, S_3 \rangle = L_3 + 2S_3$$

und wir erhalten

$$E_{L, L_3; S, S_3} = E_{LS} - \mu_B B (L_3 + 2S_3) \hbar. \quad (12.36)$$

Dies ist der **Paschen-Back-Effekt**. Da  $L_3 = -L, \dots, +L$  und  $S_3 = -S, \dots, S$ , sind beim Paschen-Back-Effekt für  $L \neq 0$  und  $S \neq 0$  einige Niveaus entartet. Dies hängt damit zusammen, daß es nichttriviale Lösungen der Gleichung  $L_3 + 2S_3 = L_3 + 2S_3$  gibt.

### Bemerkungen 12.5

Bei unserer Diskussion wurde der sogenannte diamagnetische Term

$$\hat{H}_5 = \frac{e^2}{8m c^2} \sum_{(i)} \left\{ \vec{B}^2 \vec{x}_{(i)}^2 - (\vec{B} \cdot \vec{x}_{(i)})^2 \right\}$$

vernachlässigt. Unter Laborbedingungen ( $|\vec{x}| \sim 10^{-8} \text{ cm}$  und  $B \leq 10^6 \text{ G}$ ) ist dies gerechtfertigt. In Neutronensternen hat man dagegen Magnetfelder der Größenordnung  $B \sim 10^{12}$ . Dann wird dieser Term relevant.

### 12.3.2 Stark-Effekt

Sei  $\vec{E}$  ein homogenes, statisches, äußeres elektrisches Feld. Dann enthält der Hamiltonoperator einen Term

$$\hat{H}_5 = -e \sum_i \hat{x}^{(i)} \cdot \vec{E} = -\hat{\vec{D}} \cdot \vec{E}, \quad (12.37)$$

wobei  $\hat{\vec{D}} := e \sum_i \hat{x}^{(i)}$  der **Dipoloperator** ist. Wir diskutieren die Symmetrien dieses Terms:

1.  $\hat{H}_5$  ist invariant unter Spiegelungen, die den Vektor  $\vec{E}$  invariant lassen. Legt man daher die  $z$ -Koordinate in Richtung von  $\vec{E}$ , dann können die Energieniveaus nur von  $|J_3|$  abhängen.
2.  $\hat{H}_5$  ist gerade unter Zeitumkehr  $\hat{\Theta}$ . Da  $\hat{H}_0, \dots, \hat{H}_3$  ebenfalls gerade unter  $\hat{\Theta}$  sind, ist  $\hat{H}$  bei Abwesenheit eines Magnetfeldes gerade unter  $\hat{\Theta}$  und es liegt für Systeme mit halbzahligem Gesamtspin **Kramers-Entartung** vor.
3.  $\hat{H}_5$  ist ungerade unter der Paritätstransformation  $\hat{P}$ . Damit verschwinden Matrixelemente von  $\hat{H}_5$  zwischen Zuständen gleicher Parität. In 1. Ordnung der Störungstheorie ergibt sich daher nur dann eine Korrektur, wenn Energieeigenzustände mit **verschiedener** Parität entartet sind. Dies ist nur beim Wasserstoff-Atom der Fall, da hier die Energie nur von der Hauptquantenzahl  $n$  abhängt. Da die Korrektur in 1. Ordnung linear in  $|\vec{E}|$  ist, spricht man in diesem Fall vom **linearen** Stark-Effekt. Bei allen anderen Atomen ergibt sich erst in 2. Ordnung der Störungstheorie eine Korrektur. Da diese quadratisch in  $|\vec{E}|$  ist, spricht man dann vom **quadratischen** Stark-Effekt. Obwohl hier die Entartung in 1. Ordnung nicht aufgehoben wird, folgt aus der Dipol-Auswahlregel  $L'_3 = L_3$ , daß die Korrektur in 2. Ordnung trotzdem durch die Formel (12.18) gegeben ist:

$$E^{(2)} = e^2 E^2 \sum_{k \neq n} \frac{\langle \alpha; J, J_3 | \sum_i \hat{x}_3^{(i)} | k \rangle \langle k | \sum_i \hat{x}_3^{(i)} | \alpha, J, J_3 \rangle}{E_n - E_k}.$$

Aus dem Wigner-Eckart-Theorem ergibt sich

$$E^{(2)} = e^2 E^2 \left\{ \frac{1}{3} A_J \cdot J(J+1) + B_J \left( J_3^2 - \frac{1}{3} J(J+1) \right) \right\},$$

wobei  $A_J$  und  $B_J$  noch zu bestimmende Konstanten sind. Einzelheiten zum Stark-Effekt werden im Seminar besprochen.

## 12.4 Variationsmethoden

### 12.4.1 Die Variationsmethode von Ritz

Für den Fall, daß der Hamiltonoperator der Gestalt  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$  ist, wobei das Problem für  $\hat{H}_0$  streng lösbar ist und  $\hat{H}_1$  nicht wirklich als kleine Störung aufgefaßt werden kann, sind Variationsmethoden effektiver als die Störungstheorie.

Den Erwartungswert  $\langle \psi | \hat{A} \psi \rangle$  einer Observablen kann man als Funktional von  $\psi$  auffassen und man kann nach stationären Punkten dieses Funktionals suchen. Sei also, allgemein,  $Q[\psi]$  ein Funktional auf dem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  des Systems. Dann werden stationäre Punkte durch die Bedingung

$$\delta Q[\psi] = 0 \quad (12.38)$$

charakterisiert. Für praktische Zwecke geht man nun zu einem sinnvollen (in der Regel endlich-dimensionalen) Unterraum  $\mathcal{H}'$  über und löst das Variationsproblem dort, d.h. man betrachtet Wellenfunktionen (Versuchsfunktionen)  $\phi(a, b, \dots)$ , die etwa von einem endlichen Satz  $(a, b, \dots)$  kontinuierlicher Parameter abhängen. Der Erfolg dieser Methode hängt von der geschickten Wahl der Versuchsfunktionen ab.

Wir betrachten im weiteren das stationäre Funktional  $\langle \psi | \hat{H} \psi \rangle$  eines selbstadjungierten Operators  $\hat{H}$ <sup>6</sup>.

<sup>6</sup>Wir schreiben  $\hat{H}$ , weil uns der Fall des Hamiltonoperators hauptsächlich interessiert

**Satz 12.1** Der Erwartungswert

$$E[\varphi] := \frac{\langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle}, \quad |\varphi\rangle \neq 0, \quad (12.39)$$

des selbstadjungierten Operators  $\hat{H}$  im Zustand  $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$ , aufgefaßt als Funktional von  $|\varphi\rangle$ , ist genau dann **stationär** im Punkt  $|\varphi\rangle = |\psi\rangle$ , wenn  $|\psi\rangle$  Eigenzustand von  $\hat{H}$  ist. Der zugehörige Eigenwert ist  $E[\psi]$ .

**Beweis:** Offensichtlich ist

$$\delta E[\psi] = 0$$

äquivalent zu

$$\langle \psi | \psi \rangle \delta E[\psi] = \delta \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle - E[\psi] \delta \langle \psi | \psi \rangle = 0,$$

und damit äquivalent zu

$$\langle \delta \psi | (\hat{H} - E[\psi]) | \psi \rangle + \langle \psi | (\hat{H} - E[\psi]) | \delta \psi \rangle = 0, \quad (12.40)$$

für alle  $|\delta \psi\rangle$ . Wir betrachten zusätzlich die Variation  $|\delta(i\psi)\rangle$ . Dies liefert

$$-i \langle \delta \psi | (\hat{H} - E[\psi]) | \psi \rangle + i \langle \psi | (\hat{H} - E[\psi]) | \delta \psi \rangle = 0, \quad (12.41)$$

Addition von (12.40) und der mit  $i$  multiplizierten Gleichung (12.41) liefert  $\langle \delta \psi | (\hat{H} - E[\psi]) | \psi \rangle = 0$ . Damit ist  $\delta E[\psi] = 0$  in der Tat äquivalent zu  $\hat{H}|\psi\rangle = E[\psi]|\psi\rangle$ .  $\square$

**Satz 12.2** Das Funktional  $E[\psi]$  nimmt im Grundzustand  $|\psi_0\rangle$  sein absolutes Minimum an:

$$E_0 = \inf_{|\psi\rangle \neq 0} E[\psi]. \quad (12.42)$$

**Beweis:** Der Einfachheit wegen unterstellen wir, daß  $\hat{H}$  ein rein diskretes Spektrum hat. Seien  $E_0, E_1, \dots, E_i, \dots$  die Eigenwerte in wachsender Ordnung (mit Entartung  $g_i$  und entsprechender Mehrfachzählung) und seien  $|\psi_{i\alpha}\rangle$  die zugehörigen orthonormierten Eigenvektoren,  $\alpha = 1, \dots, g_i$ . Dann läßt sich jeder Zustand  $|\psi\rangle$  zerlegen,

$$|\psi\rangle = \sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} c_{i\alpha} |\psi_{i\alpha}\rangle,$$

und wir erhalten:

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} E_i |c_{i\alpha}|^2 \geq E_0 \sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} |c_{i\alpha}|^2 \equiv E_0 \langle \psi | \psi \rangle.$$

Dies liefert

$$E_0 \leq \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad (12.43)$$

und für  $|\psi\rangle$  aus dem Unterraum zum Eigenwert  $E_0$  erhält man Gleichheit.  $\square$

Wie bereits oben angedeutet, startet man bei konkreten Aufgaben mit einer Familie  $\psi(\lambda_1, \lambda_2, \dots)$ , (parametrisiert durch stetige Parameter  $\lambda_i$ ) von Versuchsfunktionen und berechnet  $\langle \psi(\lambda_1, \dots) | \hat{H} | \psi(\lambda_1, \dots) \rangle$ . Es gilt

$$E_0 \leq \frac{\langle \psi(\lambda_1, \dots) | \hat{H} | \psi(\lambda_1, \dots) \rangle}{\langle \psi(\lambda_1, \dots) | \psi(\lambda_1, \dots) \rangle} \equiv E(\lambda_1, \dots).$$

Das Minimum von  $E(\lambda_1, \dots)$  liefert die beste Näherung für  $E_0$  im Rahmen der gewählten Familie und ist **obere Schranke** für den Grundzustand.

**Bemerkungen 12.6**

i) Sei  $|\psi\rangle$  normiert und  $\hat{P}_{\mathcal{H}_0}$  der Projektor auf den Eigenraum  $\mathcal{H}_0$  zum Grundzustand  $E_0$ . Wir zerlegen

$$|\psi\rangle = \hat{P}_{\mathcal{H}_0} |\psi\rangle + \varepsilon |\varphi\rangle,$$

mit  $|\varphi\rangle \perp \mathcal{H}_0$  und  $\varepsilon \in \mathbb{C}$ . Sei  $|\varphi\rangle$  ebenfalls normiert. Dann gilt:

$$\|\psi\|^2 = 1 = \|\hat{P}_{\mathcal{H}_0} \psi\|^2 + |\varepsilon|^2$$

und damit:

$$\begin{aligned} E_0 &\leq \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{P}_{\mathcal{H}_0} \hat{H} \hat{P}_{\mathcal{H}_0} | \psi \rangle + |\varepsilon|^2 \langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle \\ &= E_0 \|\hat{P}_{\mathcal{H}_0} \psi\|^2 + |\varepsilon|^2 \langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle = E_0(1 - |\varepsilon|^2) + |\varepsilon|^2 \langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle, \end{aligned}$$

also

$$E_0 \leq \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = E_0 + |\varepsilon|^2 \left( \langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle - E_0 \right).$$

Unterscheidet sich der Zustand  $|\psi\rangle$  um einen Term der Ordnung  $\varepsilon$  von einem Zustand in  $\mathcal{H}_0$ , dann unterscheidet sich der genäherte Energiewert nur um einen Term der Ordnung  $|\varepsilon|^2$  von  $E_0$ .

ii) Ist das Spektrum von  $\hat{H}$  diskret, so läßt sich die Rechnung im Beweis von Satz 12.2 auf höhere Niveaus ausdehnen, vorausgesetzt, der Eigenraum  $\mathcal{H}_0$  zu  $E_0$  ist bekannt: Wir wählen einen Zustand  $|\psi\rangle \perp \mathcal{H}_0$ , dann ist in obiger Rechnung  $c_{0\alpha} = 0$  und wir erhalten

$$E_1 \leq \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad \psi \perp \mathcal{H}_0.$$

Gleichheit ergibt sich, falls  $|\psi\rangle$  ein Eigenzustand zum Eigenwert  $E_1$  ist, d.h.:

$$E_1 = \inf_{|\psi\rangle \perp \mathcal{H}_0} \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (12.44)$$

Dies kann man auf höhere angeregte Zustände zu Eigenwerten  $E_i$  fortsetzen, indem man  $|\psi\rangle$  orthogonal zur direkten Summe  $\mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_{i-1}$  der entsprechenden Eigenunterräume wählt.

iii) Die Variationsmethode liefert uns also obere Schranken. Man fragt sich, ob man auch untere Schranken finden kann. Eine untere Schranke wird von der **Temple-Ungleichung** geliefert: Der Einfachheit wegen nehmen wir wieder an,  $\hat{H}$  habe rein diskretes Spektrum. Seien  $E_0 = \inf \sigma(\hat{H})$  und  $E_1 = \inf \left\{ \sigma(\hat{H}) \setminus \{E_0\} \right\}$  der Grundzustand und der erste angeregte Zustand von  $\hat{H}$ . Offenbar gilt für jeden normierten Zustand  $\phi$ :

$$\langle \phi | \left( \hat{H} - E_0 \right) \left( \hat{H} - E_1 \right) | \phi \rangle \geq 0. \quad (12.45)$$

Zum Beweis wählen wir eine Basis  $\{|\psi_i\rangle\}$  von Eigenvektoren und berechnen:

$$\begin{aligned} \langle \phi | \left( \hat{H} - E_0 \right) \left( \hat{H} - E_1 \right) | \phi \rangle &= \sum_i \langle \phi | \left( \hat{H} - E_0 \right) | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \left( \hat{H} - E_1 \right) | \phi \rangle \\ &= \sum_i (E_i - E_0) \langle \phi | \psi_i \rangle (E_i - E_1) \langle \psi_i | \phi \rangle \\ &= \sum_i |\langle \phi | \psi_i \rangle|^2 (E_i - E_0)(E_i - E_1) \geq 0. \end{aligned}$$

Ausmultiplizieren von (12.45) liefert  $\langle \hat{H}^2 \rangle_\phi - (E_0 + E_1) \langle \hat{H} \rangle_\phi + E_0 E_1 \geq 0$ , also

$$\left( \Delta_\phi \hat{H} \right)^2 + \langle \hat{H} \rangle_\phi^2 - E_1 \langle \hat{H} \rangle_\phi - E_0 \left( \langle \hat{H} \rangle_\phi - E_1 \right) \geq 0.$$

Für jedes  $\phi$ , das die Ungleichung

$$\langle \hat{H} \rangle_\phi - E_1 < 0$$

erfüllt, folgt

$$\frac{(\Delta_\phi \hat{H})^2}{\langle \hat{H} \rangle_\phi - E_1} + \langle \hat{H} \rangle_\phi - E_0 \leq 0,$$

also

$$\langle \hat{H} \rangle_\phi - \frac{(\Delta_\phi \hat{H})^2}{E_1 - \langle \hat{H} \rangle_\phi} \leq E_0. \quad (12.46)$$

Findet man eine untere Schranke für  $E_1$ ,  $\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle < E_1$ , dann liefert die linke Seite von (12.46) eine untere Schranke für  $E_0$ .

### Beispiel: Das Heliumatom.

Wir schätzen den Grundzustand mit obiger Methode ab. In nullter Näherung hatten wir

$$\psi = \varphi_{100}(\vec{x}^{(1)}) \varphi_{100}(\vec{x}^{(2)}) \chi^a.$$

Die Spinwellenfunktion  $\chi^a$  wird nicht variiert und deshalb weggelassen. Die Ortswellenfunktion  $\varphi_{100}$  kennen wir exakt, damit ergibt sich

$$\psi(r_1, r_2) = (\pi a^3)^{-1} e^{-(r_1+r_2)/a}, \quad a = \frac{\hbar^2}{2m e^2}.$$

Dies legt die folgende, einfachste Wahl der (normierten) Versuchsfunktion nahe:

$$\psi(r_1, r_2; a) = (\pi a^3)^{-1} e^{-(r_1+r_2)/a}, \quad a \in \mathbb{R}.$$

Es ist der Erwartungswert  $E(a) = \langle \psi(a) | \hat{H} | \psi(a) \rangle$  zu berechnen: Wir haben

$$\langle \psi(a) | -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^{(1)} | \psi(a) \rangle = \langle \psi(a) | -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^{(2)} | \psi(a) \rangle = \frac{\hbar^2}{2m a^2}$$

und

$$\langle \psi(a) | -\frac{Z e^2}{r_1} | \psi(a) \rangle = \langle \psi(a) | -\frac{Z e^2}{r_2} | \psi(a) \rangle = -\frac{Z e^2}{a}.$$

Es bleibt also zu berechnen:

$$\langle \psi(a) | \frac{e^2}{r_{12}} | \psi(a) \rangle = \frac{e^2}{\pi^2 a^6} \int d^3 x_1 \int d^3 x_2 \frac{\varrho_1(\vec{x}_1) \varrho_2(\vec{x}_2)}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}, \quad \varrho_i = e^{-\frac{2r_i}{a}}.$$

Dieses Integral entspricht der statischen Energie zweier kugelförmiger Ladungsverteilungen mit den Ladungsdichten  $e \varrho_1(\vec{x}_1)$  und  $e \varrho_2(\vec{x}_2)$ . Die aus der Elektrostatik bekannte Lösung lautet:

$$\langle \psi(a) | \frac{e^2}{r_{12}} | \psi(a) \rangle = \frac{5 e^2}{8 a}.$$

Insgesamt erhalten wir:

$$E(a) = \langle \psi(a) | \hat{H} | \psi(a) \rangle = \frac{\hbar^2}{m a^2} - \frac{2 Z e^2}{a} + \frac{5 e^2}{8 a}.$$

$E$  hat einen stationären Punkt an der Stelle

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2} \frac{1}{Z - \frac{5}{16}},$$

und damit ergibt sich:

$$\begin{aligned} E(a_0) &= -\frac{m e^4}{\hbar^2} \left( Z - \frac{5}{16} \right)^2 \\ &= -\frac{m e^4}{\hbar^2} \left( Z^2 - \frac{5}{8} Z \right) - \frac{m e^4}{\hbar^2} \left( \frac{5}{16} \right)^2. \end{aligned}$$

Der erste Term ist identisch mit dem Resultat der Störungstheorie in 1. Ordnung, der Korrekturterm hat die Größenordnung  $\sim -2.64 eV$ . Für die Bindungsenergie erhält man  $E_B \sim -23 eV$ . Dieser Wert ist besser als der in 1. Ordnung der Störungstheorie erhaltene. Man kann natürlich versuchen, dieses Resultat weiter zu verbessern. Denkt man etwa daran, die abstoßende Coulombwechselwirkung zwischen den beiden Elektronen zu modellieren, so ist der folgende Ansatz plausibel:

$$\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2; a, b, c) = e^{-a(r_1+r_2)} (1 + b|\vec{x}_1 - \vec{x}_2| + c(r_1 - r_2)^2)$$

Damit erhält man  $E_B \sim -24,40 eV$ , ein Wert, der dem experimentellen Wert  $\sim -24,46 eV$  schon sehr nahe kommt.

### 12.4.2 Das Minimax-Prinzip

Wir besprechen, ohne alle Details zu behandeln, eine Methode zur Untersuchung von Spektraleigenschaften **von unten beschränkter, selbstadjungierter Operatoren**<sup>7</sup>.

Die Gleichung (12.44),

$$E_1 = \inf_{\substack{|\psi\rangle \perp \mathcal{H}_0 \\ \|\psi\|=1}} \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle,$$

hatten wir aufgeschrieben unter der Annahme, daß der Unterraum  $\mathcal{H}_0$  des Grundzustandes bekannt ist. Kennt man diesen nicht explizit, dann betrachtet man, für jedes  $\varphi \in \mathcal{H}$ , die folgende Größe:

$$E_1[\varphi] := \inf_{\substack{|\psi\rangle \perp \varphi \\ \|\psi\|=1}} \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle. \quad (12.47)$$

Dann gilt

$$E_1[\varphi] \leq E_1. \quad (12.48)$$

**Beweis:** Ist  $\varphi \in \mathcal{H}_0$ , dann gilt  $E_1[\varphi] = E_1$ . Sei  $\varphi$  beliebig. Dann zerlegen wir jedes (normierte)  $\psi \perp \varphi$  in

$$\psi = \alpha \psi_0 + \beta \psi_1,$$

mit  $\psi_0 \in \mathcal{H}_0$ ,  $\|\psi_0\| = 1$ , und  $\psi_1 \perp \mathcal{H}_0$ ,  $\|\psi_1\| = 1$ . Aus der Normierungsbedingung für  $\psi$  folgt

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1.$$

Nun gilt

$$E_1[\varphi] = \inf_{\substack{|\psi_1\rangle \perp \mathcal{H}_0, \|\psi_1\|=1 \\ \alpha, \beta, |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1}} \left\{ |\alpha|^2 E_0 + |\beta|^2 \langle \psi_1 | \hat{H} | \psi_1 \rangle \right\},$$

d.h.  $E_1[\varphi]$  ist eine konvexe Linearkombination von  $E_0$  und  $\langle \psi_1 | \hat{H} | \psi_1 \rangle$ , und damit

$$E_1[\varphi] \leq \inf_{\substack{|\psi_1\rangle \perp \mathcal{H}_0 \\ \|\psi_1\|=1}} \langle \psi_1 | \hat{H} | \psi_1 \rangle = E_1.$$

Damit erhalten wir

$$E_1 = \sup_{\varphi} \inf_{\substack{|\psi\rangle \perp \varphi \\ \|\psi\|=1}} \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle. \quad (12.49)$$

<sup>7</sup>siehe [Reed/Simon] Bd. IV, Abschnitt XIII.1

Dies ist das **Minimax-Prinzip** für den ersten angeregten Zustand.

Allgemeiner gilt für den  $n$ -ten Eigenwert, von unten entsprechend der Multiplizitäten gezählt,

$$E_n = \sup_{\varphi_1, \dots, \varphi_n \in \mathcal{H}} \inf_{\substack{\psi \in D(\hat{H}), \|\psi\|=1 \\ |\psi\rangle \perp \{\varphi_1, \dots, \varphi_n\}}} \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle. \quad (12.50)$$

### Bemerkungen 12.7

- i) Das Minimax-Prinzip ermöglicht einen Vergleich der Eigenwerte von Operatoren. Ist etwa  $\hat{H}_1$  eine positive Störung von  $\hat{H}_0$ , so gilt

$$\langle \psi | (\hat{H}_0 + \hat{H}_1) | \psi \rangle \geq \langle \psi | \hat{H}_0 | \psi \rangle$$

und das Minimax-Prinzip liefert sofort, daß der  $n$ -te Eigenwert von  $\hat{H}_0 + \hat{H}_1$  größer oder gleich dem  $n$ -ten Eigenwert von  $\hat{H}_0$  ist.

- ii) Das Minimax-Prinzip hilft bei der Bestimmung des Punktes, an dem das essentielle Spektrum von  $\hat{H}$  beginnt.  
 iii) Weiß man, daß das essentielle Spektrum der Form  $\sigma_{ess} = [a, \infty)$  ist und kann man zeigen, daß

$$\sup_{\varphi_1, \dots, \varphi_n} \inf_{\substack{|\psi\rangle \perp \{\varphi_1, \dots, \varphi_n\} \\ \|\psi\|=1}} \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle < a$$

gilt, so folgt die Existenz von mindestens  $n$  isolierten Eigenwerten.

Von besonderer Bedeutung ist das direkt aus dem Minimax-Prinzip folgende **Rayleigh-Ritz-Verfahren**. Mit diesem kann man die Lage der gebundenen Zustände eines von unten beschränkten, selbstadjungierten Operators mit großer Genauigkeit bestimmen. Man wählt einen  $n$ -dimensionalen Teilraum  $D_n \subset D(\hat{H})$  aus und bezeichnet mit

$$E_0(D_n) \leq E_1(D_n) \leq \dots \leq E_k(D_n) \leq \dots$$

die Eigenwerte der Matrix  $\hat{H}_{D_n} := \hat{P}_{D_n} \hat{H} \hat{P}_{D_n}$ , wobei  $\hat{P}_{D_n}$  den Orthoprojektor auf  $D_n$  bezeichnet. Dann gilt:

$$E_k \leq E_k(D_n). \quad (12.51)$$

Mit wachsenden  $n$  werden die  $E_k(D_n)$  fallen, damit erzielt man eine beliebig genaue Approximation.

**Beweis:** Aus dem Minimax-Prinzip für den endlichdimensionalen selbstadjungierten Operator  $\hat{H}_{D_n}$  folgt

$$\begin{aligned} E_k(\hat{H}_{D_n}) &= \sup_{\varphi_1, \dots, \varphi_k \in D_n} \inf_{\substack{\psi \in D_n, \|\psi\|=1 \\ |\psi\rangle \perp \{\varphi_1, \dots, \varphi_k\}}} \langle \psi | \hat{H}_{D_n} | \psi \rangle \\ &= \sup_{\varphi_1, \dots, \varphi_k \in \mathcal{H}} \inf_{\substack{\psi \in D_n, \|\psi\|=1 \\ |\psi\rangle \perp \{\hat{P}_{D_n} \varphi_1, \dots, \hat{P}_{D_n} \varphi_k\}}} \langle \psi | \hat{H}_{D_n} | \psi \rangle. \end{aligned}$$

Da  $\psi \in D_n$  ist, können wir  $\langle \psi | \hat{H}_{D_n} | \psi \rangle$  durch  $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$  ersetzen. Außerdem gilt  $\langle \psi | \hat{P}_{D_n} | \varphi_i \rangle = \langle \psi | \varphi_i \rangle$ , so daß wir

$$\begin{aligned} E_k(\hat{H}_{D_n}) &= \sup_{\varphi_1, \dots, \varphi_k \in \mathcal{H}} \inf_{\substack{\psi \in D_n, \|\psi\|=1 \\ |\psi\rangle \perp \{\varphi_1, \dots, \varphi_k\}}} \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \\ &\geq \sup_{\varphi_1, \dots, \varphi_k \in \mathcal{H}} \inf_{\substack{\psi \in D(\hat{H}), \|\psi\|=1 \\ |\psi\rangle \perp \{\varphi_1, \dots, \varphi_k\}}} \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \end{aligned}$$

erhalten. Aus dem Minimax-Prinzip für  $\hat{H}$ , siehe (12.50), folgt schließlich, daß die rechte Seite gleich  $E_k$  ist.

### 12.4.3 Die Hartree–Fock–Methode

Wir diskutieren ein Variationsverfahren zur Behandlung von  $Z$ -Elektronen-Atomen, welches auf der schon mehrfach diskutierten Vorstellung beruht, daß jedes der Elektronen neben dem Potential des Kerns ein effektives Potential, gebildet von den restlichen  $Z - 1$  Elektronen, spürt. Damit erhalten wir für jedes Teilchen eine 1-Teilchen-Schrödingergleichung, aber das Potential in dieser Gleichung hängt von den Wellenfunktionen der übrigen Elektronen ab und muß selbstkonsistent bestimmt werden. Deshalb heißt die Hartree–Fock–Methode auch Methode des **selbstkonsistenten Feldes**. Diese Methode findet auch Anwendung in der Molekül- und Festkörperphysik bzw., allgemeiner, bei der Behandlung von Systemen identischer Teilchen im äußeren Feld.

Wir betrachten ein Atom mit  $Z$  Elektronen:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^Z \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^{(i)} - \frac{Z e^2}{r_i} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|} \equiv \hat{H}_1 + \hat{H}_2,$$

mit folgender Struktur

$$\hat{H}_1 = \sum_i \hat{h}_i \quad \text{und} \quad \hat{H}_2 = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{\omega}_{ij}.$$

Als Versuchsfunktionen des Variationsverfahrens nehmen wir beliebige Slaterdeterminanten orthonormal 1-Teilchenzustände:

$$|\phi\rangle = \sqrt{Z!} \hat{\mathcal{A}} |\tilde{\phi}\rangle = \frac{1}{\sqrt{Z!}} \sum_{\Pi} \epsilon(\Pi) |\varphi_{\Pi(1)}(1)\rangle \cdots |\varphi_{\Pi(Z)}(Z)\rangle.$$

Dabei ist  $\hat{\mathcal{A}}$  der Operator der Antisymmetrisierung und

$$|\tilde{\phi}\rangle = |\varphi_1(1)\rangle \cdots |\varphi_Z(Z)\rangle.$$

Nach Annahme gilt  $\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}$ . Wir haben

$$E[\phi] = \langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle = \langle \phi | (\hat{H}_1 + \hat{H}_2) | \phi \rangle$$

zu berechnen.

a) Für den 1-Teilchen-Operator  $\hat{H}_1$  erhalten wir mit  $\hat{\mathcal{A}}^\dagger = \hat{\mathcal{A}} = \hat{\mathcal{A}}^2$  und  $[\hat{H}, \hat{\mathcal{A}}] = 0$ :

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{H}_1 | \phi \rangle &= Z! \langle \tilde{\phi} | \hat{\mathcal{A}}^\dagger \hat{H}_1 \hat{\mathcal{A}} | \tilde{\phi} \rangle \\ &= Z! \langle \tilde{\phi} | \hat{H}_1 \hat{\mathcal{A}} | \tilde{\phi} \rangle, \\ &= \sum_{\Pi} \sum_i \epsilon(\Pi) \langle \varphi_1(1), \dots, \varphi_Z(Z) | \hat{h}_i | \varphi_{\Pi(1)}(1), \dots, \varphi_{\Pi(Z)}(Z) \rangle \\ &= \sum_{\Pi} \sum_i \epsilon(\Pi) \langle \varphi_1(1) | \varphi_{\Pi(1)}(1) \rangle \cdots \langle \varphi_i(i) | \hat{h}_i | \varphi_{\Pi(i)}(i) \rangle \cdots \langle \varphi_Z(Z) | \varphi_{\Pi(Z)}(Z) \rangle \\ &= \sum_i \langle \varphi(i) | \hat{h}_i | \varphi(i) \rangle, \end{aligned}$$

denn nur die Terme mit identischer Permutation liefern wegen  $\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}$  einen von Null verschiedenen Beitrag. Da alle 1-Teilchenoperatoren identisch sind, erhalten wir mit der Bezeichnung  $\hat{h}_1 \equiv \hat{h}_i$  folgendes Resultat:

$$\langle \phi | \hat{H}_1 | \phi \rangle = \sum_i \langle \varphi_i | \hat{h}_1 | \varphi_i \rangle, \quad (12.52)$$

wobei die Summe über alle in den  $Z$ -Teilchenzustand eingehende Orbitale läuft. In der Ortsdarstellung  $|\xi\rangle = |\vec{x}, \sigma\rangle$  erhalten wir:

$$\langle \phi | \hat{H}_1 | \phi \rangle = \sum_i \int d\xi \varphi_i^*(\xi) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{Z e^2}{r} \right\} \varphi_i(\xi). \quad (12.53)$$

b) Durch völlig analoge Rechnung erhalten wir den zweiten Beitrag:

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{H}_2 | \phi \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{\Pi} \sum_{i \neq j} \epsilon(\Pi) \langle \varphi_1(1), \dots, \varphi_Z(Z) | \hat{\omega}_{ij} | \varphi_{\Pi(1)}(1), \dots, \varphi_{\Pi(Z)}(Z) \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \{ \langle \varphi_i(i) \varphi_j(j) | \hat{\omega}_{ij} | \varphi_i(i) \varphi_j(j) \rangle - \langle \varphi_i(i) \varphi_j(j) | \hat{\omega}_{ij} | \varphi_j(i) \varphi_i(j) \rangle \}. \end{aligned}$$

Wiederum sind die 2-Teilchen-Hamilton-Operatoren alle identisch, wir schreiben  $\hat{\omega}_{12} \equiv \hat{\omega}_{ij}$  und erhalten:

$$\langle \phi | \hat{H}_2 | \phi \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \{ \langle \varphi_i(1) \varphi_j(2) | \hat{\omega}_{12} | \varphi_i(1) \varphi_j(2) \rangle - \langle \varphi_i(1) \varphi_j(2) | \hat{\omega}_{12} | \varphi_j(1) \varphi_i(2) \rangle \}. \quad (12.54)$$

In der Ortsdarstellung ergibt sich:

$$\langle \phi | \hat{H}_2 | \phi \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \int d\xi_1 d\xi_2 \varphi_i^*(\xi_1) \varphi_j^*(\xi_2) \frac{e^2}{r_{12}} \varphi_i(\xi_1) \varphi_j(\xi_2) \quad (12.55)$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \int d\xi_1 d\xi_2 \varphi_i^*(\xi_1) \varphi_j^*(\xi_2) \frac{e^2}{r_{12}} \varphi_i(\xi_2) \varphi_j(\xi_1). \quad (12.56)$$

Die Summe läuft über  $\frac{1}{2}Z(Z-1)$  Paare von 1-Teilchen-Zuständen, die man aus den  $\varphi_i$  bilden kann. Wir erhalten also:

$$E[\phi] = \sum_i \langle \varphi_i | \hat{h}_1 | \varphi_i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \{ \langle \varphi_i(1) \varphi_j(2) | \hat{\omega}_{12} | \varphi_i(1) \varphi_j(2) \rangle - \langle \varphi_i(1) \varphi_j(2) | \hat{\omega}_{12} | \varphi_j(1) \varphi_i(2) \rangle \}. \quad (12.57)$$

### Bemerkungen 12.8

i) Bei der Variation von  $E[\phi]$  müssen die Bedingungen  $\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}$  respektiert werden, d.h. wir haben es mit einer Variation mit Nebenbedingungen zu tun. Diese werden wie üblich durch die Einführung von Lagrange-Multiplikatoren berücksichtigt:

$$\delta \left\{ E[\phi] - \sum_{i,j} \lambda_{ij} \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle \right\} = 0, \quad (12.58)$$

wobei  $\lambda_{ij} = \lambda_{ji}^*$  gilt, denn  $E$  ist reell. Die Lagrange-Multiplikatoren bilden also eine Hermitesche Matrix  $\lambda$ .

ii) Wir betrachten einen Basiswechsel im Unterraum des 1-Teilchen-Hilbertraumes, der durch einen gegebenen Satz von  $Z$  orthonormierten Vektoren  $|\varphi_i\rangle$  aufgespannt wird:

$$|\varphi_i\rangle \rightarrow |\varphi_i'\rangle = \sum_j c_{ij} |\varphi_j\rangle, \quad \langle \varphi_i' | \varphi_j' \rangle = \delta_{ij}.$$

Dann gilt

$$|\phi'\rangle = \det C |\phi\rangle, \quad C = (c_{ij}),$$

und aus der Normierungsbedingung  $\langle \varphi_i' | \varphi_j' \rangle = \delta_{ij}$  folgt, daß  $C$  unitär sein muß. Dies bedeutet insbesondere  $|\det C|^2 = 1$  und damit ist  $E[\phi]$  unter dieser Transformation invariant.

In der neuen Basis hat (12.58) die Gestalt

$$\delta \left\{ E[\phi] - \sum_{i,j} \lambda_{ij}' \langle \varphi_i' | \varphi_j' \rangle \right\} = 0, \quad (12.59)$$

mit  $\lambda_{ij}^{\lambda} = (C^{\dagger} \lambda C)_{ij}$ . Wir wählen  $C$  so, daß  $\lambda$  diagonal wird,  $\lambda_{\varepsilon_j} = \varepsilon_i \delta_{ij}$ , wobei die  $\varepsilon_i$  reell sind. Dies liefert

$$\delta \left\{ E[\phi] - \sum_i \varepsilon_i \langle \varphi_i | \varphi_i \rangle \right\} = 0, \quad (12.60)$$

Aus diesem Variationsprinzip erhalten wir nun sofort die Schrödingergleichungen für die 1-Teilchen-Zustände. Dazu fassen wir  $|\delta\varphi_i\rangle$  und  $\langle\delta\varphi_i|$  als unabhängig voneinander auf, vgl. Abschnitt 12.4.1. Dies liefert:

$$\begin{aligned} & \sum_i \langle \delta\varphi_i | \hat{h}_1 | \varphi_i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \langle \delta\varphi_i \varphi_j + \varphi_i \delta\varphi_j | \hat{\omega}_{12} | \varphi_i \varphi_j \rangle \\ & - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \langle \delta\varphi_i \varphi_j + \varphi_i \delta\varphi_j | \hat{\omega}_{12} | \varphi_j \varphi_i \rangle - \sum_i \varepsilon_i \langle \delta\varphi_i | \varphi_i \rangle = 0, \end{aligned}$$

also

$$\hat{h}_1 | \varphi_i \rangle + \sum_{j, i \neq j} \left\{ \langle \varphi_j^{(2)} | \hat{\omega}_{12} | \varphi_i \varphi_j \rangle - \langle \varphi_j^{(2)} | \hat{\omega}_{12} | \varphi_j \varphi_i \rangle \right\} = \varepsilon_i | \varphi_i \rangle, \quad (12.61)$$

wobei der obere Index (2) in  $\varphi_j^{(2)}$  bedeutet, daß in der zweiten Komponente des Tensorprodukts multipliziert wird. In der Ortsdarstellung erhalten wir:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^{(1)} - \frac{Z e^2}{r_1} \right) \varphi_i(\xi_1) + e^2 \sum_{j, j \neq i} \left\{ \int d\xi_2 \frac{\varphi_j^*(\xi_2) \varphi_j(\xi_2)}{r_{12}} \varphi_i(\xi_1) - \int d\xi_2 \frac{\varphi_j^*(\xi_2) \varphi_j(\xi_1)}{r_{12}} \varphi_i(\xi_2) \right\} = \varepsilon_i \varphi_i(\xi_1) \quad (12.62)$$

### Bemerkungen 12.9

- (i) Die Gleichungen (12.61) bzw. (12.62) heißen **Hartree-Fock-Gleichung**. Wie bereits eingangs erwähnt, handelt es sich um eine Eigenwertgleichung für einen Operator, der selbst von den gesuchten Eigenfunktionen abhängt, d.h. man hat eine nichtlineare Selbstkonsistenzgleichung zu lösen. Dies geschieht durch Iteration: Wir starten mit einem System von 1-Teilchenzuständen  $\{|\varphi_i^{(0)}\rangle\}$ , bestimmen für diese den Operator auf der linken Seite von (12.61) und bestimmen anschließend für diesen Operator die Eigenfunktionen  $\{|\varphi_i^{(1)}\rangle\}$  usw. . Auf diese Weise kann man das effektive Potential und die Eigenfunktionen beliebig genau berechnen.
- (ii) Wir interpretieren die einzelnen Terme der Hartree-Fock-Gleichung: Der 1. Term entspricht der Summe aus der kinetischen Energie des  $i$ -ten Elektrons und dessen potentieller Energie im Kernfeld. Der 2. Term heißt **Coulombterm**. Er beschreibt die mittlere Energie des  $i$ -ten Elektrons im Feld der übrigen Elektronen. Er ist identisch mit der Coulombenergie des  $i$ -ten Elektrons in der Ladungsverteilung

$$\varrho_i(\xi) = e \sum_{j, j \neq i} |\varphi_j(\xi)|^2,$$

ausgebildet durch die anderen  $Z - 1$  Elektronen. Der offensichtlich **nichtlokale** 3. Term heißt **Austauschterm**, seine Anwesenheit folgt aus dem Pauli-Prinzip. Die Größe  $-\varepsilon_i$  ist die Ionisationsenergie des  $i$ -ten Elektrons, d.h. die Energie, die aufgewandt werden muß, um dieses Elektron aus dem System zu entfernen.

- (iii) Offensichtlich kann man in Gleichung (12.61) bzw. (12.62) den Term  $i = j$  hinzufügen. Dann bezeichnet man

$$V_c(\vec{x}_1) = e^2 \sum_j \int d\xi_2 \frac{|\varphi_j(\xi_2)|^2}{r_{12}}$$

und

$$V_{ex}(\xi_1, \xi_2) = e^2 \sum_j^Z \frac{\varphi_j^*(\xi_2) \varphi_j(\xi_1)}{r_{12}}$$

und die Hartree–Fock–Gleichung erhält die folgende Form:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^{(1)} - \frac{Z e^2}{r_1} + V_c(\vec{x}_1) \right) \varphi_i(\xi_1) - \int d\xi_2 V_{ex}(\xi_1, \xi_2) \varphi_i(\xi_2) = \varepsilon_i \varphi_i(\xi_1). \quad (12.63)$$

Dabei ist zu beachten, daß  $V_{ex}$  nur für gleiche Spinquantenzahlen von Null verschieden ist.

iv) Wir bemerken noch, daß die Summe der Ionisationsenergien der einzelnen Elektronen nicht gleich der Gesamtenergie des  $Z$ -Elektronensystems ist. In der Tat liefert die Bildung des Skalarprodukts mit  $\langle \varphi_i^{(1)} |$  in Gleichung (12.61) und Aufsummieren über alle  $i$ :

$$\langle \hat{H}_1 \rangle + 2 \langle \hat{H}_2 \rangle = \sum_{i=1}^Z \varepsilon_i. \quad (12.64)$$

Dies ist nicht verwunderlich, denn beim Aufaddieren wurde die Wechselwirkungsenergie der Elektronen untereinander doppelt gezählt.

## 12.5 Zeitabhängige Störungstheorie

Die zeitabhängige Störungstheorie basiert auf dem Konzept der Übergangswahrscheinlichkeiten, das im Teil I, Abschnitt 7.3 behandelt wurde und an das wir hier erinnern.

Sei ein System beschrieben durch den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t),$$

wobei  $\hat{H}_1(t)$  eine kleine, explizit zeitabhängige Störung ist. Der Operator  $\hat{H}_0$  sei konservativ und das zugehörige Eigenwertproblem exakt lösbar:

$$\hat{H}_0 |\psi_n \rangle = E_n |\psi_n \rangle.$$

Die zeitliche Evolution des ungestörten Systems wird beschrieben durch den Zeitentwicklungsoperator

$$\hat{U}_0(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_0}.$$

Für Eigenzustände erhält man

$$\psi_n(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)} \psi_n(t_0).$$

Wegen der Orthogonalität der Eigenzustände ist die **Übergangswahrscheinlichkeit**, das **ungestörte** System, beschrieben durch  $\hat{H}_0$ , zum Zeitpunkt  $t$  im Zustand  $\psi_n$  zu finden, wenn es zum Zeitpunkt  $t_0$  im Zustand  $\psi_m$ ,  $m \neq n$ , war, gleich Null:

$$|\langle \psi_n(t) | \psi_m(t) \rangle|^2 = |\langle \psi_n(t) | e^{-\frac{i}{\hbar}E_m(t-t_0)} | \psi_m(t_0) \rangle|^2 = 0.$$

Schalten wir dagegen die Störung ein, so wird im allgemeinen

$$|\langle \psi_n(t) | \hat{U}(t, t_0) | \psi_m(t_0) \rangle|^2 \neq 0$$

gelten, wobei  $\hat{U}(t, t_0)$  den Zeitentwicklungsoperator für  $\hat{H}$  bezeichnet. Es gilt

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathcal{T} \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt \hat{H}(t) \right),$$

wobei  $\mathcal{T}(\cdot)$  das zeitgeordnete Produkt bezeichnet:

$$\mathcal{T}\left(\hat{H}(t_1)\cdots\hat{H}(t_n)\right) = \hat{H}(t_i)\cdots\hat{H}(t_j)\cdots\hat{H}(t_k),$$

mit  $t_i \geq \dots \geq t_j \geq \dots \geq t_k$ . Es ist nützlich, ins Wechselwirkungs-Bild überzugehen:

$$\begin{aligned} |\psi_I(t)\rangle &= e^{\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_0} |\psi(t)\rangle \\ \hat{A}_I(t) &= e^{\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_0} \hat{A}(t) e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_0}. \end{aligned}$$

Dann hat die Schrödingergleichung folgende Gestalt:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_I(t)\rangle = \hat{H}_{1I}(t) |\psi_I(t)\rangle,$$

wobei  $H_{1I}(t)$  den Störoperator im Wechselwirkungs-Bild bezeichnet. Die zugehörige Integralgleichung ist

$$|\psi_I(t)\rangle = |\psi_I(t_0)\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}_{1I}(t') |\psi_I(t')\rangle,$$

mit der formalen Lösung:

$$|\psi_I(t)\rangle = \mathcal{T} \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}_{1I}(t') \right] |\psi_I(t_0)\rangle \equiv \hat{U}_I(t, t_0) |\psi_I(t_0)\rangle. \quad (12.65)$$

Offensichtlich gilt

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}_0(t, t_0) \cdot \hat{U}_I(t, t_0). \quad (12.66)$$

Man entwickelt nun  $\hat{U}(t, t_0)$  in eine **Dyson-Reihe**:

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}_0(t, t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} \hat{U}_n(t, t_0),$$

mit

$$\begin{aligned} \hat{U}_n(t, t_0) &= e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_0} \left( -\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}_{1I}(t_1) \cdots \hat{H}_{1I}(t_n) \\ &= \left( -\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{U}_0(t, t_0) \left( \hat{U}_0^\dagger(t_1, t_0) \hat{H}_1(t_1) \hat{U}_0(t_1, t_0) \right) \\ &\quad \cdots \left( \hat{U}_0^\dagger(t_{n-1}, t_0) \hat{H}_1(t_{n-1}) \hat{U}_0(t_{n-1}, t_0) \right) \left( \hat{U}_0^\dagger(t_n, t_0) \hat{H}_1(t_n) \hat{U}_0(t_n, t_0) \right) \end{aligned} \quad (12.67)$$

$$\begin{aligned} &= \left( -\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \left\{ \hat{U}_0(t, t_1) \hat{H}_1(t_1) \hat{U}_0(t_1, t_2) \hat{H}_1(t_2) \times \cdots \right. \\ &\quad \left. \cdots \times \hat{U}_0(t_2, t_3) \cdots \hat{H}_1(t_{n-1}) \hat{U}_0(t_{n-1}, t_n) \hat{H}_1(t_n) \hat{U}_0(t_n, t_0) \right\}. \end{aligned} \quad (12.68)$$

In 1. Näherung erhalten wir

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}_0(t, t_0) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{U}_0(t, t_1) \hat{H}_1(t_1) \hat{U}_0(t_1, t_0).$$

Wir drücken die Übergangsamplitude mit Hilfe obiger Reihenentwicklung aus:

$$A_{i \rightarrow f}(t, t_0) = \langle \psi_f | \hat{U}(t, t_0) | \psi_i \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \psi_f | \hat{U}_n(t, t_0) | \psi_i \rangle \equiv \sum_{n=1}^{\infty} A_{i \rightarrow f}^{(n)}(t, t_0).$$

Sei nun  $\{|\psi_n\rangle\}$  eine Basis von Eigenvektoren zu den Eigenwerten  $E_n^{(0)}$  des ungestörten Hamiltonians  $\hat{H}_0$  und seien  $|\psi_i\rangle$  und  $|\psi_f\rangle$  Elemente dieser Basis. Dann gilt:

$$A_{i \rightarrow f}^{(n)} = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^t dt_n \sum_{k_1} \dots \sum_{k_{n-1}} \quad (12.69)$$

$$\times \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_1)E_f^{(0)}} V_{f k_1}(t_1) e^{-\frac{i}{\hbar}(t_1-t_2)E_{k_1}^{(0)}} V_{k_1 k_2}(t_2) e^{-\frac{i}{\hbar}(t_2-t_3)E_{k_2}^{(0)}} \dots \right. \\ \left. V_{k_{n-2} k_{n-1}} e^{-\frac{i}{\hbar}(t_{n-1}-t_n)E_{k_{n-1}}^{(0)}} V_{k_{n-1} i}(t_n) e^{-\frac{i}{\hbar}(t_n-t_0)E_i^{(0)}} \right\}, \quad (12.70)$$

mit  $V_{lk}(t) \equiv \langle \psi_l | \hat{H}_1(t) | \psi_k \rangle$ . Man liest (12.70) von rechts nach links mit folgender störungstheoretischer Interpretation: Für  $t_0$  ist das System im Zustand  $|\psi_i\rangle$ , es propagiert frei bis zum Zeitpunkt  $t_n$ , wechselwirkt mit  $V_{k_{n-1}i}(t_n)$ , entwickelt sich wieder frei bis zum Zeitpunkt  $t_{n-1}$  usw. In Anwendungen beschränkt man sich oft auf die erste Ordnung der Störungstheorie:

$$A_{i \rightarrow f}^{(1)}(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_1)E_f^{(0)}} V_{fi}(t_1) e^{-\frac{i}{\hbar}(t_1-t_0)E_i^{(0)}}.$$

Dies liefert die folgende Übergangswahrscheinlichkeit in erster oder **Bornscher Näherung**:

$$P_{i \rightarrow f}^{(1)}(t, t_0) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t dt e^{i(E_f^{(0)} - E_i^{(0)})t} V_{fi}(t) \right|^2 \quad (12.71)$$

Für verschiedene Anwendungen muß man die Entwicklung des Zustandes selbst, Ordnung für Ordnung der Störungstheorie, untersuchen. Prinzipiell ist diese natürlich durch Formel (12.65) gegeben. Mitunter ist der folgende, etwas direktere Weg im Schrödinger-Bild nützlich: Wir verwenden wieder eine Basis  $\{|n\rangle\}$  von Eigenvektoren von  $\hat{H}_0$  und entwickeln  $|\psi(t)\rangle$  nach dieser Basis,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^{(0)} t} |n\rangle, \quad t_0 = 0.$$

Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung und Multiplikation der Gleichung mit  $\langle m |$  von links liefert:

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_m(t) = \lambda \sum_n \langle m | \hat{H}_1(t) | n \rangle e^{i\omega_{mn} t} a_n(t), \quad (12.72)$$

wobei  $\omega_{mn} = (E_m^{(0)} - E_n^{(0)})/\hbar$  gesetzt wurde und ein kleiner Störparameter  $\lambda$  vor  $\hat{H}_1$  geschrieben wurde. Dies ist eine **exakte** Gleichung zur Bestimmung der  $a_n$ , die man iterativ löst. Der Ansatz

$$a_n(t) = a_n^{(0)} + \lambda a_n^{(1)} + \dots$$

liefert  $\frac{d}{dt} a_n^{(0)} = 0$ , also  $a_n^{(0)} = \text{const}$ , und allgemein

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_m^{(r+1)}(t) = \sum_n \langle m | \hat{H}_1(t) | n \rangle e^{i\omega_{mn} t} a_n^{(r)}(t). \quad (12.73)$$

In konkreten Problemstellungen hat man  $|\psi(0)\rangle = \sum_n a_n^{(0)} |n\rangle$  zu spezifizieren, etwa durch  $|\psi(0)\rangle = |i\rangle$ . Dies liefert in erster Ordnung

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_m^{(1)}(t) = \langle m | \hat{H}_1(t) | i \rangle e^{i\omega_{mi} t},$$

also

$$a_m^{(1)}(t) = \delta_{mi} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 \langle m | \hat{H}_1(t_1) | i \rangle e^{i\omega_{mi} t_1}.$$

Als Übergangsamplitude in den Zustand  $|f\rangle$  erhalten wir

$$\langle f|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n^{(0)}t} \langle f|n\rangle = a_f e^{-\frac{i}{\hbar}E_f^{(0)}t}.$$

und damit ergibt sich die folgende Übergangswahrscheinlichkeit:

$$|\langle f|\psi(t)\rangle|^2 = |a_f(t)|^2. \quad (12.74)$$

### 12.5.1 Konstante Störungen. Fermis goldene Regel

Sei ein System im stationären Zustand  $|\psi_i\rangle$  des Operators  $\hat{H}_0$ . Zum Zeitpunkt  $t = 0$  werde eine zeitunabhängige Störung  $\hat{V}$  eingeschaltet, d.h.:

$$\hat{H}_1(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ \hat{V} & t \geq 0 \end{cases}$$

Einsetzen in (12.71) liefert mit den Bezeichnungen  $V_{fi} \equiv \langle \psi_f | \hat{V} | \psi_i \rangle$  und  $\omega_{fi} = \frac{1}{\hbar} (E_f^{(0)} - E_i^{(0)})$ :

$$P_{i \rightarrow f}^{(1)}(t, 0) = \frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' e^{i\omega_{fi}t'} \right|^2 = \frac{4|V_{fi}|^2}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \sin^2 \frac{\omega_{fi}t}{2}. \quad (12.75)$$

Abbildung 12.6 zeigt das Verhalten dieser Übergangswahrscheinlichkeit als Funktion von  $\omega_{fi}$ .

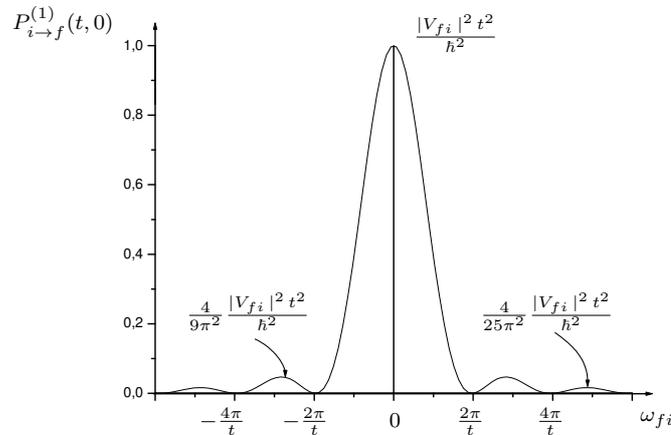


Abbildung 12.6: Die Übergangswahrscheinlichkeit  $P_{i \rightarrow f}^{(1)}(t, 0)$  als Funktion von  $\omega_{fi}$  bei einer konstanten Störung.

#### Bemerkungen 12.10

- (i) Für  $E_f^{(0)} \neq E_i^{(0)}$ , also  $\omega_{fi} \neq 0$ , ist  $P_{i \rightarrow f}^{(1)}$  eine periodische Funktion der Zeit mit der Periode  $\frac{2\pi}{\omega_{fi}}$  und mit Werten zwischen 0 und  $\frac{4|V_{fi}|^2}{\hbar^2 \omega_{fi}^2}$ . Für  $E_f^{(0)} = E_i^{(0)}$  (Energieerhaltung) und  $|\psi_f\rangle \perp |\psi_i\rangle$  wächst  $P_{i \rightarrow f}^{(1)}$  wie  $t^2$ . Die Formel wird also für sehr große  $t$  unsinnig, da sich dann eine Übergangswahrscheinlichkeit, die größer als 1 ist, ergibt. Es müssen dann Terme höherer Ordnung der Störungstheorie berücksichtigt werden.

- (ii) Für sehr kleine Zeiten erhalten wir Übergänge zu allen  $|\psi_f\rangle$ , für die  $V_{fi} \neq 0$  gilt, und zwar alle mit sehr kleinen Wahrscheinlichkeiten der Ordnung  $t^2$ . Für größere Zeiten werden Übergänge zu  $|\psi_f\rangle$  dominierend, für die gilt:

$$\frac{1}{\hbar} |E_f^{(0)} - E_i^{(0)}| \leq \frac{2\pi}{t}. \quad (12.76)$$

Wir geben eine grobe Abschätzung der Größenordnungen an: Die Höhe des Maximums bei  $\omega_{fi} = 0$  ist  $\frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2} t^2$ . Die Höhe des Maximums in der Entfernung  $\Delta E_{fi}$  ist  $\frac{4|V_{fi}|^2}{(\Delta E_{fi})^2}$ . Ihr Verhältnis beträgt also

$$x = \frac{(\Delta E_{fi} \cdot t)^2}{4\hbar^2} \sim \frac{0.58 \times 10^{30}}{\text{eVs}} (\Delta E_{fi} \cdot t)^2.$$

Schon für relativ kurze Zeiten nach dem Einschaltvorgang, etwa für  $t \sim 10^{-6} \text{ s}$ , und für  $\Delta E_{fi} \sim 10^{-6} \text{ eV}$ , (was aus spektroskopischer Sicht vernünftig ist), erhalten wir  $x \sim 10^6$ . D.h.: praktisch ist (12.76) immer erfüllt und wir haben **Energieerhaltung** mit einer Genauigkeit von  $\frac{2\pi\hbar}{t}$ . Eine suggestive Schreibweise für (12.76) ist

$$\Delta E_{fi} \cdot \Delta t \sim \hbar.$$

Der Grund für das Auftreten von Übergängen, die die Energieerhaltung verletzen, ist ein unkontrollierter Energieübertrag durch die eingeschaltete Störung. Die Fluktuation  $\Delta E_{fi}$  dieser übertragenen Energie ist mit der Zeitdauer  $\Delta t$  der Störung durch obige Unschärferelation verknüpft.<sup>8</sup>

- iii) Im Distributionensinne gilt:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 \frac{\omega t}{2}}{\omega^2 t} = \frac{\pi}{2} \delta(\omega),$$

d.h. für große  $t$  gilt:

$$\frac{\sin^2 \frac{\omega_{fi} t}{2}}{\omega_{fi}^2} \sim t \cdot \frac{\pi}{2} \delta(\omega_{fi}) = t \cdot \frac{\pi\hbar}{2} \delta(E_f^{(0)} - E_i^{(0)}). \quad (12.77)$$

Für sehr große Zeiten scheint sich also eine **lineare Abhängigkeit** von der Zeit einzustellen, was die Definiton von zeitunabhängigen Übergangsraten pro Zeiteinheit ermöglichen würde. Des weiteren ist festzuhalten, daß obiger Grenzwert offensichtlich nur für Übergänge in das **kontinuierliche Spektrum** sinnvoll ist. Dies wäre interessant für die Behandlung von Zerfallsprozessen, bei denen die Endzustände **keine gebundenen** Zustände mehr sind, (etwa die Zustände ionisierter Atome)<sup>9</sup>.

Für sehr kleine Zeiten haben wir also eine Verletzung der Energieerhaltung und für sehr große Zeiten werden die Übergangswahrscheinlichkeiten beliebig groß, so dass insbesondere der Grenzübergang im Sinne von (12.77) sinnlos ist. Wir fragen uns nun, ob physikalisch sinnvolle Zeitschranken nach unten und nach oben existieren, so daß die in Punkt iii) obiger Bemerkung nahegelegten Konzepte realisiert werden können. Solche Schranken existieren in der Tat, weil wir es hier mit **drei natürlichen Energieskalen** zu tun haben:

- i) die Energieskala  $\delta E$ , die die Abstände zwischen den Endniveaus beschreibt. Für ein kontinuierliches Spektrum ergibt sich natürlich  $\delta E \rightarrow 0$ . "Regularisiert" man diese Situation, indem man das System in eine Box mit endlicher Seitenlänge einschließt, so erhält man durch einfache Abschätzung die Größenordnung  $\delta E \sim 10^{-6} \text{ eV}$ .
- ii) die Energieskala  $\frac{2\pi\hbar}{t}$ , die sich aus obiger Unschärferelation ergibt und die die Breite des zentralen Peaks mißt. Für eine Meßdauer  $t$  im Pikosekundenbereich ist  $\frac{2\pi\hbar}{t} \sim 10^{-3} \text{ eV}$ .

<sup>8</sup>Diese Relation ist zwar von heuristischem Wert, aber nicht im strengen Sinne als Unschärferelation zu verstehen. Weder  $\Delta E_{fi}$  noch  $\Delta t$  wurden exakt definiert!

<sup>9</sup>Genau genommen sind auch alle angeregten Zustände eines Atoms "verwischt", also Resonanzzustände. Nur der Grundzustand ist im strengen Sinne stationär.

- iii) die Energieskala  $\Delta E$ , die das Auflösungsvermögen der Apparatur charakterisiert. Bei sehr präzisen Messungen ist  $\Delta E \sim 1 \text{ eV}$ .

Die hier angegebenen Zahlenwerte dienen natürlich nur der Illustration. Sie legen aber folgende Relationen nahe:

$$\delta E \ll \frac{2\pi\hbar}{t} \ll \Delta E. \quad (12.78)$$

Diese Relationen sichern, daß hinreichend viele Zustände innerhalb des zentralen Peaks liegen, so daß diese durch eine Zustandsdichte charakterisiert werden können, und daß der zentrale Peak praktisch durch eine  $\delta$ -Distribution ersetzt werden kann. Wir werden im weiteren unterstellen, daß diese Bedingungen erfüllt sind. Dann ergeben sich die folgenden Zeitschranken:

$$\frac{2\pi\hbar}{\Delta E} \ll t \ll \frac{2\pi\hbar}{\delta E}. \quad (12.79)$$

Wir berechnen nun, unter Verwendung dieser Annahmen, die Übergangswahrscheinlichkeit von einem Energieniveau  $E_i^{(0)}$  in ein Energieintervall der Breite  $\Delta E = (E - \frac{\Delta E}{2}, E + \frac{\Delta E}{2})$ , d.h.  $E_f^{(0)} \in \Delta E$ . Wir bezeichnen die Menge der Quantenzahlen mit  $f \equiv (E, \alpha)$  und das  $\Delta E$  entsprechende Intervall mit  $\Delta f$ . Wegen (12.78) können wir die Zustände im Intervall  $\Delta E$  durch eine Zustandsdichte  $\varrho_\alpha(E)$  charakterisieren. Dann ergibt sich die Übergangswahrscheinlichkeit in das Intervall  $\Delta f$  durch Aufsummieren aller Beiträge der Form (12.75), gewichtet mit dieser Dichte:

$$P_{i \rightarrow \Delta f}(t) = \int_{\Delta f} df N(f) P_{i \rightarrow f}(t) = \int_{\Delta \alpha} d\alpha \int_{\Delta E} dE \varrho_\alpha(E) P_{i \rightarrow f}(t). \quad (12.80)$$

### Bemerkungen 12.11

Solange die Energiezustände zwar sehr dicht aber diskret liegen, müssten wir eigentlich eine Summe schreiben. Von mathematischen Feinheiten abstrahierend, schließen wir aber den Fall des echt kontinuierlichen Spektrums mit ein. Dann sind die  $|\psi_f\rangle$  natürlich verallgemeinerte Eigenvektoren. Werden sie wie üblich normiert,  $\langle \psi_f | \psi_{f'} \rangle = \frac{1}{N(f)} \delta(f - f')$ , dann ist der Projektor auf das Intervall  $\Delta f$  gegeben durch:

$$\hat{P}_{\Delta f} = \int_{\Delta f} df |\psi_f\rangle N(f) \langle \psi_f| = \int_{\Delta \alpha} d\alpha \int_{\Delta E} dE |\psi_{E,\alpha}\rangle \varrho_\alpha(E) \langle \psi_{E,\alpha}|.$$

Setzen wir (12.75) in (12.80) ein, so erhalten wir mit  $\bar{E}' \equiv E' - E_i^{(0)}$ :

$$P_{i \rightarrow \Delta f}^{(1)}(t) = \int_{\Delta \alpha} d\alpha \int_{E - \frac{\Delta E}{2}}^{E + \frac{\Delta E}{2}} dE' |\langle \psi_{E',\alpha} | \hat{V} | \psi_i \rangle|^2 \varrho_\alpha(E') \frac{\sin^2\left(\frac{\bar{E}' t}{2\hbar}\right)}{\left(\frac{\bar{E}'}{2}\right)^2}.$$

Ist  $\Delta E$  hinreichend klein, so können wir annehmen, daß  $\varrho_\alpha(\cdot)$  und  $\langle \psi_{\cdot,\alpha} | \hat{V} | \psi_i \rangle$  als Funktionen von  $E$  näherungsweise konstant sind. Dies liefert:

$$P_{i \rightarrow \Delta f}^{(1)}(t) = \int_{\Delta \alpha} d\alpha \varrho_\alpha(E) |\langle \psi_{E,\alpha} | \hat{V} | \psi_i \rangle|^2 \int_{E - \frac{\Delta E}{2}}^{E + \frac{\Delta E}{2}} dE' \frac{\sin^2\left(\frac{\bar{E}' t}{2\hbar}\right)}{\left(\frac{\bar{E}'}{2}\right)^2}. \quad (12.81)$$

Wir substituieren  $u = \frac{t}{2\hbar}(E' - E_i^{(0)})$ , bezeichnen

$$I \equiv \int_{E - \frac{\Delta E}{2}}^{E + \frac{\Delta E}{2}} dE' \frac{\sin^2\left(\frac{\bar{E}' t}{2\hbar}\right)}{\left(\frac{\bar{E}'}{2}\right)^2} = \frac{2t}{\hbar} \int_{\frac{t}{2\hbar}(E - E_i^{(0)} - \frac{\Delta E}{2})}^{\frac{t}{2\hbar}(E - E_i^{(0)} + \frac{\Delta E}{2})} du \frac{\sin^2 u}{u^2}$$

und bemerken, daß der Integrand von  $I$  wegen (12.78) bzw. (12.79) im Intervall  $\Delta E$  stark oszilliert. Es sind nun zwei Fälle zu unterscheiden:

- a) Der zentrale Peak des Integranden liegt nicht im Intervall  $\Delta E$ . Dann ist  $u \neq 0$ , d.h. die Energie bleibt **nicht** erhalten und es gilt:

$$I \simeq \frac{8\hbar}{t \cdot (E - E_i^{(0)})^2} \int_{\frac{t}{2\hbar}(E - E_i^{(0)} - \frac{\Delta E}{2})}^{\frac{t}{2\hbar}(E - E_i^{(0)} + \frac{\Delta E}{2})} du \sin^2 u.$$

Der Mittelwert von  $\sin^2 u$  über das Intervall  $[0, 2\pi]$  ist  $\frac{1}{2}$  und das Integral läuft über das Intervall  $\frac{t\Delta E}{2\hbar} \gg 2\pi$ . Also gilt

$$I \simeq \frac{2\Delta E}{(E - E_i^{(0)})^2},$$

und damit

$$P_{i \rightarrow \Delta f}^{(1)}(t) \simeq \frac{2\Delta E}{(E - E_i^{(0)})^2} \int_{\Delta\alpha} d\alpha |\langle \psi_{E,\alpha} | \hat{V} | \psi_i \rangle|^2 \varrho_\alpha(E), \quad E \neq E_i^{(0)}. \quad (12.82)$$

- b) Der zentrale Peak liege im Intervall  $\Delta E$ . Dann dominieren dessen Beiträge im Integral und wir können die Integrationsgrenzen in  $I$  auf  $(-\infty, +\infty)$  ausdehnen. Das sich ergebende Integral berechnet man exakt mit Hilfe des Residuensatzes:

$$I = \frac{2t}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} du \frac{\sin^2 u}{u^2} \equiv \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\sin^2 \frac{\omega}{2} t}{(\frac{\omega}{2})^2} = \frac{1}{\hbar} 2\pi t.$$

Wir erhalten

$$P_{i \rightarrow \Delta f}^{(1)}(t) = \frac{2\pi t}{\hbar} \int_{\Delta\alpha} d\alpha |\langle \psi_{E_i^{(0)},\alpha} | \hat{V} | \psi_i \rangle|^2 \varrho_\alpha(E_i^{(0)}). \quad (12.83)$$

Wegen (12.78) dominiert der Beitrag von (12.83) den Beitrag von (12.82) deutlich. Wir können also, für das Zeitintervall aus (12.79), eine Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit (und pro Einheitsintervall von  $\alpha$ ) definieren:

$$\omega_{i \rightarrow \alpha}^{(1)} := \frac{d^2}{dt d\alpha} P_{i \rightarrow \Delta f}^{(1)}.$$

Setzen wir (12.83) ein, so erhalten wir **Fermis Goldene Regel**:

$$\omega_{i \rightarrow \alpha}^{(1)} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_{E_i^{(0)},\alpha} | \hat{V} | \psi_i \rangle|^2 \varrho_\alpha(E_i^{(0)}) \Big|_{E_f^{(0)} = E_i^{(0)}}. \quad (12.84)$$

### Bemerkungen 12.12

- i) Man schreibt Formel (12.84) oft etwas formaler als

$$\omega_{i \rightarrow \alpha}^{(1)} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_{E_i^{(0)},\alpha} | \hat{V} | \psi_i \rangle|^2 \delta(E_f^{(0)} - E_i^{(0)}). \quad (12.85)$$

Diese Formel ist so zu verstehen, daß man mit der Energiedichte der Endzustände zu multiplizieren und über die Energie zu integrieren hat. Genauso kann natürlich die Energie des Anfangszustandes verwischt sein, dann haben wir es mit zwei Zustandsdichten zu tun, die nicht unbedingt gleich sein müssen.

ii) Entsprechend der eingangs geführten Diskussion muss natürlich auch

$$\omega_{i \rightarrow \alpha}^{(1)} t \ll 1$$

erfüllt sein, ansonsten können wir uns nicht auf die 1. Ordnung der Störungstheorie beschränken.

iii) Solange obige Bedingungen erfüllt sind, ist die Zerfallsrate eines Ensembles von  $N(0)$  Quantensystemen, alle präpariert im Zustand  $|\psi_i\rangle$ , konstant:

$$\frac{dN(t)}{N(t)} = -\Gamma_i dt,$$

also

$$N(t) = N(0) \exp\left(-\frac{\Gamma_i t}{\hbar}\right), \quad (12.86)$$

wobei  $\frac{\Gamma_i}{\hbar} \simeq \int d\alpha \omega_{i \rightarrow \alpha}^{(1)}$ , die Breite des Zustandes  $|\psi_i\rangle$  charakterisiert.

iv) Die Entwicklung einer mathematisch strengen Theorie der Resonanzen ist ein sehr schwieriges Gebiet der Funktionalanalysis bzw. der Mathematischen Physik. Wir verweisen auf Reed/Simon Teil IV, Abschnitt XII.6 und auf neuere Resultate in V. Bach, J. Fröhlich, I.M. Sigal, Commun. Math. Phys. 207 (2), 1999, 3985–4060 .

## 12.5.2 Adiabatische Störungen

Wir zeigen, daß Fermis Goldene Regel auch gilt, wenn wir die Störung adiabatisch einschalten, d.h. wir betrachten

$$\hat{H}_1(t) = e^{\varepsilon t} V.$$

Wir nehmen an, es gelte  $0 < \varepsilon \ll 1$ , d.h. die Störung wird ganz langsam eingeschaltet. Wir nehmen außerdem an, daß der Anfangszustand  $|\psi_i\rangle$  in der fernen Vergangenheit präpariert wurde, wo die Störung vernachlässigbar klein war. Die Übergangswahrscheinlichkeit ist dann nach (12.71):

$$P_{i \rightarrow f}^{(1)} = \frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^t dt_1 e^{i\omega_{fi} t_1} e^{\varepsilon t_1} \right|^2 = \frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2} \frac{\exp(2\varepsilon t)}{\omega_{fi}^2 + \varepsilon^2}. \quad (12.87)$$

Wir haben also das in Abbildung 12.7 gezeigte Verhalten der Übergangswahrscheinlichkeit als Funktion von  $\frac{\omega_{fi}}{\varepsilon}$ :

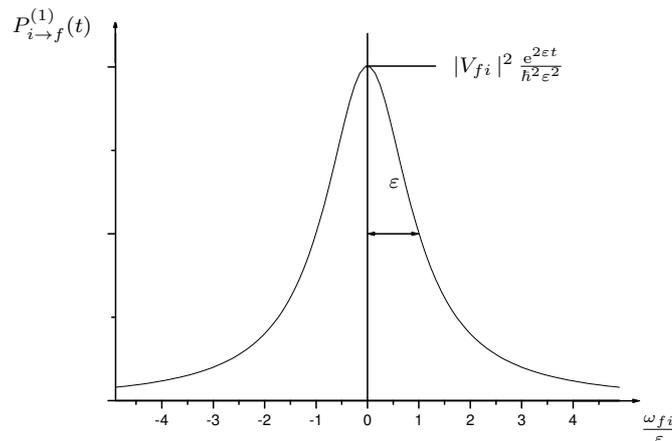


Abbildung 12.7: Die Übergangswahrscheinlichkeit bei adiabatischer Störung

Analog zu (12.81) erhalten wir:

$$P_{i \rightarrow \Delta f}^{(1)}(t) = \int_{\Delta\alpha} d\alpha |\langle \psi_{E,\alpha} | V | \psi_i \rangle|^2 \varrho_\alpha(E) \int_{E-\frac{\Delta E}{2}}^{E+\frac{\Delta E}{2}} dE' \frac{\exp(2\varepsilon t)}{(E' - E_i^{(0)})^2 + (\hbar\varepsilon)^2}.$$

Die zu  $\Delta E \gg \frac{2\pi\hbar}{t}$  analoge Forderung lautet hier

$$\Delta E \gg \hbar\varepsilon$$

und wir erhalten wieder dominierende Beiträge für den Fall, daß das Maximum des Integranden im Intervall  $\Delta E$  liegt. Das Resultat ist

$$P_{i \rightarrow \Delta\alpha}^{(1)}(t) = \frac{\pi}{\hbar\varepsilon} e^{2\varepsilon t} \int_{\Delta\alpha} d\alpha |\langle \psi_{E_i^{(0)},\alpha} | V | \psi_i \rangle|^2 \varrho_E(E_i^{(0)}). \quad (12.88)$$

Für  $\varepsilon \rightarrow 0$  ergibt sich exakt Fermis Goldene Regel.

### 12.5.3 Periodische Störungen

Aus physikalischer Sicht sind periodische Störungen sehr interessant. Wir betrachten

$$\hat{H}_1(t) = [V e^{-i\omega t} + V^\dagger e^{i\omega t}] e^{\varepsilon t},$$

also eine periodische Störung mit der Periode  $\omega$ , die adiabatisch eingeschaltet wird. Wieder unter Verwendung von (12.71) haben wir:

$$\begin{aligned} P_{i \rightarrow f}^{(1)}(t) &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^t dt' [V_{fi} e^{i(\omega_{fi} - \omega - i\varepsilon)t'} + V_{fi}^\dagger e^{i(\omega_{fi} + \omega - i\varepsilon)t'}] \right|^2 \\ &= \frac{e^{2\varepsilon t}}{\hbar^2} \left( \frac{|V_{fi}|^2}{(\omega_{fi} - \omega)^2 + \varepsilon^2} + \frac{|V_{fi}^\dagger|^2}{(\omega_{fi} + \omega)^2 + \varepsilon^2} + \text{Interferenzterme} \right). \end{aligned} \quad (12.89)$$

Da  $|V_{fi}| = |V_{fi}^\dagger|$  und  $\varepsilon \ll |\omega_{fi}|$  gilt, zeigt  $P_{i \rightarrow f}^{(1)}(t)$  die in Abb. 12.8 dargestellte Abhängigkeit von der Periode  $\omega$ .

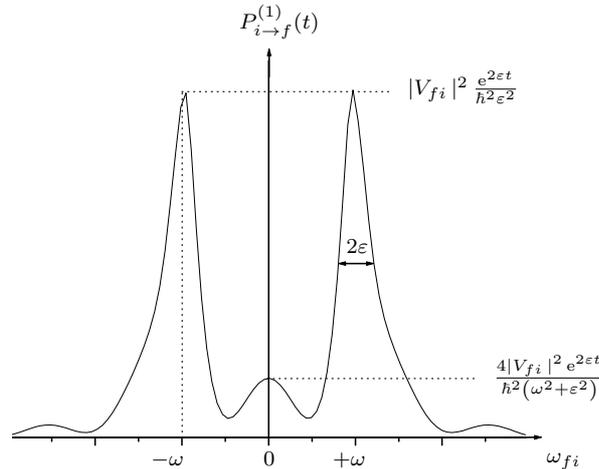


Abbildung 12.8: Die Übergangswahrscheinlichkeit bei einer periodischen Störung

Für  $\varepsilon \ll |\omega_{fi}|$  sind also nur die Beiträge bei  $\omega_{fi} = \pm\omega$  relevant, d.h.:

$$E_f^{(0)} = E_i^{(0)} \pm \hbar\omega + O(\hbar\varepsilon). \quad (12.90)$$

Gilt  $E_f^{(0)} = E_i^{(0)} + \hbar\omega$ , so **absorbiert** das System die Energie  $\hbar\omega$  von einer äußeren Quelle. Für  $E_f^{(0)} = E_i^{(0)} - \hbar\omega$  **emittiert** das System die Energie  $\hbar\omega$ .

Falls der Übergang zu einem Zustand im kontinuierlichen Spektrum erfolgt, dann liefert eine analoge Diskussion wie oben:

$$P_{i \rightarrow \Delta\alpha}^{(1)}(t) = \int_{\Delta\alpha} d\alpha |\langle \psi_{E_f^{(0)}, \alpha} | V | \psi_i \rangle|^2 \varrho_\alpha(E_f^{(0)}) \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \frac{\exp(2\varepsilon t)}{(E' - E_i^{(0)} - \hbar\omega)^2 + \hbar^2 \varepsilon^2}, \quad (12.91)$$

wobei weiter  $E_f^{(0)} = E_i^{(0)} \pm \hbar\omega$  gilt. (Dabei wurden die Interferenzterme vernachlässigt und wieder  $\varepsilon \ll |\omega_{fi}|$  verwendet.) Damit ergibt sich Fermis Goldene Regel für den Fall periodischer Störungen:

$$\omega_{i \rightarrow \alpha}^{(1)} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_{E_f^{(0)}, \alpha} | V | \psi_i \rangle|^2 \varrho_\alpha(E_f^{(0)}) \Big|_{E_f^{(0)} = E_i^{(0)} \pm \hbar\omega}. \quad (12.92)$$

### 12.5.4 Störung eines Atoms durch eine ebene Lichtwelle. Auswahlregeln

Wir betrachten ein Atom mit  $Z$  Elektronen im **äußeren** elektromagnetischen Feld<sup>10</sup>, beschrieben durch das Vektorpotential  $\vec{A}(\vec{x}, t)$  in **Coulombbeichung**, d.h.  $\nabla \vec{A} = 0$  und  $A^0 = 0$ . Im nächsten Abschnitt wird gezeigt, daß sich der folgendene Hamiltonian als nichtrelativistischer Grenzfall der relativistischen Dirac-Theorie ergibt :

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^Z \frac{1}{2m} \left( \hat{\vec{p}}_{(i)} - e \vec{A}(\vec{x}_{(i)}, t) \right)^2 + V_C - \sum_{i=1}^Z \frac{e}{m} \hat{\vec{S}}_{(i)} \cdot \vec{B}(\vec{x}_{(i)}, t). \quad (12.93)$$

Dabei bezeichnet  $V_C$  die Coulombwechselwirkung der Elektronen mit dem Kern und die Wechselwirkung zwischen den Elektronen. Um die Störungstheorie anwenden zu können, unterstellen wir, daß das elektromagnetische Feld hinreichend schwach ist. Dann können wir den quadratischen Term  $e^2 \vec{A}^2$  weglassen und unter Verwendung der Coulombbeichung ergibt sich

$$\hat{H}' = \hat{H}_0 + \hat{H}(t),$$

mit

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= - \sum_{i=1}^Z \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{(i)} + V_C \\ \hat{H}_1(t) &= - \frac{e}{m} \sum_{i=1}^Z \left( \vec{A}(\vec{x}_{(i)}, t) \cdot \hat{\vec{p}}_{(i)} + \hat{\vec{S}}_{(i)} \cdot \left( \nabla \times \vec{A}(\vec{x}_{(i)}, t) \right) \right). \end{aligned} \quad (12.94)$$

Sei das äußere Feld (einer zunächst monochromatischen, ebenen Welle) durch das Potential

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \frac{a}{k} \vec{\varepsilon} \cos(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x})$$

gegeben. Dabei ist  $\vec{\varepsilon}$  der Polarisationsvektor und  $\vec{k}$  der Wellenvektor, mit  $|\vec{\varepsilon}| = 1$ ,  $\omega = kc$ ,  $k = |\vec{k}|$ . Der Koeffizient  $a = a(\omega)$  ist für den Fall einer monochromatischen Welle konstant. Aus der Coulombbeichung folgt

$$\vec{\varepsilon} \cdot \vec{k} = 0.$$

Wir berechnen das zugehörige elektromagnetische Feld:

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{x}, t) &= - \frac{\partial}{\partial t} \vec{A} = \vec{\varepsilon} a c \sin(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x}) \\ \vec{B}(\vec{x}, t) &= \nabla \times \vec{A} = - \frac{\vec{\varepsilon} \times \vec{k}}{k} a \sin(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x}). \end{aligned}$$

<sup>10</sup>Wir arbeiten im weiteren konsequent im SI-System

Damit ergibt sich:

$$\begin{aligned}\hat{H}_1(t) &= -\frac{e a}{m k} \sum_{i=1}^Z \left\{ \vec{\varepsilon} \cdot \hat{\vec{p}}_{(i)} \cos(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x}_{(i)}) - \frac{\hbar}{2} \hat{\vec{\sigma}}_{(i)} \cdot (\vec{\varepsilon} \times \vec{k}) \sin(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x}_{(i)}) \right\} \\ &= -\frac{e a c}{2 m \omega} \sum_{i=1}^Z \left\{ \vec{\varepsilon} \cdot \hat{\vec{p}}_{(i)} - \frac{\hbar}{2 i} \hat{\vec{\sigma}}_{(i)} \cdot (\vec{\varepsilon} \times \vec{k}) \right\} e^{-i \vec{k} \cdot \vec{x}_{(i)}} e^{i \omega t} \\ &\quad - \frac{e a c}{2 m \omega} \sum_{i=1}^Z \left\{ \vec{\varepsilon} \cdot \hat{\vec{p}}_{(i)} + \frac{\hbar}{2 i} \hat{\vec{\sigma}}_{(i)} \cdot (\vec{\varepsilon} \times \vec{k}) \right\} e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}_{(i)}} e^{-i \omega t},\end{aligned}$$

d.h., in den Bezeichnungen von Abschnitt 12.5.3 ist

$$V = -\frac{e a c}{2 m \omega} \sum_{i=1}^Z \left\{ \vec{\varepsilon} \cdot \hat{\vec{p}}_{(i)} + \frac{\hbar}{2 i} \hat{\vec{\sigma}}_{(i)} \cdot (\vec{\varepsilon} \times \vec{k}) \right\} e^{-i \vec{k} \cdot \vec{x}_{(i)}} = -\frac{e a c}{2 m \omega} \sum_{i=1}^Z \vec{\varepsilon} \cdot \left\{ \hat{\vec{p}}_{(i)} + \frac{\hbar}{2 i} \vec{k} \times \hat{\vec{\sigma}}_{(i)} \right\} e^{-i \vec{k} \cdot \vec{x}_{(i)}}. \quad (12.95)$$

Wir erhalten also für einen Übergang zwischen **diskreten** Energieniveaus  $E_i^{(0)}$  und  $E_f^{(0)}$ :

$$\omega_{i \rightarrow f}^{(1)} = \frac{2 \pi}{\hbar^2} \frac{e^2 a^2 c^2}{4 m^2 \omega^2} \left| \left\langle \psi_f \left| \sum_{j=1}^Z e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}_{(j)}} \vec{\varepsilon} \cdot \left( \hat{\vec{p}}_{(j)} + \frac{\hbar}{2 i} \vec{k} \times \hat{\vec{\sigma}}_{(j)} \right) \right| \psi_i \right\rangle \right|^2 \delta(\omega - \omega_{if}). \quad (12.96)$$

Ein zusätzlicher Faktor  $\frac{1}{\hbar}$  kommt aus der Umrechnung von  $\delta(E - E_{if})$  in  $\delta(\omega - \omega_{if})$  hinzu. Wir gehen nun zu einer realistischeren Beschreibung der einfallenden Welle über.

- i) Das Strahlungsfeld wird eine Überlagerung mehrerer Frequenzen enthalten, über die zu integrieren ist <sup>11</sup>. Unter Verwendung der mittleren Energiedichte des Strahlungsfeldes,

$$e(\omega) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t dt \frac{1}{2} \left( \epsilon_0 \vec{E}^2 + \frac{1}{\mu_0} \vec{B}^2 \right) = \frac{a^2(\omega) \epsilon_0 c^2}{2}, \quad (12.97)$$

erhält man nach Integration von (12.96) über  $\omega$

$$\omega_{i \rightarrow f}^{(1)} = C(\omega_{if}) |\vec{\varepsilon} \cdot \vec{\xi}_{if}|^2, \quad (12.98)$$

mit

$$C(\omega_{if}) = \frac{\pi}{\epsilon_0 \hbar^2 m^2 \omega_{if}^2} e(\omega_{if})$$

und

$$\vec{\xi}_{if} = e \left\langle \psi_f \left| \sum_{j=1}^Z e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}_{(j)}} \left( \hat{\vec{p}}_{(j)} + \frac{\hbar}{2 i} \vec{k} \times \hat{\vec{\sigma}}_{(j)} \right) \right| \psi_i \right\rangle.$$

- ii) In realistischen Situationen wird die einfallende Welle nicht polarisiert sein. Wir mitteln deshalb über die Polarisierungen: Die Polarisationsvektoren<sup>12</sup> in der Ebene senkrecht zu  $\vec{k}$  seien  $(\vec{e}_\alpha)$ ,  $\alpha = 1, 2$ . Es gilt:

$$\vec{e}_\alpha \cdot \vec{e}_\beta = \delta_{\alpha\beta}, \quad \vec{e}_\alpha \cdot \vec{k} = 0.$$

<sup>11</sup>Eigentlich sind die Integrale über die Frequenzen von vornherein – auf dem Niveau des elektromagnetischen Potentials – zu berücksichtigen, aber im vorliegenden Falle führt unsere etwas vereinfachte Vorgehensweise zum gleichen Resultat

<sup>12</sup>wir rechnen mit reellen Polarisationsvektoren, also mit linearen Polarisierungen. Völlig analog behandelt man elliptische Polarisierungen, für die diese Vektoren komplex sind.

Mit der Bezeichnung  $\vec{\xi}_{if} \equiv e \vec{d}$  haben wir  $\omega_{i \rightarrow f}^{(1)} = e^2 C(\omega) |\vec{\varepsilon} \cdot \vec{d}|^2$ . Bei der Mittelung über die zwei Polarisationen ist nun  $|\vec{\varepsilon} \cdot \vec{d}|^2$  zu ersetzen durch

$$\frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^2 |\vec{\varepsilon}_\alpha \cdot \vec{d}|^2 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{i,j=1}^3 (e_\alpha)_i (e_\alpha)_j d_i d_j^* = \frac{1}{2} \left( \vec{d} \cdot \vec{d}^* - \frac{(\vec{k} \cdot \vec{d})(\vec{k} \cdot \vec{d}^*)}{k^2} \right),$$

wobei

$$\sum_{\alpha=1}^2 (e_\alpha)_i (e_\alpha)_j = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2}$$

verwendet wurde. Schließlich nehmen wir an, daß alle Einfallrichtungen auftreten können. Dann haben wir noch über alle Raumwinkel im Impulsraum zu mitteln. Das Ergebnis dieser beiden Mittelungen lautet:

$$\omega_{i \rightarrow f}^{(1)} = \frac{C(\omega_{if})}{8\pi} \int d\Omega \left( \vec{\xi}_{if} \cdot \vec{\xi}_{if}^* - \frac{(\vec{k} \cdot \vec{\xi}_{if})(\vec{k} \cdot \vec{\xi}_{if}^*)}{k^2} \right) \quad (12.99)$$

Wir diskutieren (12.99) in niedrigster Ordnung:

- (i)  $\psi_i$  und  $\psi_f$  sind nichtverschwindend für Abstände von der Größenordnung des Atomdurchmessers,  $R \sim 10^{-8} \text{ cm}$ . Die Wellenlänge des absorbierten (oder emittierten) Lichtes ist  $\lambda \sim 10^{-5} \text{ cm}$ , d.h.:  $e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}(j)}$  ist auf dieser Skala sehr langsam veränderlich und kann deshalb in niedrigster Näherung gleich 1 gesetzt werden. (In der Reihenentwicklung von  $e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}(j)}$  treten nach 1 immer höhere Potenzen von  $\vec{k} \cdot \vec{x}(j) \sim \frac{2\pi}{\lambda} R \sim 10^{-3}$  auf.)
- (ii) Das Verhältnis der elektrischen und magnetischen Terme ist

$$\left| \frac{\langle \psi_f | \frac{\hbar}{2i} \vec{k} \times \hat{\sigma} | \psi_i \rangle}{\langle \psi_f | \hat{p} | \psi_i \rangle} \right| \sim \frac{\hbar k}{\hbar R} = \frac{2\pi R}{\lambda} \sim 10^{-3}.$$

In niedrigster Näherung können die magnetischen Beiträge also vernachlässigt werden.

Mit diesen Näherungen ergibt sich für  $\vec{\xi}_{if}$ :

$$\vec{\xi}_{if}^{\mathcal{D}} = e \left\langle \psi_f \left| \sum_{j=1}^Z \hat{p}^{(j)} \right| \psi_i \right\rangle,$$

und mit

$$\sum_{j=1}^Z \hat{p}^{(j)} = \frac{im}{\hbar} \left[ \hat{H}_0, \sum_{j=1}^Z \hat{x}^{(j)} \right]$$

erhalten wir

$$\vec{\xi}_{if}^{\mathcal{D}} = im \omega_{if} \left\langle \psi_f \left| \sum_{j=1}^Z e^{i\vec{x}(j)} \right| \psi_i \right\rangle. \quad (12.100)$$

Offensichtlich ist  $e \sum_{j=1}^Z \hat{x}^{(j)}$  das **elektrische Dipolmoment des Elektronensystems**. Durch Einsetzen von (12.100) in die Gleichung (12.99) erhalten wir die folgende gemittelte Übergangsrate in der **Dipolnäherung**:

$$\omega_{if}^{(1)} = \frac{\pi}{\epsilon_0 \hbar^2 m^2 \omega_{if}^2} e(\omega_{if}) \frac{1}{8\pi} \int d\Omega \left( \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) (\xi_{if}^{\mathcal{D}})_i (\xi_{if}^{\mathcal{D}})_j^*.$$

Verwenden wir noch die Identität

$$\frac{1}{4\pi} \int d\Omega \frac{k_i k_j}{k^2} = \frac{1}{3} \delta_{ij},$$

so ergibt sich:

$$\omega_{if}^{(1)} = \frac{1}{3} \frac{\pi}{\hbar^2 \epsilon_0} e(\omega_{if}) \vec{\xi}_{if}^D \cdot \vec{\xi}_{if}^{D*}. \quad (12.101)$$

### Bemerkungen 12.13

- (i) Die Energiedichte  $\varrho$  der Endzustände in der Goldenen Regel ist also hier durch die Energiedichte des elektromagnetischen Strahlungsfeldes gegeben. Liegt zum Anfangszeitpunkt Gleichgewicht des elektromagnetischen Feldes mit einem schwarzen Strahler der Temperatur  $T$  vor, so kann man  $e(\omega_{if})$  aus dem Planckschen Gesetz einsetzen:

$$e(\omega_{if}) = \frac{\hbar \omega_{if}^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\hbar \omega_{if}/kT} - 1}.$$

- (ii) Verwenden wir, wie in Abschnitt 12.2.3, Anfangs- bzw. Endzustände der Form  $|\{\lambda_i\}, L, S, J, J_3\rangle$  und bilden den irreduziblen Tensoroperator 1. Stufe

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\pm 1}^1 &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{j=1}^Z \left( \hat{x}_1^{(j)} \pm i \hat{x}_2^{(j)} \right) \\ \hat{T}_0^1 &= \sum_j \hat{x}_3^{(j)}, \end{aligned}$$

so liefert das Wigner-Eckart-Theorem

$$\langle \{\lambda'_i\}, L', S', J', J'_3 | \hat{T}_q^1 | \{\lambda_i\}, L, S, J, J_3 \rangle = \langle J', J'_3 | 1, q, J, J_3 \rangle \langle \{\lambda'_i\}, L', S' || \hat{T}^1 || \{\lambda_i\}, L, S \rangle$$

folgende **Auswahlregeln**<sup>13</sup>:

- i)  $\Delta J_3 = 0, \pm 1$
- ii)  $\Delta J = 0, \pm 1$
- iii) Der Übergang  $J = 0 \rightarrow J' = 0$  ist verboten.
- iv) Anfangs- und Endzustände müssen verschiedene Parität haben, da sie Eigenzustände des Paritätsoperators sind und Dipoloperatoren bei Spiegelung ihr Vorzeichen ändern.

Vernachlässigt man die Spin-Bahn-Kopplung, so ergeben sich zusätzlich folgende Regeln:

- v)  $\Delta S = 0$
- vi)  $\Delta L = 0, \pm 1$

---

<sup>13</sup>vgl. Hausaufgabe Nr. 13

# Kapitel 13

## Relativistische Quantenmechanik

### 13.1 Spezielle Relativitätstheorie

Wir erinnern an **Einsteins spezielles Relativitätsprinzip**: Die Gesetze der Mechanik und der Elektrodynamik sind unabhängig von der Wahl des Inertialsystems.

Postuliert man dieses Prinzip und verwendet man, daß die Lichtgeschwindigkeit in allen Inertialsystemen gleich ist, so ergibt sich als Modell der **Raumzeit** der **Minkowskiraum**  $(\mathcal{M}, g)$ . Dabei ist  $\mathcal{M}$  ein 4-dimensionaler Vektorraum und  $g$  ist eine pseudo-euklidische Metrik, also ein 2-fach kovarianter symmetrischer Tensor

$$\mathcal{M} \times \mathcal{M} \ni (u, v) \mapsto g(u, v) \in \mathbb{R}$$

der Signatur  $(+, -, -, -)$ . In der Standardbasis  $\{e_\mu\}$  von  $\mathcal{M}$  ist  $g = g_{\mu\nu} e^{\mu*} \otimes_s e^{\nu*}$ , mit

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ 0 & & & -1 \end{pmatrix}.$$

Dabei bezeichnet  $\{e^{\mu*}\}$  die zu  $\{e_\mu\}$  duale Basis. Für beliebige Vektoren  $u, v \in \mathcal{M}$  gilt

$$g(u, v) = g_{\mu\nu} u^\mu v^\nu \equiv u^0 v^0 - \sum_{k=1}^3 u^k v^k,$$

mit  $u = u^\mu e_\mu$  und  $v = v^\nu e_\nu$ . Offensichtlich kann man  $g$  auch als Abbildung von  $\mathcal{M}$  in den Dualraum auffassen,  $g : \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{M}^*$ . Da  $g$  als Bilinearform nicht ausgeartet ist, ist dies ein Isomorphismus, der jedem Vektor  $u$  einen Kovektor zuordnet. In Koordinaten gilt

$$x^\mu \mapsto x_\nu = g_{\mu\nu} x^\mu$$

und man sagt, der Index von  $x$  wurde mit der Metrik gesenkt. Der zu obigem Isomorphismus inverse Operator  $g^{-1} : \mathcal{M}^* \rightarrow \mathcal{M}$  ist in der Basis gegeben durch  $g^{-1} = g^{\mu\nu} e_\mu \otimes_s e_\nu$  und dient zum Heben von Indizes:

$$x_\mu \mapsto x^\nu = g^{\mu\nu} x_\mu.$$

Wegen  $g \circ g^{-1} = \text{id}$  gilt natürlich  $g_{\mu\nu} g^{\nu\sigma} = \delta^{\sigma}_\mu$ . Als Matrix ist  $g^{\mu\nu}$  also identisch mit  $g_{\mu\nu}$ . Der fundamentale Unterschied zur Euklidischen Metrik besteht nun darin, daß ein Vektor der Länge Null im Sinne von  $g$  keineswegs verschwinden muß. Die Gleichung  $g(u, u) = 0$  ist die invariante Bedingung dafür, daß durch den Vektor  $u^\mu = (c \Delta t, \Delta x^k)$  verknüpfte Ereignisse durch ein Lichtsignal verbunden sind. Wir haben die folgenden Klassen von Vektoren in  $\mathcal{M}$ :

$$g(u, u) \begin{cases} > 0 & u - \text{zeitartig} \\ = 0 & u - \text{lichtartig} \\ < 0 & u - \text{raumartig.} \end{cases}$$

Ist ein Punkt  $P$  im Minkowskiraum fixiert, so bilden die von  $P$  ausgehenden lichtartigen Vektoren (auch Nullvektoren genannt) den **Lichtkegel** in  $P$ . Wählt man noch eine Zeitrichtung, so ergibt sich die in Abbildung 13.1 dargestellte **Kausalstruktur** der Minkowski-Raumzeit.

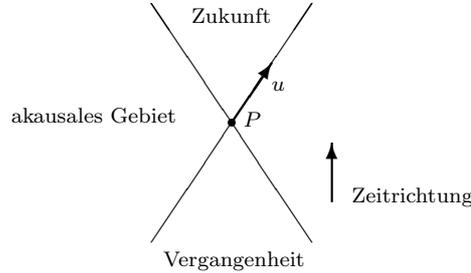


Abbildung 13.1: Kausalstruktur der Minkowski-Raumzeit

Wir erinnern an die **Transformationsgruppe**, die  $g$  invariant läßt: Dabei beschränken wir uns auf homogene (lineare) Transformationen,

$$\mathcal{M} \ni x \mapsto x' = \Lambda x \in \mathcal{M}.$$

Aus der Invarianzforderung

$$g(\Lambda u, \Lambda v) = g(u, v),$$

für alle  $u, v \in \mathcal{M}$ , folgt sofort

$$\Lambda^T g \Lambda = g.$$

In Koordinatenschreibweise ist die Transformation gegeben durch  $x^\mu \mapsto x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu$  und wir erhalten

$$g_{\mu\nu} \Lambda^\mu{}_\rho \Lambda^\nu{}_\kappa = g_{\rho\kappa}. \quad (13.1)$$

Die durch diese Bedingung definierte Gruppe heißt **Lorentzgruppe** und wird mit  $L$  bezeichnet. Da  $\det g = -1$  ist, gilt  $(\det \Lambda)^2 = 1$ , d.h.  $\det \Lambda = \pm 1$ . Außerdem folgt aus (13.1) für  $\rho = \kappa = 0$ :

$$(\Lambda^0{}_0)^2 - \sum_{j=1}^3 (\Lambda^j{}_0)^2 = 1,$$

d.h.: entweder  $\Lambda^0{}_0 \geq 1$  oder  $\Lambda^0{}_0 \leq -1$ . Damit zerfällt die Lorentzgruppe in mehrere Zusammenhangskomponenten. Von besonderer Bedeutung ist die Gruppe der **eigentlichen, orthochronen Lorentztransformationen**, definiert durch

$$L_+^\uparrow = \{\Lambda \in L : \det \Lambda = 1, \Lambda^0{}_0 \geq 1\} \simeq SO_+(3, 1). \quad (13.2)$$

Die explizite Gestalt von  $\Lambda^\mu{}_\nu$  für einen Lorentz-Boost mit Geschwindigkeit  $v$  in  $x^1$ -Richtung ist

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} & -\frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}} & 0 & 0 \\ -\frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}} & \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \beta = \frac{v}{c},$$

also

$$ct' = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} ct - \frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}} x^1, \quad x'^1 = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} x^1 - \frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}} ct, \quad x'^2 = x^2, \quad x'^3 = x^3.$$

Wir erinnern an die Formulierung der **Maxwell–Theorie** in dieser Sprache. Die Maxwellschen Gleichungen haben (im SI–System) die folgende Form:

$$\begin{aligned}\nabla \times \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} &= 0, & \nabla \cdot \vec{B} &= 0, \\ \nabla \times \vec{H} - \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} &= \vec{j}, & \nabla \cdot \vec{D} &= \varrho.\end{aligned}$$

Hinzu kommen Materialgleichungen, die im einfachsten Falle durch

$$\vec{D} = \varepsilon \varepsilon_0 \vec{E}, \quad \vec{B} = \mu \mu_0 \vec{H}$$

gegeben sind. Dabei gilt  $\varepsilon_0 \mu_0 = 1/c^2$ . Berechnet man, unter Verwendung des speziellen Relativitätsprinzips, die (Lorentz–)Transformationsgesetze der Felder, so wird die Definition der folgenden relativistischen (Lorentz–kovarianten) Felder nahegelegt:

$$f_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{c}E_x & \frac{1}{c}E_y & \frac{1}{c}E_z \\ -\frac{1}{c}E_x & 0 & -B_z & B_y \\ -\frac{1}{c}E_y & B_z & 0 & -B_x \\ -\frac{1}{c}E_z & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}, \quad h_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & {}^cD_x & {}^cD_y & {}^cD_z \\ -{}^cD_x & 0 & -H_z & H_y \\ -{}^cD_y & H_z & 0 & -H_x \\ -{}^cD_z & -H_y & H_x & 0 \end{pmatrix}.$$

Dies sind antisymmetrische, kovariante Tensoren zweiter Ordnung,  $f_{\mu\nu}$  heißt Feldstärketensor und  $h_{\mu\nu}$  Erregungstensor. Wir definieren den Stromdichtevierervektor durch

$$j^\mu = (c\varrho, \vec{j}).$$

Die Transformationsgesetze dieser Felder unter Lorentz–Transformationen lauten:

$$f'^{\mu\nu} = \Lambda^\mu{}_\varrho \Lambda^\nu{}_\kappa f^{\varrho\kappa}, \quad j'^\mu = \Lambda^\mu{}_\gamma j^\nu,$$

$h^{\mu\nu}$  transformiert sich genauso wie  $f^{\mu\nu}$ . Man erhält die folgende, explizit Lorentz–kovariante Form der Maxwellschen Gleichungen:

$$\partial_\mu f_{\nu\lambda} + \partial_\nu f_{\lambda\mu} + \partial_\lambda f_{\mu\nu} = 0 \tag{13.3}$$

$$\partial_\mu h^{\mu\nu} = j^\nu. \tag{13.4}$$

Aus (13.3) folgt die Existenz des elektromagnetischen Potentials  $A_\mu$ , mit  $f_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ . Mit  $A^\mu = (A^0, \vec{A}) \equiv (\frac{\varphi}{c}, \vec{A})$  gilt

$$\vec{E} = -\nabla\varphi - \frac{\partial}{\partial t}\vec{A}, \quad \vec{B} = \nabla \times \vec{A}.$$

Offensichtlich ist  $f_{\mu\nu}$  invariant unter **Eichtransformationen**,  $A_\mu \rightarrow A'_\mu = A_\mu + \partial_\mu \lambda$ , wobei  $\lambda$  eine beliebige Funktion auf  $\mathcal{M}$  ist. Zur Eichfixierung wird meist die **Lorentzbeziehung**

$$\partial_\mu A^\mu = 0 \tag{13.5}$$

gewählt. Auf einer Hyperebene  $t = \text{const}$  kann man die **Coulombbeziehung**

$$\text{div } \vec{A} = 0$$

auflegen. Dann wird  $A^0$  durch die Dynamik der Ladungen und Ströme bestimmt. Im Vakuum gilt  $f_{\mu\nu} = \mu_0 h_{\mu\nu}$  und damit kann man (13.4) mit Hilfe des Potentials aufschreiben:

$$\frac{1}{\mu_0} (\partial_\mu \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu (\partial_\mu A^\mu)) = j^\nu.$$

Unter Verwendung der Lorentzzeichnung ergibt sich

$$\square A^\nu = \mu_0 j^\nu, \quad (13.6)$$

wobei

$$\square \equiv \partial_\mu \partial^\mu = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x^k{}^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta$$

den **d'Alembert-Operator** bezeichnet. Dies ist eine inhomogene Wellengleichung.

Schließlich erinnern wir noch an die Gestalt der Hamiltonfunktion für ein geladenes Teilchen im elektromagnetischen Feld:

$$H = ecA_0 + \sqrt{c^2 (\vec{p} - e\vec{A})^2 + m^2 c^4}. \quad (13.7)$$

## 13.2 Die Klein–Gordon–Gleichung

Im Jahre 1926 schlug eine ganze Reihe von Autoren (Schrödinger, Gordon, Fock, Klein, Kudar, de Donder, Van Dungen) eine relativistische Wellengleichung vor, die heute als **Klein–Gordon–Gleichung** bekannt ist. Diese kann man folgendermaßen nahelegen: Für ein freies relativistisches Teilchen gilt:

$$E^2 = c^2 \vec{p}^2 + m^2 c^4. \quad (13.8)$$

Wir setzen die Quantisierungsvorschriften  $E = i\hbar \partial_t$  und  $\vec{p} = -i\hbar \nabla$  ein und wirken mit dem so entstehenden Operator auf die Wellenfunktion  $\phi$ :

$$-\hbar^2 \partial_t^2 \phi = -\hbar^2 c^2 \Delta \phi + m^2 c^4 \phi.$$

Division durch  $\hbar^2 c^2$  liefert die **Klein–Gordon–Gleichung**:

$$\left( \square + \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \phi(\vec{x}, t) = 0. \quad (13.9)$$

### Bemerkungen 13.1

- (i) Wir nehmen an, daß  $\phi$  ein Lorentz–Skalar ist, d.h. die Darstellung der Lorentzgruppe im Raum der Wellenfunktionen ist

$$(D(\Lambda)\phi)(x) := \phi(\Lambda^{-1}x), \quad \Lambda \in L_+^\uparrow.$$

Damit beschreibt  $\phi$  ein freies relativistisches Spin–0–Teilchen. In Abhängigkeit davon, ob  $\phi$  komplex oder reell gewählt wird, beschreibt es ein Teilchen mit oder ohne Ladung, (darauf kommen wir noch zurück). Nun gilt mit  $x' = \Lambda x$  und  $\phi' \equiv D(\Lambda)\phi$ :

$$\phi'(\vec{x}', t') = \phi(\vec{x}, t)$$

und damit ist Gleichung (13.9) offenbar **relativistisch–invariant**.

- (ii) Wir fragen uns, ob eine zur nichtrelativistischen Theorie analoge **Wahrscheinlichkeitsinterpretation** der Wellenfunktion existiert: Dazu multiplizieren wir (13.9) von links mit  $\phi^*$  und die komplex konjugierte Gleichung von links mit  $\phi$  und bilden die Differenz. Dies liefert

$$\phi^* \square \phi - \phi \square \phi^* = 0,$$

also

$$\partial_\mu (\phi^* \partial^\mu \phi - \phi \partial^\mu \phi^*) = 0.$$

Dies ist natürlich die **Kontinuitätsgleichung** für den erhaltenen Strom

$$j^\mu = \frac{i\hbar}{2m} (\phi^* \partial^\mu \phi - \phi \partial^\mu \phi^*),$$

(Die Konstante wurde so festgelegt, daß im nichtrelativistischen Grenzfall der richtige Strom herauskommt.) Für zeitliche und räumliche Komponenten erhalten wir mit  $x^0 \equiv ct$  und  $\nabla = \frac{\partial}{\partial x^k} = -\partial^k$ :

$$\begin{aligned} \varrho(\vec{x}, t) &= \frac{i\hbar}{2m c^2} (\phi^* \partial_t \phi - (\partial_t \phi^*) \phi) \\ \vec{j}(\vec{x}, t) &= \frac{\hbar}{2im} (\phi^* \nabla \phi - (\nabla \phi^*) \phi). \end{aligned} \quad (13.10)$$

Wir sehen, daß  $\varrho$  ist **nicht positiv definit** ist: Sei  $\phi$  eine Lösung zu den Anfangsbedingungen  $(\phi(\vec{x}, 0), \partial_t \phi(\vec{x}, 0))$ . Dann liefern die Anfangsbedingungen  $(\phi^*(\vec{x}, 0), \partial_t \phi^*(\vec{x}, 0))$  die Lösung  $\phi^*$  und diese ergibt  $\varrho$  mit umgekehrtem Vorzeichen. Wir folgern, daß  $\varrho$  im allgemeinen nicht als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden kann.

- ii) Wir suchen Lösungen von (13.9) in der Klasse der **ebenen Wellen**: also  $\phi(\vec{x}, t) = \exp(-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{x}))$ . In relativistisch invarianter Schreibweise ergibt sich:

$$\phi(x, t) = \exp(-\frac{i}{\hbar} p_\mu x^\mu)$$

und Einsetzen in (13.9) liefert:

$$p_\mu p^\mu - \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 = 0,$$

also

$$p^0 = \pm \sqrt{\vec{p}^2 + m^2 c^2}. \quad (13.11)$$

Es existieren also Lösungen mit **negativer Energie**.

Durch diese Beobachtungen war die Klein-Gordon-Gleichung zunächst in Mißkredit geraten, bis Pauli und Weißkopf 1934 vorschlugen,  $e j^\mu$  als **elektromagnetischen** Stromdichtevierervektor und folglich  $\varrho$  als elektrische Ladungsdichte zu interpretieren. Dann beschreibt  $\partial_\mu j^\mu = 0$  Ladungserhaltung, anstelle von Wahrscheinlichkeitserhaltung. Verfolgt man diesen Zugang konsequent, so wird man zwangsläufig zu einer Vielteilchentheorie, also zur Quantenfeldtheorie geführt. In diesem Rahmen ist (13.9) als klassische Feldgleichung zu interpretieren, die der 2. Quantisierung unterworfen wird. Wir kommen in den letzten beiden Abschnitten dieses Kapitels auf dieses Konzept zurück.

Zunächst zeigen wir aber, daß man für das freie Klein-Gordon-Teilchen eine konsistente 1-Teilchentheorie aufbauen kann: Sei ein Teilchen zum Zeitpunkt  $t = 0$  im Zustand mit **positiver Energie**  $E = +c\sqrt{\vec{p}^2 + m^2 c^2}$ . Falls keine Wechselwirkung stattfindet, bleibt das Teilchen in diesem Energiezustand, d.h. wir haben einen stationären Zustand

$$\phi(x, t) = \exp(-\frac{i}{\hbar} Et) u(\vec{x}).$$

Einsetzen in  $\varrho$  liefert:

$$\varrho = \frac{E}{mc^2} uu^* > 0.$$

Als quantenmechanischen Zustandsraum wählen wir den Raum der Lösungen von (13.9) mit **positiver Energie**. Um diesen genauer zu charakterisieren, gehen wir zur Fourierdarstellung über:

$$\phi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^4 k e^{ikx} \tilde{\phi}(k),$$

wobei  $kx \equiv k_\mu x^\mu$  bezeichnet wurde. Einsetzen dieser Darstellung in (13.9) liefert

$$\left( k_\mu k^\mu - \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \tilde{\phi}(k) = 0,$$

d.h., die Fouriertransformierte  $\tilde{\phi}(k)$  muß eine Distribution mit Träger auf der Fläche  $k^2 - (mc/\hbar)^2 = 0$  sein:

$$\tilde{\phi}(k) = \delta \left( k_\mu k^\mu - \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \varphi(k). \quad (13.12)$$

Dabei ist  $\varphi$  eine beliebige Funktion von  $k$ . Die Gleichung  $k^2 = \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^2$  beschreibt einen **zweischaligen Hyperboloiden** in der Minkowski-Raumzeit. Die **obere Massenschale**  $\Gamma_+$  dieses Hyperboloiden entspricht Lösungen mit positiver Energie. Diese können wir folgendermaßen darstellen:

$$\phi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^4k \delta(k^2 - \tilde{m}^2) \Theta(k^0) \phi(\vec{k}) e^{ikx}.$$

Mit

$$\delta(k^2 - \tilde{m}^2) = \frac{1}{2k^0} \left\{ \delta \left( k^0 - \sqrt{\vec{k}^2 + \tilde{m}^2} \right) + \delta \left( k^0 + \sqrt{\vec{k}^2 + \tilde{m}^2} \right) \right\}$$

ergibt sich

$$\phi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\Gamma_+} \frac{d^3k}{2k^0} e^{ikx} \phi(\vec{k}), \quad (13.13)$$

mit  $k^0 = \sqrt{\vec{k}^2 + \tilde{m}^2}$ . Wir erhalten mit  $\frac{d^3k}{2k^0}$  ein Lorentz-invariantes Maß auf der oberen Massenschale. Der 1-Teilchenhilbertraum für freie relativistische Klein-Gordon-Teilchen mit positiver Energie wird definiert als

$$\mathcal{H} = L^2 \left( \Gamma_+, \frac{d^3k}{2k^0} \right), \quad (13.14)$$

mit dem Lorentz-invarianten Skalarprodukt

$$(\psi, \varphi) := \int_{\Gamma_+} \frac{d^3k}{2k^0} \psi^*(\vec{k}) \varphi(\vec{k}), \quad k^0 = \sqrt{\vec{k}^2 + \tilde{m}^2}. \quad (13.15)$$

Die geometrischen Verhältnisse sind in Abbildung 13.2 dargestellt.

Wir betrachten nun ein geladenes Teilchen im äußeren elektromagnetischen Feld. Die Gestalt (13.7) der klassischen Hamiltonfunktion legt die folgende Modifizierung der Klein-Gordon-Gleichung nahe:

$$(i\hbar\partial_t - ecA_0)^2 \phi = c^2 \left( -i\hbar\nabla - e\vec{A} \right)^2 \phi + m^2 c^4 \phi,$$

also

$$\left\{ \frac{1}{c^2} \left( \partial_t + \frac{ie}{\hbar} A_0 \right)^2 - \left( \nabla - \frac{ie}{\hbar} \vec{A} \right)^2 + \tilde{m}^2 \right\} \phi = 0.$$

Dies ergibt:

$$\left( D_\mu D^\mu + \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \phi = 0, \quad (13.16)$$

wobei

$$D_\mu \phi = \left( \partial_\mu + \frac{ie}{\hbar} A_\mu \right) \phi$$

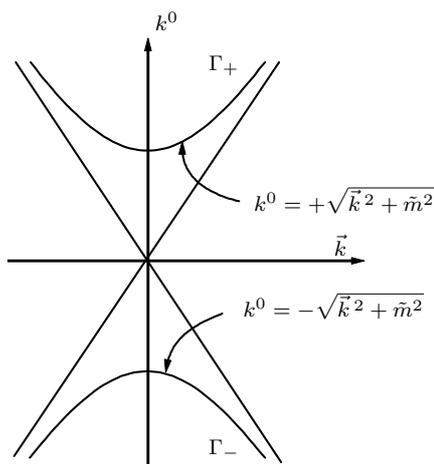


Abbildung 13.2: Lichtkegel sowie obere und untere Massenschale in der Minkowski-Raumzeit

die **kovariante Ableitung** von  $\phi$  bezüglich des Eichpotentials  $A_\mu$  bezeichnet. Man sagt, die kovariante Ableitung liefere die **minimale Kopplung** von Eichfeld und Materiefeld. Dies ist ein universelles Prinzip in der Eichfeldtheorie. Im vorliegenden Falle erhalten wir die folgende Kontinuitätsgleichung:

$$\partial_\mu(\phi^* D^\mu \phi - \phi (D^\mu \phi)^*) = 0,$$

also

$$\varrho = \frac{i\hbar}{2mc}(\phi^* D_0 \phi - (D_0 \phi)^* \phi) = \frac{i\hbar}{2mc^2}(\phi^* \partial_t \phi - (\partial_t \phi)^* \phi) - \frac{e}{mc} A_0 \phi^* \phi$$

und

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2im}(\phi^* \nabla \phi - (\nabla \phi)^* \phi).$$

### Bemerkungen 13.2

- (i) Eine konsistente 1-Teilchen-Interpretation ist selbst für ein zeitunabhängiges äußeres Feld  $A_\mu$  hier **nicht** möglich: Für eine stationäre Lösung der Form  $\phi(\vec{x}, t) = u(\vec{x}) \exp(-\frac{i}{\hbar} Et)$  ergibt sich

$$\varrho = \frac{E - ecA_0}{mc^2} uu^*.$$

Diese Größe kann für positive  $E$  negativ werden.

- (ii) Seien  $A_0 = 0$  und  $\vec{A} = \vec{A}(\vec{x})$ . Wir betrachten eine Lösung für ein Teilchen mit Ladung  $e$  mit positiver Energie,

$$i\hbar \partial_t \phi(e, +) = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 (-i\hbar \nabla - e\vec{A})^2} \phi(e, +)$$

und mit negativer Energie:

$$i\hbar \partial_t \phi(e, -) = -\sqrt{m^2 c^4 + c^2 (-i\hbar \nabla - e\vec{A})^2} \phi(e, -).$$

Wenn wir die Lösung mit negativer Energie komplex konjugieren, erhalten wir

$$i\hbar \partial_t \phi^*(e, -) = +\sqrt{m^2 c^4 + c^2 (+i\hbar \nabla - e\vec{A})^2} \phi^*(e, -). \quad (13.17)$$

Offenbar beschreibt diese Gleichung eine Lösung für ein Teilchen mit positiver Energie und einer Ladung  $-e$ , d.h.:

$$\phi^*(e, -) = c\phi(-e, +).$$

Wir erhalten durch **Ladungskonjugation** das **Antiteilchen** zum Teilchen beschrieben durch  $\phi$ . Auch diese Bemerkung deutet darauf hin, daß eine 1- Teilcheninterpretation problematisch ist. Zusammen mit einem Teilchen haben wir auch dessen Antiteilchen in der Theorie.

### 13.3 Die Dirac-Gleichung

Zur Nahelegung der Dirac-Gleichung (Dirac 1928) formulieren wir folgende, aus der Sicht der letzten Abschnitte natürliche Forderungen:

1. Man vermeide negative Wahrscheinlichkeitsdichten. Es sollten also keine zeitlichen Ableitungen in  $\varrho$  auftauchen. d.h. die gesuchte Gleichung sollte linear in der Zeitableitung sein.
2. Die Gleichung sollte relativistisch invariant sein, also sollten auch die räumlichen Ableitungen linear auftreten.
3. Wegen des Superpositionsprinzips sollte die Gleichung linear sein.
4. Für ein freies Teilchen sollte die relativistische Energie-Impuls-Relation erfüllt sein, d.h. die Wellenfunktion sollte die Klein-Gordon-Gleichung (13.9) erfüllen.

Wir bezeichnen  $P_\mu = i\partial_\mu$  und  $\tilde{m} \equiv \frac{m.c}{\hbar}$ . Dann hat (13.9) die Form:

$$(-P_\mu P^\mu + \tilde{m}^2) \psi(x) = 0.$$

Um zu einer in den Ableitungen linearen Gleichung zu kommen, "ziehen wir die Wurzel" aus dieser Gleichung im folgenden Sinne. Wir zerlegen

$$P_\mu P^\mu - \tilde{m}^2 = (P - \tilde{m})(P + \tilde{m})$$

und suchen  $P$  als Linearkombination der  $P_\mu$ 's,  $P = P_\mu \gamma^\mu$ . Dies liefert  $P_\mu P^\mu = P_\mu P_\nu \gamma^\mu \gamma^\nu$ , also

$$P_\mu P_\nu g^{\mu\nu} = \frac{1}{2} P_\mu P_\nu (\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu),$$

denn der antisymmetrische Anteil von  $\gamma^\mu \gamma^\nu$  verschwindet bei Verjüngung mit dem symmetrischen Tensor  $P_\mu P_\nu$ . Wir erhalten also

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}. \quad (13.18)$$

Dies ist die definierende Relation einer **Clifford-Algebra**. Für  $\mu \neq \nu$  müssen die  $\gamma^\mu$  anti-kommutieren. Sie können als keine Zahlen sein. Wir werden im folgenden Realisierungen dieser Algebra kennenlernen. Wir erhalten also

$$P_\mu P^\mu - \tilde{m}^2 = (i\gamma^\mu \partial_\mu + \tilde{m})(i\gamma^\nu \partial_\nu - \tilde{m})$$

und damit  $(\square + \tilde{m}^2)\psi = 0$  erfüllt ist, muß entweder

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu + \tilde{m}) \psi(x) = 0 \quad (13.19)$$

oder

$$(i\gamma^\nu \partial_\nu - \tilde{m}) \psi(x) = 0 \quad (13.20)$$

gelten. Wir zeigen im weiteren, daß diese beiden Gleichungen äquivalent sind, daß die  $\gamma^\mu$  durch  $4 \times 4$ -Matrizen realisiert werden und daß  $\psi$  eine natürliche Darstellung (Spinordarstellung) der universellen Überlagerungsgruppe der Lorentzgruppe trägt. Desweiteren wird sich zeigen, daß durch diese Gleichungen Teilchen mit Spin  $\frac{1}{2}$  beschrieben werden.

### 13.3.1 Die Clifford–Algebra der $\gamma$ -Matrizen

Wir diskutieren nur die elementaren, für das Weitere notwendigen Sachverhalte und verweisen auf die mathematische Spezialliteratur<sup>1</sup>

Sei  $V$  ein endlich-dimensionaler reeller Vektorraum mit einer nicht-ausgearteten symmetrischen Bilinearform  $g$  und sei  $\{e_i\}_{i=1}^n$  eine Basis in  $V$ . Die **reelle Cliffordalgebra**  $Cl(V, g)$  von  $(V, g)$  ist eine assoziative Algebra mit 1, multiplikativ erzeugt durch die Vektoren  $e_1, \dots, e_n$  mit den Relationen

$$e_i \cdot e_j + e_j \cdot e_i = 2g(e_i, e_j). \quad (13.21)$$

#### Bemerkungen 13.3

- i) Man zeigt, daß diese Definition unabhängig von der Wahl der Basis ist. Die abstrakte Definition der Cliffordalgebra lautet

$$Cl(V, g) := \mathcal{T}(V)/I_g(V), \quad (13.22)$$

wobei

$$\mathcal{T}(V) = \bigoplus_{r=0}^{\infty} \bigotimes^r V$$

die kontravariante Tensoralgebra über  $V$  und  $I_g(V)$  das durch die Elemente der Gestalt  $\{v \otimes v - g(v, v)1\}$  erzeugte zweiseitige Ideal ist.

- ii) Die  $\mathbb{Z}_2$ -Graduierung

$$\mathcal{T}^+ = \bigoplus_{k=0}^{\infty} \bigotimes^{2k} V, \quad \mathcal{T}^- = \bigoplus_{k=0}^{\infty} \bigotimes^{2k+1} V$$

induziert eine  $\mathbb{Z}_2$ -Graduierung der Clifford-Algebra. Sei  $\pi: \mathcal{T}(V) \rightarrow Cl(V, g)$  die natürliche Projektion und  $Cl^+(V, g) = \pi(\mathcal{T}^+)$ ,  $Cl^-(V, g) = \pi(\mathcal{T}^-)$ . Dann gilt

$$Cl(V, g) = Cl^+(V, g) \oplus Cl^-(V, g).$$

- iv) Offenbar bilden 1 und die Elemente  $e_{i_1} \cdot \dots \cdot e_{i_k}$  mit  $1 \leq k \leq m$ ,  $1 \leq i_1 \leq \dots \leq i_k \leq n$  aufgrund von Gleichung (13.21) eine Basis in  $Cl(V, g)$ . Daraus ergibt sich  $\dim Cl(V, g) = 2^n$ . Außerdem folgt, daß die Abbildung  $1 \mapsto 1$ ,  $e_{i_1} \cdot \dots \cdot e_{i_k} \mapsto e_{i_1} \wedge \dots \wedge e_{i_k}$  einen Vektorraum-Isomorphismus von  $Cl(V, g)$  auf die äußere Algebra  $\bigwedge(V^*)$  des Vektorraumes  $V$  liefert.

Wir betrachten die Komplexifizierung  $Cl(V, g)^{\mathbb{C}}$  der reellen Algebra  $Cl(V, g)$ . Dies ist die komplexe assoziative Algebra, die man erhält, wenn man das Tensorprodukt  $Cl(V, g) \otimes \mathbb{C}$  von reellen Algebren mit der skalaren Multiplikation  $z(x \otimes w) := x \otimes zw$ ,  $z \in \mathbb{C}$ , versieht. Bezeichne  $M(l, \mathbb{C})$  die assoziative Algebra der komplexen  $(l \times l)$ -Matrizen. Man beweist die folgenden Isomorphismen:

$$Cl(V, g)^{\mathbb{C}} \cong M(2^k, \mathbb{C}) \quad \text{für } \dim V = 2k, \quad (13.23)$$

$$Cl(V, g)^{\mathbb{C}} \cong M(2^k, \mathbb{C}) \oplus M(2^k, \mathbb{C}), \quad \text{für } \dim V = 2k + 1. \quad (13.24)$$

Im uns interessierenden Beispiel des Minkowski-Raumes  $(\mathcal{M}, g)$  gilt  $\dim \mathcal{M} = 4$ , also  $k = 2$ , und folglich ist die komplexifizierte Clifford-Algebra  $Cl(\mathcal{M}, g)^{\mathbb{C}}$  des Minkowskiraumes isomorph zur Algebra der komplexen  $4 \times 4$ -Matrizen,

$$Cl(\mathcal{M}, g)^{\mathbb{C}} \cong M(4, \mathbb{C}). \quad (13.25)$$

Die  $\gamma^\mu$  können also in der Tat als  $4 \times 4$ -Matrizen realisiert werden. Als Basis in der reellen Clifford-Algebra erhalten wir

$$1, \quad \gamma^{\mu_1} \cdot \dots \cdot \gamma^{\mu_k}, \quad 1 \leq k \leq n,$$

<sup>1</sup>Th. Friedrich: *Dirac-Operationen in der Riemannschen Geometrie*, Advanced Lectures in Mathematics, Vieweg&Sohn  
H. Baum: *Spin-Strukturen und Dirac-Operatoren über pseudo-Riemannschen Mannigfaltigkeiten*, Teubner-Texte 1981

und es gilt  $\dim Cl(\mathcal{M}, g) = 2^4 = 16$ . Die Wellenfunktion  $\psi$  nimmt also Werte im  $\mathbb{C}^4$ ,

$$\psi : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{C}^4,$$

und heißt in der physikalischen Terminologie **Bispinor** oder Bispinorfeld. Es gibt verschiedene konkrete Realisierungen des Isomorphismus (13.25). Je zwei davon unterscheiden sich offenbar um einen Automorphismus von  $M(4, \mathbb{C})$ . Alle Automorphismen von  $M(4, \mathbb{C})$  sind innere Automorphismen, d. h., sie sind von der Gestalt  $\gamma^\mu \mapsto A\gamma^\mu A^{-1}$  mit einem invertierbaren  $A \in M(4, \mathbb{C})$ . In der physikalischen Literatur wird dieser Sachverhalt mitunter als Pauli-Theorem bezeichnet. Man kann die  $\gamma$ -Matrizen **unitär** wählen. Die folgende unitäre Darstellung ist für viele Zwecke nützlich:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^k = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma^k \\ \sigma^k & 0 \end{pmatrix}. \quad (13.26)$$

Der Übergang zwischen verschiedenen unitären Realisierungen ist dann offensichtlich durch unitäre Transformationen  $\gamma^\mu \mapsto U\gamma^\mu U^{-1}$  gegeben. In obiger Darstellung ist der sogenannte **Chiralitäts-Operator**

$$\gamma^5 := i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix} \quad (13.27)$$

diagonal. Sie heißt deshalb **chirale** Darstellung. Offenbar hat  $\gamma^5$  die Eigenwerte  $\pm 1$  und wir können den  $\mathbb{C}^4$  in die direkte Summe der Eigenunterräume zerlegen:

$$\mathbb{C}^4 = \Delta^+ \oplus \Delta^-,$$

Dann haben Bispinoren zu den Eigenwerten  $+1$  bzw.  $-1$  die Gestalt

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ 0 \end{pmatrix} \in \Delta^+, \quad \psi = \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix} \in \Delta^-.$$

Offenbar ist  $\gamma^5$  unitär. Wir können also  $U \equiv \gamma^5$  für den Übergang zu einer unitär-äquivalenten Darstellung der  $\gamma$ -Matrizen wählen. Dies liefert:

$$\gamma^\mu \rightarrow -\gamma^\mu,$$

d.h., die Gleichungen (13.19) und (13.20) sind in der Tat äquivalent. Wir wählen die folgende Form der **Dirac-Gleichung**:

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - \tilde{m}) \psi(x) = 0. \quad (13.28)$$

Wir schreiben die **konjugierte Dirac-Gleichung** auf. Aus

$$i\partial_\mu \psi^\dagger (\gamma^\mu)^\dagger + \psi^\dagger \tilde{m} = 0$$

erhalten wir durch Multiplikation von links mit  $\gamma^0$  und unter Verwendung von  $\gamma^k \gamma^0 = -\gamma^0 \gamma^k$ :

$$i\partial_0 \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^0 + i\partial_k \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^k + \psi^\dagger \gamma^0 \tilde{m} = 0.$$

Wir definieren den zu  $\psi$  **konjugierten Bispinor** durch

$$\bar{\psi} := \psi^\dagger \gamma^0 \quad (13.29)$$

und erhalten:

$$i\partial_\mu \bar{\psi}(x) \gamma^\mu + \tilde{m} \bar{\psi}(x) = 0. \quad (13.30)$$

### 13.3.2 Spinordarstellung und relativistische Invarianz der Dirac-Gleichung

Wir untersuchen das Transformationsverhalten der Dirac-Gleichung unter Lorentztransformationen

$$x \mapsto x' = \Lambda x, \quad \Lambda \in L_+^\uparrow.$$

Sei

$$(D(\Lambda)\psi)(x) = S(\Lambda)\psi(\Lambda^{-1}x) \quad (13.31)$$

eine Darstellung der Lorentzgruppe im Raum der Bispinoren. Die Dirac-Gleichung ist invariant unter dieser Darstellung, falls gilt:

$$(i\gamma^\mu \partial'_\mu - \tilde{m})\psi'(x') = 0,$$

wobei

$$\psi'(x') \equiv (D(\Lambda)\psi)(x') = (S(\Lambda)\psi)(\Lambda^{-1}x') = S(\Lambda)\psi(x). \quad (13.32)$$

Wir setzen

$$\partial_\mu = \Lambda^\nu{}_\mu \partial'_\nu, \quad \psi(x) = S(\Lambda)^{-1}\psi'(x')$$

in die Dirac-Gleichung ein und multiplizieren mit  $S(\Lambda)$  von links. Dies liefert:

$$iS(\Lambda)(\Lambda^\nu{}_\mu \gamma^\mu)S(\Lambda)^{-1}\partial_{\nu'}\psi'(x') - \tilde{m}\psi'(x') = 0.$$

Die Dirac-Gleichung ist also invariant unter Lorentz-Transformationen genau dann, wenn

$$S(\Lambda)^{-1}\gamma^\lambda S(\Lambda) = \Lambda^\lambda{}_\mu \gamma^\mu \quad (13.33)$$

gilt.

#### Bemerkungen 13.4

Man überzeugt sich leicht davon, daß wegen  $\Lambda^T g \Lambda = g$  mit  $\gamma^\mu$  auch  $\gamma'^\lambda = \Lambda^\lambda{}_\mu \gamma^\mu$  die definierenden Relationen der Clifford-Algebra erfüllen. Damit folgt aus dem Pauli-Theorem, daß ein nicht-singuläres  $S$  existiert, welches (13.33) erfüllt. Da die  $\gamma^\mu$  und deren Produkte ganz  $M(4, \mathbb{C})$  aufspannen, ist  $S$  bis auf Multiplikation mit einem Element aus dem Zentrum, also bis auf einen komplexen Faktor, eindeutig bestimmt. Genauer: Man zeigt<sup>2</sup> die Relation

$$S(\Lambda)\gamma^0 S(\Lambda)^\dagger = b\gamma^0,$$

wobei  $b$  eine reelle Konstante ist. Nach Auferlegung der Normierungsbedingung

$$\det S(\Lambda) = 1$$

erhalten wir  $b^4 = 1$ , also  $b = \pm 1$ . Man zeigt weiter, daß  $b = 1$  für  $\Lambda^{00} \geq 1$  und  $b = -1$  für  $\Lambda^{00} \leq -1$  gilt. D.h. für die Gruppe der eigentlichen orthochronen Lorentztransformationen haben wir  $S(\Lambda)\gamma^0 S(\Lambda)^\dagger = \gamma^0$ . Wir bemerken, daß damit  $S(\Lambda)$  bis auf das Vorzeichen bestimmt ist. Wir haben es also mit einer projektiven Darstellung zu tun und müssen die universelle Überlagerungsgruppe der eigentlichen orthochronen Lorentzgruppe finden. Dies ist die Gruppe  $SL(2, \mathbb{C})$ .<sup>3</sup> Der Überlagerungshomomorphismus ist gegeben durch

$$A\sigma_\nu A^\dagger = \Lambda(A)^\mu{}_\nu \sigma_\mu, \quad A \in SL(2, \mathbb{C}), \quad \Lambda(A) \in L_+^\uparrow. \quad (13.34)$$

Die Einschränkung dieses Homomorphismus auf die Untergruppe  $SU(2)$  liefert den früher diskutierten Überlagerungshomomorphismus  $SU(2) \rightarrow SO(3)$ . Wir geben  $S$  in der Darstellung (13.26) der  $\gamma$ -Matrizen explizit an:

$$S(A) = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & (A^\dagger)^{-1} \end{pmatrix}, \quad A \in SL(2, \mathbb{C}). \quad (13.35)$$

Man zeigt durch direktes Nachrechnen, daß  $S(A)$  wegen (13.34) in der Tat die Relation (13.33) erfüllt. Aus obigem Argument folgt, daß dies die – bis auf das Vorzeichen – eindeutige Lösung dieser Relation ist.

<sup>2</sup>siehe S. Schweber: *An Introduction to Relativistic QFT*

<sup>3</sup>Diese wird hier als reelle Lie-Gruppe aufgefaßt und heißt in diesem Kontext Spingruppe

Wir nennen  $S$  **Spinordarstellung** der Lorentzgruppe. Wir finden die Erzeugenden dieser Darstellung: Dazu betrachten wir die infinitesimale Lorentztransformation

$$x^\mu \mapsto x'^\mu = x^\mu + \epsilon \lambda^\mu{}_\nu x^\nu.$$

Wegen  $\Lambda^T g \Lambda = g$  muß  $\lambda^{\mu\nu} = -\lambda^{\nu\mu}$  gelten. Wir bezeichnen

$$S(1 + \epsilon \lambda) = 1 + \epsilon T, \quad S(1 + \epsilon \lambda)^{-1} = 1 - \epsilon T$$

und setzen dies in (13.33) ein. Dies liefert

$$\Lambda_\nu^\mu \gamma^\nu = \gamma^\mu + \epsilon \lambda_\nu^\mu \gamma^\nu.$$

Damit ergibt sich folgende infinitesimale Form von (13.33):

$$[\gamma^\mu, T] = \lambda_\nu^\mu \gamma^\nu. \quad (13.36)$$

$T$  ist offenbar bis auf eine additive, zur Identität proportionale Konstante, bestimmt. Die Bedingung  $\det S = 1$  liefert aber gerade  $\text{Tr} T = 0$ . Nach Auferlegung dieser Forderung wird  $T$  eindeutig. Die Lösung lautet:

$$T = \frac{1}{8} \lambda^{\mu\nu} (\gamma_\mu \gamma_\nu - \gamma_\nu \gamma_\mu). \quad (13.37)$$

Wir empfehlen dem Leser, dies nachzuprüfen. Es ergeben sich also die folgenden Erzeugenden der Spinordarstellung:

$$\Sigma^{\mu\nu} = \frac{1}{4} [\gamma^\mu, \gamma^\nu] \equiv \frac{1}{2i} \sigma^{\mu\nu},$$

und wir haben

$$T = \frac{1}{2} \lambda^{\mu\nu} \Sigma_{\mu\nu} \equiv -\frac{i}{4} \lambda^{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu}. \quad (13.38)$$

Endliche Drehungen um einen Winkel  $\varphi$  in der  $(\mu, \nu)$ -Ebene werden folglich beschrieben durch:

$$S^{\mu\nu}(\varphi) = \exp(\varphi \Sigma^{\mu\nu}) \equiv \exp\left(-\frac{i}{2} \varphi \sigma^{\mu\nu}\right).$$

Unter Verwendung von  $(\sigma^{\alpha\beta})^2 = +1$  und  $(\sigma^{0\alpha})^2 = -1$  erhalten wir:

(i) Für **echte Drehungen** in der  $(x^k, x^l)$ -Ebene:

$$S^{kl}(\varphi) = \exp\left(-\frac{i}{2} \varphi \sigma^{kl}\right) = \cos \frac{\varphi}{2} - i \sigma^{kl} \sin \frac{\varphi}{2}. \quad (13.39)$$

(ii) Für **Lorentz-Boosts** in der  $(x^0, x^k)$ -Ebene:

$$S^{0k}(\varphi) = \cosh \frac{\varphi}{2} - i \sigma^{0k} \sinh \frac{\varphi}{2}. \quad (13.40)$$

Aus (13.39) folgt für eine echte Drehung um  $\varphi = 2\pi$ :

$$S^{kl}(2\pi) = \cos \pi - i \sigma^{kl} \sin \pi = -1,$$

d.h., es liegt in der Tat eine **doppeldeutige** Darstellung der Lorentzgruppe vor.

Man zeigt nun leicht das folgende Transformationsgesetz für den konjugierten Bispinor:

$$\bar{\psi}'(x') = \bar{\psi}(x) S(x)^{-1}. \quad (13.41)$$

Unter Beachtung der Transformationsgesetze (13.32) und (13.41) bildet man aus  $\psi, \bar{\psi}$  und den  $\gamma$ -Matrizen **Lorentz-kovariante geometrische Objekte**, z.B.:

- i)  $\bar{\psi}(x) \psi(x)$  ist ein Lorentz-Skalar, d.h. er ist invariant unter Lorentztransformation.  
 ii)  $j^\mu = \bar{\psi} \gamma^\mu \psi$  ist ein kontravarianter Lorentz-Vierervektor, d.h.:

$$j^{\mu'} = \bar{\psi} S^{-1} \gamma^\mu S \psi = \Lambda^\mu{}_\nu j^\nu.$$

- iii)  $\bar{\psi} \sigma^{\mu\nu} \psi$  ist ein kontravarianter, antisymmetrischer Tensor zweiten Ranges.

Sei  $\Sigma$  eine raumartige Hyperfläche im Minkowskiraum mit Volumenelement  $d\xi^\mu$ . Dann wird durch

$$\langle \psi | \phi \rangle_\Sigma = \int_\Sigma d\xi^\mu(x) \bar{\psi}(x) \gamma_\mu \phi(x) \equiv \int_\Sigma d\xi^\mu(x) j_\mu. \quad (13.42)$$

ein Lorentz-invariantes **Skalarprodukt** im Raum der Bispinoren definiert. Für Lösungen der Dirac-Gleichung ist dieses Skalarprodukt unabhängig von der Wahl der Hyperebene  $\Sigma$ : Es gilt nämlich für Lösungen

$$\partial_\mu j^\mu = \partial_\mu (\bar{\psi} \gamma^\mu \psi) = \partial_\mu \bar{\psi} \gamma^\mu \psi + \bar{\psi} \gamma^\mu \partial_\mu \psi = -\frac{\tilde{m}}{i} \bar{\psi} \psi + \bar{\psi} \frac{\tilde{m}}{i} \psi = 0$$

und damit

$$0 = \int_V d^4x \partial_\mu j^\mu = \int_{\Sigma'} d\xi'^\mu j_\mu - \int_\Sigma d\xi^\mu j_\mu,$$

für zwei raumartige Hyperflächen, die das Volumen  $V$  begrenzen. Wir können uns also auf eine Hyperebene definiert durch  $t = \text{const}$  beschränken. Dann erhalten wir:

$$\langle \psi | \phi \rangle_t = \int_t d^3x \bar{\psi}(x) \gamma^0 \phi(x). \quad (13.43)$$

Wir sehen, daß  $j^0 = \bar{\psi} \gamma^0 \psi = \psi^\dagger \psi$  prinzipiell als **Wahrscheinlichkeitsdichte** interpretierbar ist, denn diese Größe ist offensichtlich positiv definit. Für das freie Dirac-Teilchen mit positiver Energie existiert also ein natürlicher 1-Teilchen-Hilbertraum (Raum der quadratintegrablen Lösungen der Dirac-Gleichung mit dem Skalarprodukt (13.43)) und für die (normierte) Wellenfunktion hat man eine probabilistische Interpretation wie in der Schrödinger-Theorie.

Auch die Dirac-Gleichung kann man auf analoge Weise umschreiben: Multiplikation der Gleichung (13.28) von links mit  $\gamma^0$  ergibt:

$$i\hbar \partial_t \psi = -i\hbar c \gamma^0 \gamma^k \partial_k \psi + m c^2 \gamma^0 \psi.$$

Mit der Bezeichnung  $\alpha^k \equiv \gamma^0 \gamma^k$  erhalten wir:

$$i\hbar \partial_t \psi = (c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + m c^2 \gamma^0) \psi.$$

Der Hamiltonoperator des freien Dirac-Teilchens lautet also:

$$\hat{H} = c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + m c^2 \gamma^0. \quad (13.44)$$

### Bemerkungen 13.5

- i) Die Darstellung (13.31) ist **unitär** bezüglich des Skalarproduktes (13.42):

$$\begin{aligned} & \langle D(\Lambda) \psi | D(\Lambda) \phi \rangle \\ &= \int_\Sigma d\xi^\mu(x) \bar{\psi}(\Lambda^{-1}x) S(\Lambda)^{-1} \gamma_\mu S(\Lambda) \phi(\Lambda^{-1}x) \\ &= \int_\Sigma d\xi_\mu(x) \bar{\psi}(\Lambda^{-1}x) \Lambda^\mu{}_\nu \gamma^\nu \phi(\Lambda^{-1}x) \\ &= \int_\Sigma d\xi^\mu(\Lambda^{-1}x) \bar{\psi}(\Lambda^{-1}x) \gamma_\mu \phi(\Lambda^{-1}x) = \langle \psi | \phi \rangle. \end{aligned}$$

- ii) Aus feldtheoretischer Sicht ist auch das folgende Skalarprodukt im Raum aller Bispinoren auf dem Minkowskiraum wichtig:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int_{\mathcal{M}} d^4x \bar{\psi}(x) \phi(x).$$

Dessen Lorentz-Invarianz ist offensichtlich, weil  $\bar{\psi}\phi$  ein Skalar und  $d^4x$  wegen  $\det \Lambda = 1$  invariant ist.

- iii) Der Hamiltonoperator  $\hat{H}$  ist symmetrisch bezüglich des Skalarproduktes (13.42):

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{H} \phi \rangle_t &= \int_t d^3x \psi^\dagger(x) (\gamma^0)^2 (-i\hbar c \gamma^0 \gamma^k \partial_k + m c^2 \gamma^0) \phi(x) \\ &= \int_t d^3x \psi^\dagger(x) (-i\hbar c \gamma^0 \gamma^k \partial_k) \phi(x) + \langle m c^2 \gamma^0 \psi | \phi \rangle_t \\ &= \int_t d^3x i\hbar c (\partial_k \psi)^\dagger(x) \gamma^0 \gamma^k \phi(x) + \langle m c^2 \gamma^0 \psi | \phi \rangle_t \\ &= \int_t d^3x (-i\hbar c \gamma^0 \gamma^k \partial_k \psi(x))^\dagger (\gamma^0)^2 \phi(x) + \langle m c^2 \gamma^0 \psi | \phi \rangle_t \\ &= \langle \hat{H} \psi | \phi \rangle_t, \end{aligned}$$

d.h.:  $\hat{H}$  hat reelle Eigenwerte.

### 13.3.3 Spin und Helizität des Dirac-Teilchens

Wir finden die infinitesimalen Erzeugenden der unitären Darstellung (13.31): Dazu entwickeln wir  $D$  in erster Ordnung,

$$D \simeq 1 + \epsilon \mathcal{D}$$

und berechnen

$$\begin{aligned} (1 + \epsilon \mathcal{D}) \psi(x) &= (1 + \epsilon T) \psi(x - \epsilon \lambda x) \\ &= (1 + \epsilon T) (\psi(x) - \epsilon (\lambda x)^\mu \partial_\mu \psi(x) + \dots) \\ &= \psi(x) + \epsilon (T - \lambda^\mu{}_\nu x^\nu \partial_\mu) \psi(x) + \dots \end{aligned}$$

Setzen wir  $T$  aus (13.38) ein und verwenden die Antisymmetrie von  $\lambda^{\mu\nu}$ , so ergibt sich:

$$\mathcal{D} = -\frac{i}{\hbar} \lambda^{\mu\nu} \left( \frac{\hbar}{4} \sigma_{\mu\nu} + L_{\mu\nu} \right), \quad (13.45)$$

wobei

$$L_{\mu\nu} = \frac{1}{2} (x_\mu p_\nu - x_\nu p_\mu)$$

den relativistischen Bahndrehimpuls<sup>4</sup> bezeichnet. Dies legt nahe,  $\frac{\hbar}{4} \sigma_{\mu\nu}$  als **relativistischen Spintensor** zu interpretieren. Dann ist

$$J_{\mu\nu} = \frac{\hbar}{4} \sigma_{\mu\nu} + L_{\mu\nu} \quad (13.46)$$

der relativistische Tensor des Gesamtdrehimpulses. Die unitäre Darstellung (13.31) der Lorentzgruppe wird also durch den relativistischen Gesamtdrehimpuls erzeugt.

<sup>4</sup>Die physikalische Interpretation von  $L$  als Bahndrehimpuls ist etwas problematisch. In einem Inertialsystem erhalten wir für die räumlichen Komponenten  $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$ . Andererseits zeigt man, daß der Ortsoperator in der relativistischen Quantenmechanik eigentlich nicht  $x_\mu$  ist. Die entsprechende Modifikation des Ortsoperators geht auf Newton und Wigner zurück, siehe z.B. mit S. Schweber: *An Introduction to Relativistic QFT*, Kapitel 4f

In einem fixierten Inertialsystem bilden wir den **Spinoperator**

$$\hat{S}_i = \frac{\hbar}{4} \epsilon_{ijk} \sigma_{jk}. \quad (13.47)$$

Eine einfache Rechnung liefert:

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}.$$

Wie im nicht-relativistischen Fall definieren wir die Projektion des Spins auf die Bewegungsrichtung. Dies liefert den **Helizitätsoperator**:

$$\hat{s}(\vec{p}) := \frac{\hat{S} \cdot \hat{p}}{|\vec{p}|} \equiv \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{|\vec{p}|} & 0 \\ 0 & \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{|\vec{p}|} \end{pmatrix}. \quad (13.48)$$

### Bemerkungen 13.6

- (i) In der chiralen Darstellung hatten wir eine Zerlegung des Raumes der Bispinoren in Eigenunterräume zu den Eigenwerten  $\pm 1$  des Chiralitätsoperators  $\gamma^5 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix}$ :

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}.$$

In dieser Darstellung wirkt  $\hat{S}$  offensichtlich identisch auf beide chiralen Komponenten mit  $\frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$ . Dies ist der Spinoperator der nichtrelativistischen Theorie.

- ii) Offensichtlich kommutieren  $\hat{L}$  und  $\hat{S}$  separat **nicht** mit  $\hat{H}$ . Man zeigt aber leicht (Seminar), daß der Gesamtdrehimpuls  $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$  mit  $\hat{H}$  kommutiert:

$$[\hat{J}, \hat{H}] = 0. \quad (13.49)$$

Weiter rechnet man leicht nach, daß auch der Helizitätsoperator mit  $\hat{H}$  kommutiert und daß sein Quadrat proportional zur Identität ist:

$$[\hat{H}, \hat{s}(\vec{p})] = 0, \quad \hat{s}^2(\vec{p}) = \frac{\hbar^2}{4}. \quad (13.50)$$

$\frac{2}{\hbar} \hat{s}(\vec{p})$  ist also ein **Projektor** mit den Eigenwerten  $\pm 1$ .

- (iii) Setzen wir  $m = 0$ , so entkoppelt die Dirac-Gleichung in der chiralen Darstellung und wir erhalten:

$$\begin{aligned} (\partial_0 + \vec{\sigma} \partial_k) \varphi &= 0 \\ (\partial_0 - \vec{\sigma} \partial_k) \chi &= 0. \end{aligned}$$

Dies sind die **Weyl-Gleichungen**. Sie eignen sich etwa zur Beschreibung von Neutrinos.

### 13.3.4 Lösungen der freien Dirac-Gleichung

Wir suchen Lösungen in Gestalt von ebenen Wellen:

$$\psi(x) = e^{-\frac{i}{\hbar} p_\mu x^\mu} u(p).$$

Einsetzen dieses Ansatzes in die Dirac-Gleichung (13.28) liefert

$$(\gamma^\mu p_\mu - m c) u(p) = 0.$$

Nichttriviale Lösungen haben wir für

$$\det(\gamma^\mu p_\mu - m c) = (p_\mu p^\mu - (m c)^2)^2 = 0,$$

d.h. für  $p^2 = (m c)^2$ . Wir erhalten also wieder Lösungen mit **positiver** und mit **negativer Energie**:

$$p^0 = \pm \sqrt{\vec{p}^2 + (m c)^2}.$$

Sei  $u_+(\vec{p}) \equiv \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$  eine Lösung zum Energieeigenwert

$$E(\vec{p}) \equiv c p_0 = +c \sqrt{\vec{p}^2 + (m c)^2}.$$

In der hier zweckmäßigen Darstellung

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix}; \quad \gamma^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ -\sigma^k & 0 \end{pmatrix}$$

der  $\gamma$ -Matrizen liefert die Dirac-Gleichung:

$$\begin{pmatrix} (p_0 - m c)\mathbf{1} & -\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & (-p_0 - m c)\mathbf{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = 0,$$

also

$$\begin{aligned} E(\vec{p}) u_1 &= c \vec{\sigma} \cdot \vec{p} u_2 + m c^2 u_1 \\ E(\vec{p}) u_2 &= c \vec{\sigma} \cdot \vec{p} u_1 - m c^2 u_2, \end{aligned} \tag{13.51}$$

und damit

$$u_2 = c \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E(\vec{p}) + m c^2} u_1.$$

Es existieren also genau **zwei** linear unabhängige Lösungen mit positiver Energie für jedes  $\vec{p}$ . Wir können z.B. die Standardbasis im  $\mathbb{C}^2$  verwenden. Dann erhalten wir:

$$\begin{aligned} u_+^{(1)}(\vec{p}) &= \sqrt{\frac{E(\vec{p}) + m c^2}{2E(\vec{p})}} \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \frac{c \vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E(\vec{p}) + m c^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{bmatrix} \\ u_+^{(2)}(\vec{p}) &= \sqrt{\frac{E(\vec{p}) + m c^2}{2E(\vec{p})}} \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \frac{c \vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{E(\vec{p}) + m c^2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{bmatrix}. \end{aligned} \tag{13.52}$$

### Bemerkungen 13.7

i) Man rechnet leicht die folgenden Orthonormalitätsrelation nach:

$$u_+^{(r)}(\vec{p})^\dagger u_+^{(s)}(\vec{p}) = \delta_{rs}, \quad r, s = 1, 2. \tag{13.53}$$

ii)  $u_+^{(r)}(\vec{p})$  sind keine Eigenfunktionen von  $\hat{s}(\vec{p})$ . Da  $\hat{s}(\vec{p})$  aber mit  $\hat{H}$  kommutiert, vgl. (13.50), kann man zu einer Basis  $\{u_+^{(\pm)}\}$  von Spinoren mit definierter Helizität übergehen. Wir suchen also Eigenzustände von  $\hat{s}(\vec{p})$ ,

$$\hat{s}(\vec{p}) u_+^{(\pm)}(\vec{p}) = \pm \frac{\hbar}{2} u_+^{(\pm)}(\vec{p}).$$

Sei  $\vec{n} := \frac{\vec{p}}{|\vec{p}|}$  der Einheitsvektor in Bewegungsrichtung. Aus (13.48) folgt für  $u_+^{(\pm)} \equiv \begin{pmatrix} u_1^{(\pm)} \\ u_2^{(\pm)} \end{pmatrix}$ :

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) u_1^{(\pm)} &= \pm u_1^{(\pm)} \\ (\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) u_2^{(\pm)} &= \pm u_2^{(\pm)}. \end{aligned}$$

Die Lösung dieses Gleichungssystems ist:

$$\begin{aligned} u_1^{(+)} &= \frac{1}{\sqrt{2(n_3+1)}} \begin{pmatrix} n_3+1 \\ n_1+in_2 \end{pmatrix} \\ u_1^{(-)} &= \frac{1}{\sqrt{2(n_3+1)}} \begin{pmatrix} -n_1+in_2 \\ n_3+1 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

und analog für  $u_2^{(\pm)}$ . Die normierte Eigenfunktion mit positiver Energie und Helizität +1 ist dann:

$$u_+^{(+)}(\vec{p}) = \frac{1}{\sqrt{2(n_3+1)}} \sqrt{\frac{E(\vec{p}) + m c^2}{2E(\vec{p})}} \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} n_3+1 \\ n_1+in_2 \end{pmatrix} \\ \frac{c|\vec{p}|}{E(\vec{p})+m c^2} \begin{pmatrix} n_3+1 \\ n_1+in_2 \end{pmatrix} \end{bmatrix}. \quad (13.54)$$

Für eine Bewegung in  $z$ -Richtung, d.h.:  $\vec{n} = (0, 0, 1)$ , ergibt sich daraus:

$$u_+^{(+)}(\vec{p}) = \sqrt{\frac{E(\vec{p}) + m c^2}{2E(\vec{p})}} \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \frac{c|\vec{p}|}{E(\vec{p})+m c^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{bmatrix}$$

und im **Ruhsystem** des Teilchens erhalten wir die folgende Basis im Lösungsraum:

$$u_+^{(+)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u_+^{(-)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u_-^{(+)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u_-^{(-)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

### 13.3.5 Ankopplung eines äußeren elektromagnetischen Feldes. Der nichtrelativistische Limes der Dirac-Gleichung

Wie bei der Herleitung der Klein-Gordon-Gleichung für ein Teilchen im elektromagnetischen Feld, vgl. Gleichung (13.16), verwenden wir das Prinzip der **minimalen Kopplung**, d.h. wir ersetzen  $\partial_\mu$  durch die kovariante Ableitung

$$D_\mu = \left( \partial_\mu + \frac{i e}{\hbar} A_\mu \right)$$

und erhalten so

$$(i\gamma^\mu D_\mu - \tilde{m}) \psi = 0. \quad (13.55)$$

Damit ergibt sich der folgende Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = c \vec{\alpha} \cdot (\vec{p} - e \vec{A}) + m c^2 \gamma^0 + e c A_0. \quad (13.56)$$

Wir diskutieren nun den nichtrelativistischen Limes der Gleichung (13.55): Dazu verwenden wir wieder die Darstellung

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix}, \quad \gamma^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ -\sigma^k & 0 \end{pmatrix}$$

der  $\gamma$ -Matrizen. Wir zerlegen  $\psi = \begin{pmatrix} \tilde{\varphi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix}$  und setzen diese Darstellung in (13.55) ein:

$$i \left( \partial_0 + \frac{ie}{\hbar} A_0 \right) \begin{pmatrix} \tilde{\varphi} \\ -\tilde{\chi} \end{pmatrix} + i \left( \partial_k + \frac{ie}{\hbar} A_k \right) \begin{pmatrix} \sigma^k \tilde{\chi} \\ -\sigma^k \tilde{\varphi} \end{pmatrix} = \frac{mc}{\hbar} \begin{pmatrix} \tilde{\varphi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix}.$$

Mit der Bezeichnung  $\vec{\Pi} := \vec{p} - e\vec{A}$ , also  $\Pi^k = p^k - eA^k$ , ergibt sich:

$$i\hbar \partial_t \tilde{\varphi} = c \vec{\Pi} \cdot \vec{\sigma} \tilde{\chi} + ecA_0 \tilde{\varphi} + mc^2 \tilde{\varphi} \quad (13.57)$$

$$i\hbar \partial_t \tilde{\chi} = c \vec{\Pi} \cdot \vec{\sigma} \tilde{\varphi} + ecA_0 \tilde{\chi} - mc^2 \tilde{\chi}. \quad (13.58)$$

Im nichtrelativistischen Grenzfall dominiert die Ruheenergie  $mc^2$ , deshalb zerlegen wir  $\psi$  wie folgt:

$$\begin{pmatrix} \tilde{\varphi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} = e^{-\frac{i}{\hbar} mc^2 t} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix},$$

wobei  $\varphi$  und  $\chi$  sich zeitlich langsam verändernde Spinorfelder sind. Einsetzen diese Zerlegung in (13.58) liefert:

$$i\hbar \partial_t \chi = c \vec{\Pi} \cdot \vec{\sigma} \varphi + ecA_0 \chi - 2mc^2 \chi.$$

Die Terme  $i\hbar \partial_t \chi$  und  $ecA_0 \chi$  können gegenüber  $2mc^2 \chi$  vernachlässigt werden. Dann erhalten wir

$$\chi = \frac{\vec{\Pi} \cdot \vec{\sigma}}{2mc} \varphi. \quad (13.59)$$

Einsetzen dieser Beziehung in (13.57) ergibt:

$$i\hbar \partial_t \varphi = \frac{1}{2m} (\vec{\Pi} \cdot \vec{\sigma}) (\vec{\Pi} \cdot \vec{\sigma}) \varphi + ecA_0 \varphi.$$

Aber

$$(\vec{\Pi} \cdot \vec{\sigma}) (\vec{\Pi} \cdot \vec{\sigma}) = \sum_{ij} \Pi_i \sigma_i \Pi_j \sigma_j = \sum_{ijk} (\delta_{ij} \mathbf{1} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k) \Pi_i \Pi_j = \vec{\Pi}^2 + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - e\vec{A}) \times (\vec{p} - e\vec{A}).$$

und

$$i \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - e\vec{A}) \times (\vec{p} - e\vec{A}) = -ie \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} \times \vec{A} + \vec{A} \times \vec{p}) = -e\hbar \vec{\sigma} \cdot (\nabla \times \vec{A}) = -e\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{B}.$$

Wir erhalten als nichtrelativistischen Grenzfall der Dirac-Gleichung die **Pauli-Gleichung**:

$$i\hbar \partial_t \varphi = \left\{ \frac{1}{2m} (\vec{p} - e\vec{A})^2 - \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} + ecA_0 \right\} \varphi. \quad (13.60)$$

Bei einigen Anwendungen in den vorangegangenen Kapiteln wurden Spezialfälle dieser Gleichung bereits verwendet. Das Spinorfeld  $\varphi$  nimmt Werte in  $\mathbb{C}^2$  und der Spinoperator wirkt im Raum dieser Spinoren als  $\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$ , in Übereinstimmung mit der nichtrelativistischen Beschreibung aus Teil I der Vorlesung. Wir bemerken noch, daß sich als **gyromagnetische Konstante**  $g = 2$  ergibt, d.h. der Faktor  $-\frac{1}{2}$  vor dem  $\vec{\sigma} \cdot \vec{B}$ -Term kommt hier automatisch richtig heraus.

### 13.3.6 Exakt lösbare Fälle mit Wechselwirkung

Exakt lösbare Fälle gibt es nicht viele, hier eine Auswahl:

- i) Coulomb-Potential (Dirac, Darwin, Gordon 1928; Mott, Hylleraas 1929/1955)
- ii) Homogenes Magnetfeld (Rabi 1928; Huff 1931; Sauter 1931; Johnson 1949)

iii) Feld einer ebenen elektromagnetischen Welle (Volkow 1935)

Der für die Diskussion relativistischer Korrekturen im Termschema des Wasserstoffatoms wichtige Fall des Coulomb-Potentials wird auf dem Seminar ausführlich behandelt. Wir machen hier nur einige Bemerkungen dazu. Setzt man  $\vec{A} = 0$  und  $ecA_0 = -\frac{e^2 Z}{r}$  in den Hamiltonian (13.56) ein, so ergibt sich:

$$\hat{H} = c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + m c^2 \gamma^0 - \frac{e^2 Z}{r}.$$

Unter Verwendung von (13.49) erhält man mit Standardmethoden die folgenden **Energieniveaus**:

$$E_{n,j} = m c^2 \left\{ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{\left( n' + \sqrt{\left( j + \frac{1}{2} \right)^2 - \alpha^2 Z^2} \right)^2} \right\}^{-1/2} \\ \simeq m c^2 - \frac{1}{2} \alpha^2 m c^2 \frac{Z^2}{n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) + \dots \right]. \quad (13.61)$$

Dabei ist  $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$  die Quantenzahl von  $\vec{J}$  und

$$n = n' + j + \frac{1}{2} = 1, 2, 3, \dots, \quad n' = 0, 1, 2, \dots$$

Der erste Term in (13.61) ist der relativistische Massenterm, der zweite stimmt exakt mit dem Eigenwert der **nichtrelativistischen Theorie** überein und der dritte Term (und alle weiteren) Terme liefern relativistische Korrekturen.

### 13.3.7 Lösungen mit negativer Energie. Diracs Löcher-Theorie

Im Rahmen einer 1-Teilchen-Interpretation liefert die Dirac-Theorie endliche, von Null verschiedene Wahrscheinlichkeiten für den Übergang von positiven zu negativen Energiezuständen unter dem Einfluß eines äußeren Feldes. (Damit wären die Energiezustände des Atoms prinzipiell instabil.) Solche Übergänge werden aber nicht beobachtet. Dirac selbst schlug 1930 in Gestalt seiner **Löchertheorie** einen Ausweg aus diesem Dilemma vor:

Wir nehmen an, daß alle negativen Energieniveaus mit Elektronen aufgefüllt sind – jeder Zustand mit einem Elektron, in Übereinstimmung mit dem Pauli-Prinzip. Auf diese Weise entsteht ein “See” der Elektronen mit negativer Energie. Der **Vakuuzustand** ist in diesem Bilde dadurch charakterisiert, daß alle Elektronenzustände mit negativer Energie besetzt und alle Niveaus mit positiver Energie leer sind. Mit diesem Konzept wird etwa die Stabilität des Wasserstoff-Grundzustandes garantiert, denn wegen des Pauli-Prinzips können keine weiteren Elektronen in Zustände mit negativer Energie übergehen.

Wir diskutieren einige Konsequenzen, die aus dieser Vorstellung resultieren:

- i) **Paarerzeugung:** Ein Elektron mit negativer Energie kann Strahlung absorbieren und in einen positiven Energiezustand übergehen, siehe Abbildung 13.3. Es wird dann ein Elektron mit der Ladung  $-|e|$  und der Energie  $+E$  beobachtet. Gleichzeitig entsteht ein “Loch” im See der negativen Energien. Dieses Loch charakterisiert die **Abwesenheit** eines Elektrons der Ladung  $-|e|$  und der Energie  $-E$ , also – relativ zum Vakuum – die **Anwesenheit** eines Teilchens mit Ladung  $+|e|$  und Energie  $+E$ . Dies ist das **Antiteilchen** des Elektrons, das **Positron**. Dessen Existenz wurde von Anderson 1932 experimentell nachgewiesen. Es hat die gleiche Masse und den gleichen Spin wie das Elektron, aber Ladung  $+|e|$ .
- ii) Völlig analog haben wir **Paarvernichtung**, d.h. in diesem Bilde, daß ein Elektron unter Emission eines  $\gamma$ -Quants in ein Loch fällt.

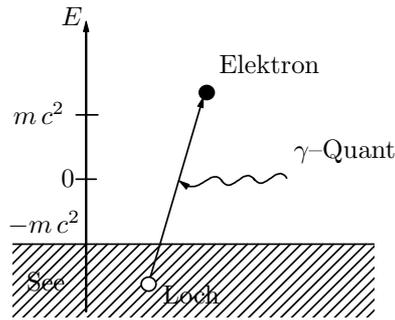


Abbildung 13.3: Paarerzeugung

Die Diracsche Löcher-Theorie führt also automatisch zu einer Vielteilchentheorie, bei der insbesondere Teilchenpaare erzeugt und vernichtet werden. Insbesondere ergibt sich die fundamental neue Vorstellung, daß zu jedem Teilchen ein Antiteilchen gehört. Hinter diesem Dualismus sollte sich eine **Symmetrie** der Theorie verbergen:

Wir betrachten eine Elektronlösung der Dirac-Gleichung

$$\left( i\gamma^\mu \partial_\mu - \frac{e}{\hbar} \gamma^\mu A_\mu - \tilde{m} \right) \psi = 0 \quad (13.62)$$

mit negativer Energie und negativer Ladung. Sei  $\psi_C$  eine Positronenfunktion zu positiver Energie und positiver Ladung. Sie muss die Gleichung

$$\left( i\gamma^\mu \partial_\mu + \frac{e}{\hbar} \gamma^\mu A_\mu - \tilde{m} \right) \psi_C = 0 \quad (13.63)$$

erfüllen. Wir suchen eine Transformation, die diese beiden Gleichungen ineinander überführt. Zunächst erinnern wir uns an die Diskussion der Klein-Gordon Gleichung und nehmen die komplexe Konjugation von (13.62):

$$\left( i\gamma^{\mu*} \partial_\mu + \frac{e}{\hbar c} \gamma^{\mu*} A_\mu + \tilde{m} \right) \psi^* = 0.$$

Sei nun  $C$  eine nichtsinguläre Matrix, so daß

$$(C\gamma^0) (\gamma^\mu)^* (C\gamma^0)^{-1} = -\gamma^\mu \quad (13.64)$$

gilt. Wirken wir von links mit  $C\gamma^0$  auf die komplex konjugierte Gleichung und fügen vor  $\psi^*$  eine Eins in Form von  $(C\gamma^0)^{-1}(C\gamma^0)$  ein, so ergibt sich

$$\left( i\gamma^\mu \partial_\mu + \frac{e}{\hbar c} \gamma^\mu A_\mu - \tilde{m} \right) (C\gamma^0 \psi^*) = 0.$$

Wir sehen, daß die Positron-Wellenfunktion mit

$$\psi_C = C \bar{\psi}^T \quad (13.65)$$

zu identifizieren ist.  $C$  heißt **Operator der Ladungskonjugation**. Wegen  $\gamma^0 \gamma^{\mu*} \gamma^0 = \gamma^{\mu T}$  vereinfacht sich die Gleichung (13.64) zu:

$$C^{-1} \gamma^\mu C = -\gamma^{\mu T}. \quad (13.66)$$

In der bereits mehrfach verwendeten Darstellung

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix}; \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}$$

erhält man als Lösung

$$C = i\gamma^2\gamma^0 \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma^2 \\ -i\sigma^2 & 0 \end{pmatrix} \quad (13.67)$$

und für die Positron-Wellenfunktion:

$$\psi_C = i\gamma^2\psi^*.$$

Offenbar gilt  $-C = C^{-1} = C^T = C^\dagger$ . Sei eine freie Elektronlösung

$$\psi = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}m c^2 t}$$

mit negativer Energie und Spin in negativer  $z$ -Richtung im Ruhesystem gegeben. Anwendung des Operators der Ladungskonjugation liefert

$$\psi_C = i\gamma^2\psi^* = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} i \begin{bmatrix} 0 & \sigma^2 \\ -\sigma^2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}m c^2 t} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}m c^2 t},$$

also eine Positron-Lösung mit positiver Energie und Spin in positiver  $z$ -Richtung.

Ein Vergleich von (13.62) mit (13.63) zeigt schließlich, daß wir zu der angekündigten Symmetrie kommen, wenn wir gleichzeitig das Vorzeichen des elektromagnetischen Potentials ändern<sup>5</sup>. Die **vollständige Ladungskonjugations-Transformation** lautet also:

$$\psi \rightarrow \psi_C = C\bar{\psi}^T \quad (13.68)$$

$$A_\mu \rightarrow A_\mu^C = -A_\mu. \quad (13.69)$$

Unter dieser Transformation bleibt die Dirac-Gleichung invariant.

## 13.4 Zweite Quantisierung des freien Dirac-Feldes

Wir erinnern an die in Abschnitt 11.5 behandelte Methode der zweiten Quantisierung. Wir verwenden den dort entwickelten Apparat, müssen aber die für die relativistische Theorie charakteristischen Besonderheiten berücksichtigen. Das Dirac-Teilchen hat Spin  $\frac{1}{2}$ , als Zustandsraum ist also der **fermionische Fockraum**  $\mathcal{F}^a$  zu nehmen und die Erzeuger und Vernichter der Teilchen müssen die kanonischen **Antivertauschungsrelationen** erfüllen. Der Diskussion im letzten Abschnitt folgend, sollten wir Erzeuger und Vernichter von Elektronen und Positronen haben. Teilchen und Antiteilchen sollten völlig symmetrisch in die Theorie eingehen.

In Abschnitt 11.5 hatten wir gesehen, daß alle Observable der Theorie als Kombination von Erzeugern und Vernichtern darstellbar sind, vgl. (11.54) und (11.56). Wir sollten also auch hier typische Observable wie Energie, Impuls, Ladung und Drehimpuls in dieser Sprache darstellen. Ausgangspunkt für diese Prozedur sind die Formeln für die Erwartungswerte der Observablen der Dirac-Einteilchentheorie. Dieses Konzept ist sinnvoll, weil die freie Theorie – wie oben dargelegt – eine konsistente Wahrscheinlichkeitsinterpretation erlaubt. Wir setzen im weiteren

$$\hbar = 1 = c$$

und bezeichnen die Operatoren der Einteilchentheorie mit kleinen Buchstaben. Dann haben wir

i) die **mittlere Energie** im Zustand  $\psi$ :

$$H \equiv P^0 = \langle \psi | \hat{h} | \psi \rangle = i \int d^3x \psi^\dagger(x) \partial_t \psi(x), \quad (13.70)$$

<sup>5</sup>Dies ist plausibel. Wir empfehlen dem Leser, sich an das elektromagnetische Potential einer bewegten Ladung zu erinnern

ii) den **mittleren Impuls** im Zustand  $\psi$ :

$$\vec{P} = \langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle = -i \int d^3x \psi^\dagger(x) \vec{\nabla} \psi(x), \quad (13.71)$$

iii) die **mittlere Ladung** im Zustand  $\psi$ :

$$Q = \langle \psi | \hat{q} | \psi \rangle = e \int d^3x \psi^\dagger(x) \psi(x), \quad (13.72)$$

iv) den **mittleren Gesamtdrehimpuls** im Zustand  $\psi$ :

$$\vec{J} = \langle \psi | \hat{j} | \psi \rangle = \int d^3x \psi^\dagger(x) (\vec{x} \times \vec{p} + \vec{s}) \psi(x). \quad (13.73)$$

Die zweite Quantisierung besteht nun darin, daß wir  $\psi$  und  $\bar{\psi}$  unter Verwendung von Erzeugern und Vernichtern von Elektronen und Positronen darstellen und diese Darstellungen in die obigen Formeln für die Observablen einsetzen. Damit werden  $\psi$ ,  $\bar{\psi}$  und alle Observablen Operatoren im fermionischen Fockraum  $\mathcal{F}^a$ . Diese Idee realisiert man technisch, indem man  $\psi$  und  $\bar{\psi}$  bezüglich einer Basis im Raum der Lösungen der Dirac-Gleichung entwickelt und die Koeffizienten dieser Entwicklung als Erzeuger und Vernichter interpretiert, für die man kanonische Antivertauschungsrelationen postuliert<sup>6</sup>. Der besseren Anschaulichkeit wegen setzen wir unser System in eine Box mit endlichem Volumen  $V$ . Als Basis im 4-dimensionalen Raum der Lösungen verwenden wir

$$u_r(k) = \sqrt{\frac{E+m}{2m}} \begin{bmatrix} \chi_r \\ \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{k}}{E+m} \chi_r \end{bmatrix}, \quad r = 1, 2, \quad (13.74)$$

mit

$$\chi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

für die Lösungen mit positiver Energie und

$$w_r(k) = -\sqrt{\frac{E+m}{2m}} \begin{bmatrix} \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{k}}{E+m} i \sigma^2 \chi_r \\ i \sigma^2 \chi_r \end{bmatrix}, \quad r = 1, 2, \quad (13.75)$$

für die Lösungen mit negativer Energie. Es gelten die folgenden Identitäten:

$$\bar{u}_r(k) u_s(k) = \delta_{rs}, \quad \bar{u}_r(k) w_s(k) = 0, \quad \bar{w}_r(k) w_s(k) = -\delta_{rs}, \quad \bar{w}_r(k) u_s(k) = 0 \quad (13.76)$$

und

$$\bar{u}_r(k) \gamma^0 u_s(k) = \frac{E}{m} \delta_{rs}, \quad \bar{u}_r(\tilde{k}) \gamma^0 w_s(k) = 0, \quad \bar{w}_r(k) \gamma^0 w_s(k) = \frac{E}{m} \delta_{rs}, \quad \bar{w}_r(\tilde{k}) \gamma^0 u_s(k) = 0 \quad (13.77)$$

mit  $\tilde{k} \equiv (k^0, -\vec{k})$ . Die Zerlegung für  $\psi$  in dieser Basis hat die Form

$$\psi(x) = \sum_{\vec{k}, r} \sqrt{\frac{m}{VE}} \left\{ b_{r\vec{k}} u_r(k) e^{-ikx} + d_{r\vec{k}}^* w_r(k) e^{ikx} \right\},$$

<sup>6</sup>Dieses etwas heuristische Rezept erfährt eine gewisse, tiefere Motivierung im Rahmen des kanonischen Formalismus der klassischen Feldtheorie, siehe z.B. J.D. Bjorken und S.D. Drell: *Relativistische Quantenfeldtheorie*, Wissenschaftsverlag 1993. Im Rahmen dieses Formalismus faßt man  $\psi$  als "klassisches" Wellenfeld auf und obige Formeln für die Observablen werden als klassische Feldgrößen erhalten.

und analog

$$\bar{\psi}(x) = \sum_{\vec{k}, r} \sqrt{\frac{m}{VE}} \left\{ d_{r\vec{k}} \bar{w}_r(k) e^{-ikx} + b_{r\vec{k}}^* \bar{u}_r(k) e^{ikx} \right\}.$$

Im Sinne der obigen Vorschrift ersetzen wir

$$b_{r\vec{k}} \rightarrow \hat{b}_{r\vec{k}}, \quad b_{r\vec{k}}^* \rightarrow \hat{b}_{r\vec{k}}^\dagger, \quad d_{r\vec{k}} \rightarrow \hat{d}_{r\vec{k}}, \quad d_{r\vec{k}}^* \rightarrow \hat{d}_{r\vec{k}}^\dagger \quad (13.78)$$

und postulieren die **kanonischen Antivertauschungsrelationen**

$$[\hat{b}_{r\vec{k}}, \hat{b}_{r'\vec{k}'}^\dagger]_+ = \delta_{rr'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'}, \quad [\hat{d}_{r\vec{k}}, \hat{d}_{r'\vec{k}'}^\dagger]_+ = \delta_{rr'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'}. \quad (13.79)$$

Alle anderen Antikommutatoren verschwinden. Die Operatoren  $\hat{b}_{r\vec{k}}$  und  $\hat{b}_{r\vec{k}}^\dagger$  sind Vernichter bzw. Erzeuger von Elektronen mit Impuls  $\vec{k}$  und Spinkomponente  $r$  und die Operatoren  $\hat{d}_{r\vec{k}}$  und  $\hat{d}_{r\vec{k}}^\dagger$  sind Vernichter bzw. Erzeuger von Positronen mit Impuls  $\vec{k}$  und Spinkomponente  $r$ . Setzen wir diese Operatoren in obige Zerlegungen von  $\psi$  und  $\bar{\psi}$  ein, so erhalten wir die folgenden **relativistischen Quantenfelder**:

$$\hat{\Psi}(x) = \sum_{\vec{k}, r} \sqrt{\frac{m}{VE}} \left\{ \hat{b}_{r\vec{k}} u_r(k) e^{-ikx} + \hat{d}_{r\vec{k}}^\dagger w_r(k) e^{ikx} \right\}, \quad (13.80)$$

und

$$\hat{\bar{\Psi}}(x) = \sum_{\vec{k}, r} \sqrt{\frac{m}{VE}} \left\{ \hat{d}_{r\vec{k}} \bar{w}_r(k) e^{-ikx} + \hat{b}_{r\vec{k}}^\dagger \bar{u}_r(k) e^{ikx} \right\}. \quad (13.81)$$

Diese Darstellungen hat man nun in die Formeln für die obigen Observablen einzusetzen. Für Energie und Impuls erhält man

$$\begin{aligned} \hat{P}^\mu &= i \int d^3x \hat{\bar{\Psi}}(x) \gamma^0 \partial^\mu \hat{\Psi}(x) \\ &= i \int d^3x \sum_{\vec{k}, r} \sum_{\vec{k}', r'} \sqrt{\frac{m}{VE_{\vec{k}}}} \sqrt{\frac{m}{VE_{\vec{k}'}}} \left\{ \hat{b}_{r'\vec{k}'}^\dagger \bar{u}'_r(k') e^{ik'x} + \hat{d}_{r'\vec{k}'} \bar{w}'_r(k') e^{-ik'x} \right\} \times \dots \\ &\quad \dots \times \gamma^0 \partial^\mu \left\{ \hat{b}_{r\vec{k}} u_r(k) e^{-ikx} + \hat{d}_{r\vec{k}}^\dagger w_r(k) e^{ikx} \right\} \\ &= i \sum_{\vec{k}, r} \sum_{\vec{k}', r'} \sqrt{\frac{m}{VE_{\vec{k}}}} \sqrt{\frac{m}{VE_{\vec{k}'}}} \left\{ ik^\mu \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \left( -\hat{b}_{r'\vec{k}'}^\dagger \hat{b}_{r\vec{k}} \bar{u}'_r(k') \gamma^0 u_r(k) + \hat{d}_{r'\vec{k}'} \hat{d}_{r\vec{k}}^\dagger \bar{w}'_r(k') \gamma^0 w_r(k) \right) \right. \\ &\quad \left. + ik^\mu \delta_{\vec{k}, -\vec{k}'} \left( e^{i(k^0+k'^0)t} \hat{b}_{r'\vec{k}'}^\dagger \hat{d}_{r\vec{k}}^\dagger \bar{u}'_r(k') \gamma^0 w_r(k) - e^{-i(k^0+k'^0)t} \hat{d}_{r'\vec{k}'} \hat{b}_{r\vec{k}} \bar{w}'_r(k') \gamma^0 u_r(k) \right) \right\} \\ &= i \sum_{\vec{k}, r} \sum_{\vec{k}', r'} ik^\mu \sqrt{\frac{m}{VE_{\vec{k}}}} \sqrt{\frac{m}{VE_{\vec{k}'}}} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \left\{ -\delta_{rr'} \frac{E_{\vec{k}}}{m} \hat{b}_{r'\vec{k}'}^\dagger \hat{b}_{r\vec{k}} + \delta_{rr'} \frac{E_{\vec{k}}}{m} \hat{d}_{r'\vec{k}'} \hat{d}_{r\vec{k}}^\dagger \right\} \\ &= \sum_{\vec{k}, r} k^\mu \left( \hat{b}_{r\vec{k}}^\dagger \hat{b}_{r\vec{k}} - \hat{d}_{r\vec{k}} \hat{d}_{r\vec{k}}^\dagger \right). \end{aligned}$$

Dabei haben wir (13.77) und

$$\frac{1}{V} \int d^3x e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{x}} = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}$$

verwendet. Wir erhalten also

$$\hat{P}^\mu \equiv (\hat{H}, \hat{\vec{P}}) = \sum_{\vec{k}, r} k^\mu \left( \hat{b}_{r\vec{k}}^\dagger \hat{b}_{r\vec{k}} - \hat{d}_{r\vec{k}} \hat{d}_{r\vec{k}}^\dagger \right), \quad (13.82)$$

und mit den kanonischen Antivertauschungsrelationen ergibt sich:

$$\hat{P}^\mu \equiv (\hat{H}, \hat{\vec{P}}) = \sum_{\vec{k}, r} k^\mu \left( \hat{b}_{r\vec{k}}^\dagger \hat{b}_{r\vec{k}} + \hat{d}_{r\vec{k}}^\dagger \hat{d}_{r\vec{k}} \right) - \sum_{\vec{k}, r} k^\mu \mathbf{1}.$$

Wir erhalten einen unendlichen Anteil, der dem mit Elektronen negativer Energie gefüllten Dirac–See entspricht. Diese Anteile sind nicht beobachtbar und werden weggelassen<sup>7</sup>. Nach Weglassen dieser unendlichen Beiträge ergibt sich der folgende **relativistische Energie–Impuls–Operator**

$$\hat{P}^\mu \equiv (\hat{H}, \hat{\vec{P}}) = \sum_{\vec{k}, r} k^\mu \left( \hat{b}_{r\vec{k}}^\dagger \hat{b}_{r\vec{k}} + \hat{d}_{r\vec{k}}^\dagger \hat{d}_{r\vec{k}} \right). \quad (13.83)$$

Der Hamilton–Operator

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}, r} E_{\vec{k}} \left( \hat{b}_{r\vec{k}}^\dagger \hat{b}_{r\vec{k}} + \hat{d}_{r\vec{k}}^\dagger \hat{d}_{r\vec{k}} \right) \quad (13.84)$$

der Theorie ist also **positiv definit**. Wir erkennen natürlich die Analogie zum Hamiltonoperator eines harmonischen Oszillators. Hier haben wir eine unendliche (für endliches Volumen diskrete) Summe von Oszillatoren, sowohl für das Elektron– als auch für das Positronfeld.

Eine analoge Rechnung für die Ladung des Feldes ergibt:

$$\hat{Q} = e \int d^3x \hat{\Psi}(x) \gamma^0 \hat{\Psi}(x) = e \sum_{\vec{k}, r} \left( \hat{b}_{r\vec{k}}^\dagger \hat{b}_{r\vec{k}} - \hat{d}_{r\vec{k}}^\dagger \hat{d}_{r\vec{k}} \right), \quad (13.85)$$

wobei wieder ein unendlicher Beitrag vom Dirac–See weggelassen wurde. Diese Größe ist natürlich – wie zu erwarten – nicht positiv definit, (die “klassische” Ladung  $Q$  dagegen war positiv definit).

### Bemerkungen 13.8

Man zeigt (Seminar):

$$[\hat{\Psi}_\alpha(x), \hat{\Psi}_{\alpha'}(x')]_+ = (i\gamma^\mu \partial_\mu + m)_{\alpha\alpha'} i\Delta(x - x'), \quad (13.86)$$

mit

$$\Delta(x - x') = \frac{1}{2i} \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3k}{E_{\vec{k}}} \left( e^{-ik(x-x')} - e^{ik(x-x')} \right).$$

(Wir sind hier zum unendlichen Volumen übergegangen.) Die Distribution  $\Delta$  hat folgende Eigenschaften:

- i)  $(\square + m^2) \Delta(x) = 0$ .
- ii)  $\Delta$  ist Lorentz–invariant.
- iii) Es gilt  $\Delta(x) = 0$  für  $x^2 < 0$ .

Der Antikommutator (13.86) verschwindet also für raumartig getrennte Punkte  $x$  und  $x'$ . Deshalb heißen  $\hat{\Psi}$  und  $\hat{\bar{\Psi}}$  **kausale** relativistische Quantenfelder. Wir betonen noch, daß diese Felder selbst keine Observablen sind. Dies hängt mit der Eichfreiheit  $\psi \rightarrow e^{i\alpha}\psi$  und mit der Tatsache, daß  $\psi$  bei räumlichen Drehungen um  $2\pi$  sein Vorzeichen ändert, zusammen. Typische Observable sind bilineare Kombinationen, wie etwa die oben betrachteten. Dies sind Bosonen und man zeigt leicht, daß deren Kommutatoren für räumlich getrennte Punkte ebenfalls verschwinden. In die axiomatische Quantenfeldtheorie ist diese fundamentale Eigenschaft als Axiom der **Mikrokausalität** bzw. **Lokalität** eingegangen.

<sup>7</sup>Mathematisch wird dies durch die Vorschrift der *Normalordnung* realisiert, siehe [Bjorken/Drell]. Unendlichkeiten dieser Art trifft man bei naivem Rechnen in der QFT ständig an. Es gibt aber ein konsistentes Verfahren zur Beseitigung der unendlichen Beiträge – die *Renormierung*.

### 13.5 Zweite Quantisierung des elektromagnetischen Feldes

Wir umgehen alle Feinheiten, die damit zusammenhängen, daß die Maxwell–Theorie eine Eichfeldtheorie ist, d.h. wir fixieren die Eichung (Coulomb Eichung) von vornherein:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0, \quad A^0 = 0.$$

Damit haben wir die relativistische Kovarianz der Theorie natürlich gebrochen. Das Eichpotential erfüllt in dieser Eichung die klassische Feldgleichung (Maxwell–Gleichung)

$$\square \vec{A} = 0.$$

Das Potential hat 2 Freiheitsgrade, die durch den Polarisationsvektor  $\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}$ ,  $\lambda = 1, 2$ , beschrieben werden. Dieser bildet zusammen mit dem Wellenzahlvektor  $\vec{k}$  ein orthogonales Dreibein

$$\vec{k} \cdot \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda} = 0, \quad \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda} \cdot \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda'}^* = \delta_{\lambda\lambda'}, \quad (13.87)$$

und das Potential kann in dieser Basis folgendermaßen dargestellt werden:

$$\vec{A}(x) = \sum_{\vec{k},\lambda} \frac{1}{\sqrt{2k^0V}} \left( \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda} a_{\vec{k},\lambda} e^{-ikx} + \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}^* a_{\vec{k},\lambda}^* e^{ikx} \right), \quad k^0 = |\vec{k}|. \quad (13.88)$$

Dieses Feld hat Spin 1, d.h. es beschreibt Bosonen (Photonen). Im Rahmen der zweiten Quantisierung ersetzen wir also die Koeffizienten  $a$  und  $a^*$  durch Operatoren im bosonischen Fockraum  $\mathcal{F}^s$ ,

$$a_{\vec{k},\lambda} \rightarrow \hat{a}_{\vec{k},\lambda}, \quad a_{\vec{k},\lambda}^* \rightarrow \hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger,$$

und postulieren für diese die **kanonischen Vertauschungsrelationen**

$$[\hat{a}_{\vec{k},\lambda}, \hat{a}_{\vec{k}',\lambda'}^\dagger] = \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'}. \quad (13.89)$$

Alle anderen Kommutatoren verschwinden. Die Operatoren  $\hat{a}_{\vec{k},\lambda}$  bzw.  $\hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger$  sind Vernichter bzw. Erzeuger eines Photons mit Impuls  $\vec{k}$  und Spinprojektion  $\lambda$ . Für das quantisierte Feld des Vektorpotentials erhalten wir:

$$\vec{\hat{A}}(x) = \sum_{\vec{k},\lambda} \frac{1}{\sqrt{2k^0V}} \left( \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda} \hat{a}_{\vec{k},\lambda} e^{-ikx} + \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}^* \hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger e^{ikx} \right), \quad k^0 = |\vec{k}|. \quad (13.90)$$

Man kann nun wieder, wie im Falle des Dirac–Feldes, alle Observablen durch die Erzeuger und Vernichter ausdrücken. Um den Hamiltonoperator zu berechnen, verwenden wir, daß die Energie des klassischen Maxwell–Feldes durch

$$E = \frac{1}{2} \int d^3x \left( \vec{E}^2 + \vec{B}^2 \right)$$

gegeben ist. Auf Quantenniveau finden wir

$$\hat{\vec{E}} = -\frac{\partial \hat{\vec{A}}}{\partial t} = i \sum_{\vec{k},\lambda} \frac{k^0}{\sqrt{2k^0V}} \left( \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda} \hat{a}_{\vec{k},\lambda} e^{-ikx} - \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}^* \hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger e^{ikx} \right) \quad (13.91)$$

und

$$\hat{\vec{B}} = \vec{\nabla} \times \hat{\vec{A}} = i \sum_{\vec{k},\lambda} \frac{1}{\sqrt{2k^0V}} \left( \vec{k} \times \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda} \hat{a}_{\vec{k},\lambda} e^{-ikx} - \vec{k} \times \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}^* \hat{a}_{\vec{k},\lambda}^\dagger e^{ikx} \right). \quad (13.92)$$

Wenden wir die Regeln der zweiten Quantisierung auf die klassische Energie  $E$  an, so ergibt sich durch Einsetzen dieser Ausdrücke (und völlig analoge Rechnung wie für das Dirac-Feld) der folgende positiv definite Hamiltonoperator:

$$\hat{H} \equiv \hat{P}^0 = \sum_{\vec{k}, \lambda} k^0 \left( \hat{a}_{\vec{k}, \lambda}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}, \lambda} + \frac{1}{2} \right). \quad (13.93)$$

Wieder erhalten wir einen unendlichen Vakuumbeitrag, den wir weglassen. Analog berechnet man den Impuls des Quantenfeldes. Insgesamt ergibt sich der folgende **Energie-Impuls-Operator** des Maxwell-Feldes:

$$\hat{P}^\mu = \sum_{\vec{k}, \lambda} k^\mu \hat{a}_{\vec{k}, \lambda}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}, \lambda}. \quad (13.94)$$

### Bemerkungen 13.9

Wir machen eine abschließende Bemerkung zur Theorie der Wechselwirkung zwischen elektromagnetischem und Elektron-Positron-Feld, der **Quantenelektrodynamik** (QED). Die Wechselwirkung wird beschrieben durch den folgenden Lorentz-invarianten Kopplungsterm:

$$j_\mu(x) A^\mu(x),$$

wobei  $j_\mu$  natürlich den Viererstrom des Dirac-Feldes bezeichnet. Dieser Term wird durch das früher diskutierte Konzept der minimalen Kopplung nahegelegt. Der kanonische Formalismus liefert dann den folgenden **Hamiltonoperator der QED in der Coulombbeziehung**<sup>8</sup>:

$$H = H_{em} + H_D + H_{int},$$

wobei  $H_{em}$  und  $H_D$  die oben verwendeten Hamiltonfunktionen der freien Maxwell- bzw. Dirac-Theorie sind und

$$H_{int} = - \int d^3x \vec{j} \cdot \vec{A} + V_{coul}(0)$$

den Wechselwirkungshamiltonian beschreibt. Dabei ist  $V_{coul}(0)$  ein Coulomb-Anteil zum Zeitpunkt  $t = 0$ , definiert durch

$$V_{coul}(0) = \frac{1}{2} \int d^3x d^3y \frac{j^0(\vec{x}, 0) j^0(\vec{y}, 0)}{|\vec{x} - \vec{y}|}.$$

Man führt nun die zweite Quantisierung für  $H_0 = H_{em} + H_D$  wie oben beschrieben durch und entwickelt eine Störungstheorie auf der Basis des Wechselwirkungsterms  $H_{int}$ . Prinzipiell geht man dabei so vor, wie in Kapitel 8 beschrieben, d. h., man berechnet etwa die Streumatrix der Theorie Ordnung für Ordnung der Störungstheorie. Aufgrund der oben erwähnten, ständig auftretenden Unendlichkeiten hat man die Störungstheorie mit dem Konzept der Renormierung zu kombinieren. Die so entstehende QED ist eine der genauesten Theorien (was den Vergleich mit Experimenten betrifft), die wir kennen.

<sup>8</sup>Eine ausführliche Herleitung findet man in S. Weinberg: *The Quantum Theory of Fields*, Bd. I, Cambridge University Press