Quantentheorie der Vielteilchensysteme

Fabian Hassler

2026

Prof. Dr. Fabian Hassler
Institut für Quanteninformationstheorie
RWTH Aachen

Die Notizen stützen sich in wesentlichen Teilen auf das Vorlesungsskript von G. Blatter (ETH Zurich 2006). Für das Zur-Verfügung-Stellen des Skriptes möchte ich mich bei Gianni Blatter herzlich bedanken. Dank geht weiter an Lukas Grunwald, der vor allem im Kapitel 4 und im Anhang mitgearbeitet hat.

Tipp- und sonstige Fehler bitte F. Hassler mitteilen.

Dieses Werk steht unter der Lizenz CC BY-NC 4.0.

Inhaltsverzeichnis

1 Streutheorie **1**

1.1 Wellenpakete 1
1.2 Lippmann-Schwinger Gleichung 3
1.3 Differentieller Wirkungsquerschnitt 6
1.4 Partialwellenentwicklung 9
1.5 Optisches Theorem 13
1.6 Bornsche Näherung 14
1.7 Eikonalnäherung 17
1.8 Analytische Eigenschaften der Streumatrix 20
1.9 Niederenergetische Streuung 22

2 Identische Teilchen **27**

2.1 Beschreibung von N Teilchen 27
2.2 Beschreibung N identischer Teilchen 30
2.3 Fermionen und Bosonen 32
2.4 Spin und Statistik 32
2.5 Anwendungen 33

3 Atome **43**

3.1 Atom mit zwei Elektronen 43
3.2 Hartree- und Hartree-Fock-Näherung 45
3.3 Thomas-Fermi Abschirmung 49
3.4 Thomas-Fermi Atom 51
3.5 Hundsche Regeln 56
3.6 Zeeman-Aufspaltung im Magnetfeld 62

4 Zweite Quantisierung **65**
4.1 Darstellung des Problems in erster Quantisierung . . . 66
4.2 Besetzungszahldarstellung und Fockraum . . . 67
4.3 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren . . . 68
4.4 Basiswechsel . . . 71
4.5 Operatoren in zweiter Quantisierung . . . 73
4.6 Feldoperatoren . . . 77
4.7 Korrelationen im Fermi-Gas . . . 82
4.8 Paar-Korrelation . . . 85
4.9 Bewegungsgleichung . . . 88

5 Wechselwirkende Elektronensysteme **91**
5.1 Homogenes Elektronengas . . . 91
5.2 Supraleitung . . . 100

6 Dirac Gleichung **113**
6.1 Klein-Gordon Gleichung . . . 113
6.2 Dirac Gleichung . . . 115
6.3 Erhaltene Norm . . . 120
6.4 Freie Teilchen . . . 122
6.5 Interpretation . . . 123
6.6 Nichtrelativistischer Grenzfall . . . 128

A Sphärische Bessel-Funktionen **135**
A.1 Definition . . . 135
A.2 Entwicklung der Ebenen Welle . . . 137

B Spin- und Bahnrasse **139**
B.1 Symmetrische Gruppe S_N . . . 139
B.2 Beispiel: 2 Spin-1/2 Fermionen . . . 142
B.3 N Spin-1/2 Teilchen . . . 143
B.4 Irreduzible Darstellungen von S_N . . . 143
B.5 Bahnfunktionen mit definierter Symmetrie . . . 147
B.6 Spinfunktionen mit definierter Symmetrie . . . 149

B.7 Spin und Bahn 153

C $SU(n)$ mit Young-Diagrammen **157**

C.1 $SU(n)$ Tensoren und die Schur-Weyl Dualität 157

C.2 $SU(2)$ mit Young-Diagrammen 159

C.3 $SU(3)$ mit Young-Diagrammen 160

C.4 Konjugierte Darstellung 162

C.5 Produktdarstellungen und das Quark Modell 163

Literatur

G. Baym
Lectures on Quantum Mechanics
(Benjamin, Menlo Park, California, 1969)
gut, kompakt, modern

J.J. Sakurai
Modern Quantum Mechanics
(Addison Wesley, Reading, 1994) &
gut, modern

W. Nolting
Theoretische Physik
5. Quantenmechanik, 1 & 2, mit Übungen und Lösungen, (Zimmermann-Neufang, Ulmen, 1992)
Einstieg, klarer, moderner Aufbau

A. Messiah
Quantum Mechanics I & II
(North-Holland, Amsterdam, 1976)
vollständig

L.D. Landau und E.M. Lifshitz
Quantum Mechanics (Nonrelativistic theory)
Vol. 3 of the Course of Theoretical Physics, (Pergamon, Oxford, 1977)
Klassiker, alles enthalten

F. Schwabl
Quantenmechanik
(Springer, Berlin, 1990)
neueres Buch, eine alternative Themenwahl

Kapitel 1

Streutheorie

In diesem Kapitel werden wir uns 3D Streuproblemen widmen. Im Speziellen untersuchen wir die Streuung von Teilchen an zeitunabhängigen und radialsymmetrischen Streupotentialen. Die Resultate lassen sich mutis mutandis auf nicht-radialsymmetrische Potentiale verallgemeinern. Allerdings werden dann die Formeln aufgrund der fehlenden Symmetrie viel komplizierter ohne das man konzeptionell neue Resultate bekommt. Anders ist es, wenn das Potential zeitabhängig wird oder wenn die involvierten Teilchen interne Freiheitsgrade haben, da dann die Möglichkeit der inelastischen Streuung oder der kompletten Absorption bestehen. Diese Möglichkeiten werden hier nicht behandelt werden.

Wir untersuchen die unbeschränkte Bewegung eines Teilchen in ein Streupotential $V(\boldsymbol{r})$ das am Koordinatenursprung zentriert und kurzreichweitig ist, d. h. mit der Eigenschaft, dass $r\,V(\boldsymbol{r}) \to 0$ für $r \to \infty$. Das wichtige Beispiel des langreichweitigen Coulomb-Potential mit $V(\boldsymbol{r}) \propto 1/r$ werden wir später in den Übungen betrachten. Es ist im Allgemeinen möglich, dass $V(\boldsymbol{r})$ attraktive Regionen hat. Dann können gebundene Zustände mit $E < 0$ auftreten. Hier betrachten wir Streuzustände mit $E > 0$ und da $V(r \to \infty) \to 0$ sind diese Zustände asymptotisch frei.

1.1 Wellenpakete

Das einfallende Teilchen wird durch ein Wellenpaket beschrieben. Im Folgenden wird es wichtig sein, dass die Ausdehnung des Wellenpakets ξ größer ist als die Reichweite des Potentials a. Natürlich sollte aber die Ausdehnung ξ kleiner sein als die Entfernung zwischen Quelle/Detektor und Streuzentrum damit die verschiedenen Stadien des Streuproblems zeitlich getrennt sind. Zudem wollen wir annehmen, dass die Breite im Impulsraum genügend klein ist, so dass wir die Verbreiterung des Wellenpakets auf Grund der Dispersion vernachlässigen können.

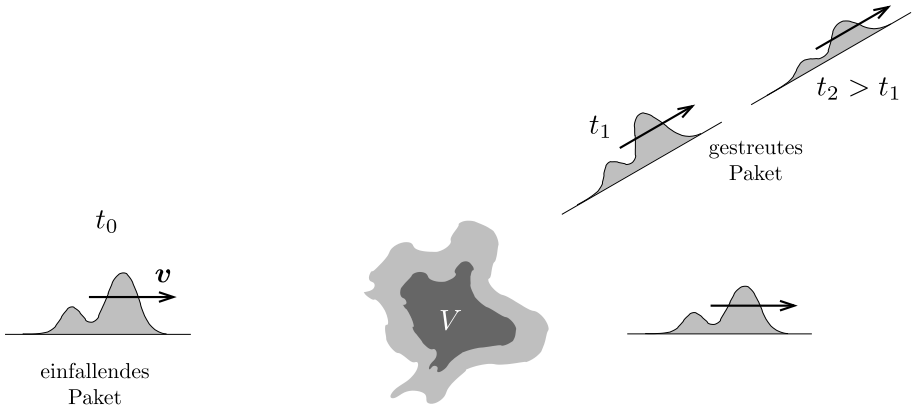


Abbildung 1.1: Streuung eines Wellenpakets: Das einfallende Paket wird mit Wahrscheinlichkeit $\propto |f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}})|^2$ in Richtung $\Omega_{\boldsymbol{r}} \equiv \hat{\boldsymbol{r}}$ gestreut. Beachte, dass die Amplitude des gestreuten Teils der Wellenfunktion wie r^{-1} zerfällt, vgl. (1.23).

Wir betrachten ein einfallendes Wellenpaket

$$\Psi(\boldsymbol{r}; t_0) = \psi_0(\boldsymbol{r}) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, a_{\boldsymbol{q}}\, e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{1.1}$$

welches zur Zeit $t = t_0$ weit links vom Streuer zentriert ist, siehe Abbildung 1.1. Die Amplitude $a_{\boldsymbol{q}}$ sei um $\boldsymbol{k}$ herum konzentriert, so dass sich das Paket sich mit der Geschwindigkeit $\boldsymbol{v} = \hbar\boldsymbol{k}/m$ dem Streuer nähert.[1] Die Zeitevolution der Wellenfunktion $\Psi(\boldsymbol{r}; t)$ bestimmt das im Detektor gemessene Signal zu einer späteren Zeit $t > t_0$. Unsere Aufgabe ist damit die Bestimmung von $\Psi(\boldsymbol{r}; t > t_0)$ im Speziellen nachdem es das Streuzentrum durchquert hat.

Seien nun $\Psi_{\boldsymbol{k}}$ die exakten Streuzustände, d. h. Lösungen der Eigenwertgleichung

$$H\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = E_k \Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}), \tag{1.2}$$

mit $H = p^2/2m + V(\boldsymbol{r})$ und der Definition $E_k \equiv \hbar^2 k^2/2m \geq 0$[2]. Die Streuzustände $\Psi_{\boldsymbol{k}}$ sind vollständig im Raum der ausgedehnten Wellenfunktionen und wir können die Zeitevolution von Ψ schreiben als

$$\Psi(\boldsymbol{r}; t) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, A_{\boldsymbol{q}} \Psi_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{r}) e^{-iE_q(t-t_0)/\hbar}. \tag{1.3}$$

Die Entwicklungskoeffizienten $A_{\boldsymbol{q}}$ werden wir später in Kapitel 1.3 bestimmen und zeigen, dass $A_{\boldsymbol{q}} = a_{\boldsymbol{q}}$. In der Entwicklung (1.3) tragen nur Streuzustände bei, da wir nur am asymptotischen Ausdruck für $r \to \infty$ interessiert sind und gebundene Zustände in diesem Bereich exponentiell abfallen.

[1] Konkret könnte man die Amplitude $a_{\boldsymbol{q}} = (\xi^2/2\pi)^{3/2} e^{-iq_z z_0 - (\boldsymbol{q}-k\hat{\boldsymbol{z}})^2/2\xi^2}$ mit $z_0 \gg a$ wählen.

[2] Wir schreiben v für die Norm $|\boldsymbol{v}| = \sqrt{\boldsymbol{v}^2}$ des Vektors $\boldsymbol{v}$.

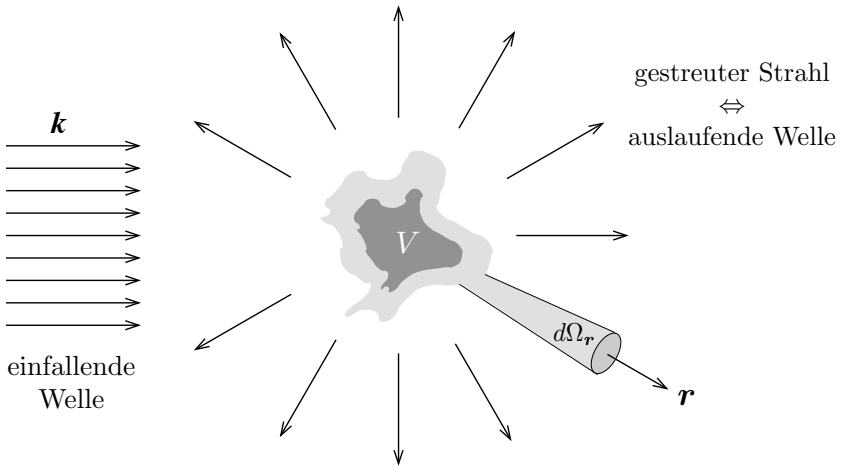


Abbildung 1.2: Streugeometrie: Die einfallende Welle $\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})$ wird durch das Potential $V(\boldsymbol{r})$ gestreut. Die gestreute Welle hat asymptotisch die Form einer im Raumwinkel $\Omega_{\boldsymbol{r}}$ modulierten Kugelwelle $f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}})\exp(ikr)/r$.

1.2 Lippmann-Schwinger Gleichung

Als nächstes wollen wir zumindest eine formale Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung (1.2) für die Streuzustände finden. Die Randbedingungen sind durch die Streugeometrie gegeben, siehe Abbildung 1.2. Demnach sollte die Wellenfunktion $\Psi_{\boldsymbol{k}}$ sich für große Distanzen r asymptotisch wie

$$\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \sim e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}})\frac{e^{ik_{\mathrm{s}}r}}{r} \tag{1.4}$$

verhalten. Der zweite Term proportional zu $\psi_{\mathrm{s}} = e^{ik_{\mathrm{s}}r}/r$ ist eine auslaufende Kugelwelle, wie man am Ausdruck für die Stromdichte

$$\boldsymbol{j}_{\mathrm{s}} = \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}(\psi_{\mathrm{s}}^{*}\partial_r\psi_{\mathrm{s}})\hat{\boldsymbol{r}} = \frac{\hbar k_{\mathrm{s}}}{mr^2}\hat{\boldsymbol{r}} = j_{\mathrm{s},r}\hat{\boldsymbol{r}} \tag{1.5}$$

ablesen kann. Für elastische Streuprozesse gilt $k_{\mathrm{s}} = k$. Die Streuamplitude $f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}})$ hängt von der Wellenzahl $\boldsymbol{k}$ (bzw. der Energie E_k und der Einfallsrichtung $\hat{\boldsymbol{k}}$) und dem Ausfallswinkel $\Omega_{\boldsymbol{r}}$ ab. Beachte, dass $\boldsymbol{k}$ keine erhaltenen Größe ist und die Wellenfunktion $\Psi_{\boldsymbol{k}}$ Impulskomponenten $\boldsymbol{k}'$ mit $\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}$ enthält.

In einem ersten Schritt lösen wir das Eigenwertproblem (1.2) mit der Randbedingung (1.4),

$$\underbrace{\left[\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + E_k\right]}_{\text{freie Propagation}}\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \underbrace{V(\boldsymbol{r})\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})}_{\text{Quelle}}, \tag{1.6}$$

wobei wir eine sinnvolle Gruppierung der Terme vorgenommen haben, die der Streugeometrie angepasst ist. Die Gleichung (1.6) ist nicht ein Eigenwertproblem im üblichen

Sinne (wo E_k unbekannt ist), sondern zu jeder Energie E_k können Lösungen gefunden werden. Die Gleichung (1.6) ist eine inhomogene partielle Differentialgleichung, wobei die Quelle $V(\boldsymbol{r})\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ von der Lösung $\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ abhängt. Derartige getriebene Differentialgleichungen löst man üblicherweise mit Hilfe von greenschen Funktionen. Wir lösen das Problem der freien Propagation für eine Punktquelle $\delta^{(3)}(\boldsymbol{r})$,

$$(E - H_0)\, G(\boldsymbol{r}; E) = \delta^{(3)}(\boldsymbol{r}) \qquad \text{und Randbedingungen für } G, \tag{1.7}$$

wobei wir den freien Hamilton-Operator $H_0 = p^2/2m$ eingeführt haben. Kennen wir die Lösung zu (1.7) so können wir die Lösung zu (1.6) schreiben als

$$\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \underbrace{e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}}_{\text{Lösung der hom. Gl.}} + \underbrace{\int d^3r'\, G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'; E_k) V(\boldsymbol{r}')\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}')}_{\substack{\text{Lösung der inhomogenen Gleichung} \\ \text{durch die „Quelle“ (=Streupotential) erzeugt.}}}. \tag{1.8}$$

Dabei ist die Lösung der homogenen Gleichung gerade die einfallene Welle und die Lösung der inhomogenen Gleichung ist die gestreute Welle. Zum Beweis, dass die Integralgleichung (1.8) äquivalent zum Problem (1.6) plus Randbedingungen ist, wenden wir den Operator $(E_k - H_0)$ auf (1.8) an mit Resultat

$$\begin{aligned}(E_k - H_0)\Psi_{\boldsymbol{k}} &= \int d^3r'\, [(E_k - H_0)G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'; E_k)]V(\boldsymbol{r}')\Psi'_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}') \\ &= \int d^3r'\, [\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')]V(\boldsymbol{r}')\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}') \\ &= V(\boldsymbol{r})\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}).\end{aligned} \tag{1.9}$$

Die ebene Welle in (1.8) ergibt den ersten Term der Asymptotik (1.4). Der zweite Term in (1.8) muss demnach dem Term $\propto \exp(ikr)/r$, $r \to \infty$ in (1.4) entsprechen. Um das zu zeigen, benötigen wir allerdings die Asymptotik der greenschen Funktion $G(\boldsymbol{r}; E)$. Wir bestimmen die greensche Funktion $G(\boldsymbol{r}; E)$ durch die Fouriertransformation von (1.7),

$$\int d^3r\, e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}(E - H_0)G(\boldsymbol{r}; E) = \int d^3r\, \delta^{(3)}(\boldsymbol{r}) e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}, \tag{1.10}$$

$$\left(E - \frac{\hbar^2 q^2}{2m}\right) G(\boldsymbol{q}; E) = 1,$$

$$G(\boldsymbol{q}; E) = \frac{1}{E - \hbar^2 q^2/2m} = \frac{1}{E - E_q}. \tag{1.11}$$

Durch Rücktransformation erhalten wir

$$\begin{aligned}G(\boldsymbol{r}; E) &= \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}}{E - E_q} = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty \frac{q^2 dq}{4\pi^2} \int_{-1}^1 dz \frac{e^{iqzr}}{q^2 - 2mE/\hbar^2} \\ &= -\frac{2m}{4\pi^2\hbar^2} \int_0^\infty dq\, q^2 \frac{2\sin qr}{qr} \frac{1}{q^2 - 2mE/\hbar^2} \\ &= -\frac{m}{2\pi^2\hbar^2 ir} \int_{-\infty}^\infty dq\, \frac{q e^{iqr}}{q^2 - 2mE/\hbar^2}.\end{aligned} \tag{1.12}$$

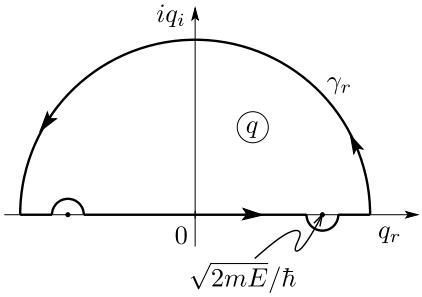


Abbildung 1.3: Integrationsweg in der komplexen q-Ebene. Durch einschließen der Polstelle bei $q = +\sqrt{2mE}/\hbar$ garantieren wir die Asymptotik einer auslaufenden Welle $\propto \exp[i(qr - Et/\hbar)]$. Die Polstelle bei $q = -\sqrt{2mE}/\hbar$ erzeugt eine einfallende Welle $\propto \exp[-i(qr + Et/\hbar)]$. Die Wahl der Kontur in der komplexen q-Ebene legt also die Randbedingung fest.

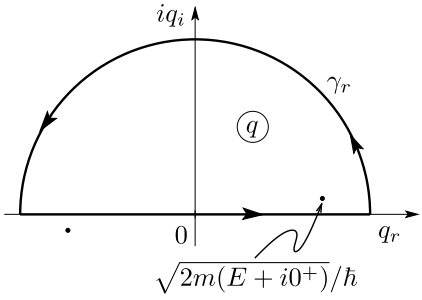


Abbildung 1.4: Durch Verschieben der Energie in die komplexe Ebene, $E \mapsto E + i0^+$, verschieben sich die Polstellen in die komplexe q-Ebene, $q = \pm\sqrt{2mE}/\hbar \mapsto \pm\sqrt{2m(E+i0^+)}/\hbar$. Die Integration entlang $\mathbb{R}$ berücksichtigt dann automatisch die richtige Polstelle in der oberen Halbebene.

Das letzte Integral kann mit Hilfe des Residuensatzes gelöst werden. Dabei ist es wichtig, als Randbedingung eine auslaufende Welle zu erhalten. Der Integrand von (1.12) besitzt Polstellen bei $q = \pm\sqrt{2mE}/\hbar$. Es ist $r > 0$ und somit müssen wir den Integrationsweg in der oberen Halbebene mit $q_i > 0$ schließen, da $i(q_r + iq_i)r = iq_r r - q_i r$ im Exponenten steht. Um eine auslaufende Welle für $r \to \infty$ zu erhalten, müssen wir die Polstelle bei $+\sqrt{2mE}/\hbar$ mitnehmen. Wir wählen deshalb den Integrationsweg γ_r gemäß Abbildung 1.3 und erhalten das Resultat

$$G(\boldsymbol{r}; E) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{i\sqrt{2mE}r/\hbar}}{r}. \tag{1.13}$$

Alternativ zum Weg γ_r können wir entlang der reellen Achse integrieren und der Energie einen kleinen Imaginärteil zuordnen, $E \mapsto E + i0^+$. Der Nenner $q^2 - 2m(E + i0^+)/\hbar^2$ hat dann Polstellen bei $\pm\sqrt{2m(E+i0^+)}/\hbar$, siehe Abbildung 1.4, und die Integration über $q \in \mathbb{R}$ nimmt automatisch nur den Pol bei $+\sqrt{2mE}/\hbar$ mit. Die greensche Funktion $G(\boldsymbol{r}; E + i0^+)$ nennt man wegen der Eigenschaft, dass sie eine auslaufende Welle produziert die retardierte greensche Funktion G^r. Die alternative Wahl $G^a(\boldsymbol{r}, E) = G(\boldsymbol{r}; E - i0^+) = -(m/2\pi\hbar^2)\exp[-i\sqrt{2mE}r/\hbar]/r$ erzeugt eine einfallende Welle (avancierte greensche Funktion). Die Wahl $E = E + i0^+$ legt damit die Randbedingungen fest. Mit (1.13) haben wir eine formale Lösung von (1.6)

gefunden,

$$\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + \int d^3r'\, G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}';E_k)V(\boldsymbol{r}')\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}'), \tag{1.14}$$

$$\text{mit} \quad G(\boldsymbol{r};E_k) \;=\; -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r}.$$

Natürlich haben wir (1.6) nicht wirklich gelöst, wir haben lediglich die Differentialgleichung unter Berücksichtigung der Randbedingungen in eine Integralgleichung umgeschrieben.

Gleichung (1.14) ist die Lippmann-Schwinger Gleichung; sie ist physikalisch transparent, berücksichtigt automatisch die Randbedingungen und eignet sich gut, um Näherungen zu implementieren. Außerdem hat sie die schöne Eigenschaft, dass sich die Orthogonalitäts- und Vollständigkeitsrelationen[3] von $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ auf $\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ übertragen, d. h. insbesondere sind die Wellenfunktionen zu verschiedenen $\boldsymbol{k}$ orthogonal und es gilt $\int d^3r\, \Psi_{\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{r})\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = (2\pi)^3\delta^{(3)}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')$.

Als nächstes schauen wir uns den Fernbereich $r \to \infty$ in (1.14) an, um die Asymptotik (1.4) zu verifizieren und einen Ausdruck für $f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}})$ [natürlich abhängig von $V(\boldsymbol{r})$] zu finden. Für $r \to \infty$ ist $k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'| = kr\sqrt{(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}'/r)^2} = kr[1 - 2\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{r}'/r + (r'/r)^2]^{1/2} \approx kr - k\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{r}'$. Damit lässt sich (1.14) umformen zu

$$\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \sim e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + \left[-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3r'\, e^{-ik\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{r}'}V(\boldsymbol{r}')\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}')\right]\frac{e^{ikr}}{r}, \tag{1.15}$$

und durch Vergleich mit (1.4) erhalten wir die Streuamplitude in der Form

$$f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3r'\, e^{-ik\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{r}'}V(\boldsymbol{r}')\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}'). \tag{1.16}$$

Die Streuamplitude hat die Einheit einer Länge und hängt nur von der Richtung $\hat{\boldsymbol{r}}$, d. h. $\Omega_{\boldsymbol{r}}$, aber nicht von der Entfernung vom Streuzentrum ab.

1.3 Differentieller Wirkungsquerschnitt

Als nächstes wollen wir den Zusammenhang zwischen der formalen Lösung im Besonderen der Streuamplitude $f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}})$ und dem differentiellen Wirkungsquerschnitt $d\sigma/d\Omega_{\boldsymbol{r}}$ (einer Messgröße) herstellen. Dazu erinnern wir uns an die Diskussion der Streuung eines Wellenpaketes in Kapitel 1.1. Für die konkrete Bestimmung der Zeitevolution des Wellenpaketes in (1.3) benötigen wir noch den Zusammenhang zwischen $a_{\boldsymbol{k}}$ (der Anfangsbedingung) und $A_{\boldsymbol{k}}$ (der Streulösung). Dies ist allerdings nach der ausführlichen Diskussion der Lippmann-Schwinger Gleichung nicht mehr schwer.

[3] Die Wellenfunktionen $\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ sind nur asymptotisch, d. h. für $r \to \infty$ vollständig. Um eine Vollständigkeitsrelation $\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = \int d^3k/(2\pi)^3\Psi^*_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}') + \sum_n \Psi^*_n(\boldsymbol{r})\Psi_n(\boldsymbol{r}')$ für den gesamten $\mathbb{R}^3$ zu bekommen, muss man zusätzlich mögliche gebundene Zustände $\Psi_n(\boldsymbol{r})$ berücksichtigen.

Zur Zeit t_0 (bevor der Streuung) müssen (1.1) und (1.3) übereinstimmen. Um eine Bedingung an $A_{\boldsymbol{k}}$ zu erhalten, schreiben wir (1.1) mit Hilfe von (1.14) um als

$$\Psi(\boldsymbol{r};t_0)=\psi_0(\boldsymbol{r})=\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}a_{\boldsymbol{q}}\left[\Psi_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{r})+\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3r'\,\frac{e^{iq|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}V(\boldsymbol{r}')\Psi_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{r}')\right]. \quad (1.17)$$

Wir werden diese Beziehung ausgewertet in der Nähe der Quelle $\boldsymbol{r}_Q=-r_Q\hat{\boldsymbol{k}}$, $r_Q\gg\xi$, dazu verwenden, um $A_{\boldsymbol{k}}$ zu bestimmen. Im zweiten Term haben wir folgenden Ausdruck zu berechnen,

$$\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,a_{\boldsymbol{q}}e^{iq|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\Psi_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{r}'). \quad (1.18)$$

Wir nehmen an, dass $\Psi_{\boldsymbol{q}}$ über dem Träger von $a_{\boldsymbol{q}}$, d. h. für $|\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k}|\lesssim\xi^{-1}$ mit ξ der Ausdehnung des Wellenpaketes, glatt ist, also keine Resonanzen hat (vgl. auch später). Damit ist $\Psi_{\boldsymbol{q}}\approx\Psi_{\boldsymbol{k}}$ und wir können den Streuzustand aus dem Integral in (1.18) ziehen. Wenn wir zusätzlich die Näherung $q=\boldsymbol{q}\cdot\hat{\boldsymbol{q}}\approx\boldsymbol{q}\cdot\hat{\boldsymbol{k}}$ verwenden, erhalten wir

$$\begin{aligned}\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}a_{\boldsymbol{q}}e^{iq|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\Psi_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{r}')&\approx\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}')\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,a_{\boldsymbol{q}}e^{i\boldsymbol{q}\cdot(\hat{\boldsymbol{k}}|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)}\\&\overset{(1.1)}{=}\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}')\psi_0(\hat{\boldsymbol{k}}|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|).\end{aligned} \quad (1.19)$$

Hier ist $\psi_0(\hat{\boldsymbol{k}}|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)$ die Amplitude (des einfallenden Wellenpakets) zum Anfangszeitpunkt am Ort $\hat{\boldsymbol{k}}|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$. Im Ausdruck (1.17) werden nur Position mit $|\boldsymbol{r}'|\lesssim a$ benötigt. Da das Teilchen am Anfangszeitpunkt t_0 bei der Quelle $\boldsymbol{r}_Q$ (weit weg vom Steuer) aufhält, gilt $\psi_0(\hat{\boldsymbol{k}}|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)\approx\psi_0(\hat{\boldsymbol{k}}\,r_Q)=\psi_0(-\boldsymbol{r}_Q)\approx 0$ und der zweite Term in (1.17) verschwindet. Der Rest hat die Form

$$\Psi(\boldsymbol{r};t_0)=\psi_0(\boldsymbol{r})=\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,a_{\boldsymbol{q}}\Psi_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{r}), \quad (1.20)$$

woraus ein Koeffizientenvergleich mit (1.3) $A_{\boldsymbol{q}}=a_{\boldsymbol{q}}$ liefert.

Eine Auswertung von $\Psi(\boldsymbol{r};t)$ für große t liefert die Wahrscheinlichkeitsverteilung zur Detektionszeit. Gemäß (1.3) ist (für $r\to\infty$)

$$\begin{aligned}\Psi(\boldsymbol{r};t)&=\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,a_{\boldsymbol{q}}\Psi_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{r})e^{-iE_q(t-t_0)/\hbar}\\&\overset{(1.15)}{\sim}\Psi_0(\boldsymbol{r};t)+\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,a_{\boldsymbol{q}}\frac{e^{iqr}}{r}f_{\boldsymbol{q}}(\Omega_{\boldsymbol{r}})e^{-iE_q(t-t_0)/\hbar};\end{aligned} \quad (1.21)$$

dabei beschreibt (wir benutzen $E_q\approx-\hbar^2k^2/2m+\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{q}$)

$$\Psi_0(\boldsymbol{r};t)=\overbrace{\int\frac{d^3q}{(2\pi)^3}\,a_{\boldsymbol{q}}\,e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}}^{=\psi_0(\boldsymbol{r})\text{ nach }(1.1)}e^{-iE_q(t-t_0)/\hbar}\approx e^{i\hbar k^2(t-t_0)/2m}\,\psi_0(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{v}(t-t_0)) \quad (1.22)$$

(bis auf einen unwichtigen Phasenfaktor) die Evolution des einfallenden Paketes ohne Streuer und Dispersion. Mit $f_{\boldsymbol{q}}$ glatt für $\boldsymbol{q} \approx \boldsymbol{k}$ (womit man $f_{\boldsymbol{q}} \approx f_{\boldsymbol{k}}$ vor das Integral ziehen kann) und $q \approx \boldsymbol{q} \cdot \hat{\boldsymbol{k}}$ (wie zuvor) erhalten wir

$$\Psi(\boldsymbol{r};t) \overset{t \text{ groß}}{\longrightarrow} \underbrace{\Psi_0(\boldsymbol{r};t)}_{\text{ungestreutes Wellenpaket}} + \underbrace{\frac{f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}})}{r}\Psi_0(\hat{\boldsymbol{k}}\, r;t).}_{\text{gestreutes Paket}} \tag{1.23}$$

Der Streuprozess ist in Abbildung 1.1 skizziert. Gemäß (1.23) involviert er die Superposition des ungestreuten Wellenpaketes und eines in Richtung $\Omega_{\boldsymbol{r}}$ gestreuten Paketes. Letzteres involviert die Amplitude $\Psi_0(\hat{\boldsymbol{k}}\, r;t)$ eines in Vorwärtsrichtung propagierenden Paketes, welches zur richtigen Zeit in der richtigen Distanz auszuwerten ist. Diese Paket wird dann multipliziert mit der winkelabhängigen Streuamplitude $f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}})/r$. Beachte, dass die obige Formel (1.23) in zwei Fällen nicht anwendbar ist:

- falls $V(r)$ langreichweitig ist, z. B. $V(r) = r^{-1}$,
- falls die einfallende Energie E_k resonant ist.

Die Streuamplitude $f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}})$ enthält die notwendige Information, um den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\boldsymbol{r}}} = \frac{dN(\Omega_{\boldsymbol{r}})}{N_{\text{in}}\, d\Omega_{\boldsymbol{r}}} = \frac{\text{Zahl der in } d\Omega \text{ gestreuten Teilchen}}{\text{einfallende Teilchen pro cm}^2 \times d\Omega_{\boldsymbol{r}}} \tag{1.24}$$

zu berechnen. Dieser hat die Einheit einer Fläche hat mit $[d\sigma/d\Omega_{\boldsymbol{r}}] = \text{cm}^2, \text{barn}$; $1\,\text{barn} = 10^{-24}\,\text{cm}^2$.

Die Dichte der einfallenden Teilchen N_{in} und die Anzahl der in den Raumwinkel $d\Omega$ gestreuter Teilchen $dN(\Omega_{\boldsymbol{r}})$ sind gegeben durch

$$N_{\text{in}} = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, j_{\text{in}}(\boldsymbol{r}_Q;t), \qquad dN(\Omega_{\boldsymbol{r}}) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, j_{\text{s},r}(\boldsymbol{r};t)\, \underbrace{r^2\, d\Omega_{\boldsymbol{r}}}_{\text{Fläche des Detektors}}.$$

Das Einsetzen der Ausdrücke für die einfallende und gestreute Stromdichte,[4]

$$\boldsymbol{j}_{\text{in}}(\boldsymbol{r};t) = \frac{\hbar}{m}\,\text{Im}\,(\Psi_0^*\boldsymbol{\nabla}\Psi_0) = \frac{\hbar\boldsymbol{k}}{m}|\Psi_0(\boldsymbol{r};t)|^2, \tag{1.25}$$

$$\begin{aligned} j_{\text{s},r}(\boldsymbol{r};t) &= \frac{\hbar}{m}\,\text{Im}\left[\frac{f^*}{r}\Psi_0^*(\hat{\boldsymbol{k}}r;t)\partial_r\frac{f}{r}\Psi_0(\hat{\boldsymbol{k}}r;t)\right] \\ &\approx \frac{\hbar k}{m}\frac{|f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}})|^2}{r^2}|\Psi_0(\hat{\boldsymbol{k}}r;t)|^2, \end{aligned} \tag{1.26}$$

liefern den differentiellen Wirkungquerschnitt in der Form

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\boldsymbol{r}}} = \frac{|f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}})|^2 \int dt |\Psi_0(\hat{\boldsymbol{k}}r;t)|^2}{\int dt\, |\Psi_0(\boldsymbol{r}_Q;t)|^2} = |f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}})|^2, \tag{1.27}$$

[4] Wir benutzen $\partial_r\Psi_0(\hat{\boldsymbol{k}}r;t) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\, i\boldsymbol{q}\cdot\hat{\boldsymbol{k}}\, a_{\boldsymbol{q}}\, e^{i\boldsymbol{q}\cdot\hat{\boldsymbol{k}}r} e^{-iE_q(t-t_0)/\hbar} \approx ik\Psi_0(\hat{\boldsymbol{k}}r;t)$.

mit $\int dt\,|\Psi_0(\hat{\boldsymbol{k}}r;t)|^2 = \int dt\,|\Psi_0(\boldsymbol{r}_Q;t)|^2 = \int dt\,|\psi_0(\boldsymbol{v}t)|^2$ nach (1.22). Schließlich definieren wir noch den totalen Wirkungsquerschnitt als

$$\sigma = \int d\Omega_{\boldsymbol{r}}\,|f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}})|^2\,. \tag{1.28}$$

1.4 Partialwellenentwicklung

Für rotationssymmetrische Streupotentiale $V(r)$ vertauscht der Hamilton-Operator $H = p^2/2m + V(r)$ mit den Drehimpulsoperatoren $\boldsymbol{L}$. Demzufolge lässt sich das Winkelproblem abseparieren, und wir können das Streuproblem gemäß den irreduziblen Darstellungen der Drehgruppe zerlegen. Diese Partialwellenzerlegung reduziert das Problem auf die Lösung der Teilprobleme in den verschiedenen Drehimpulssektoren[5]: Wir zerlegen den Gesamthilbertraum $L^2(\mathbb{R}^3)$ gemäß $L^2(\mathbb{R}^3) = L^2(\mathbb{R}^+) \otimes [\oplus_l \mathcal{H}_l]$ und lösen die Partialprobleme in $L^2(\mathbb{R}^+) \otimes \mathcal{H}_l$, wo das Winkelproblem trivial (d. h. bereits diagonalisiert) ist. Wir nutzen die Rotationssymmetrie vollständig aus indem wir ein Koordinatensystem mit der z-Achse parallel zum einfallenden Strahl wählen, $\hat{\boldsymbol{z}} \parallel \boldsymbol{k}$. Das ganze Problem ist dann rotationssymmetrisch bezüglich Drehungen um die $z-$Achse. Es treten nur Quantenzahlen mit $m = 0$ auf, da das einfallende Teilchen keinen Drehimpuls entlang der Bewegungsrichtung aufweisen kann. Die Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ reduzieren sich in diesem Fall auf die Legendre Polynome $Y_{l0}(\theta,\varphi) \propto P_l(\cos\theta)$ mit der Normierung

$$\int_{-1}^{1} dz\, P_l(z) P_{l'}(z) = \frac{2}{2l+1}\delta_{ll'}, \tag{1.29}$$

so dass $P_l(1) = 1$. Weiterhin müssen wir die einfallende Welle in Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators entwickeln,

$$\begin{aligned} e^{ikr\cos\theta} &= \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos\theta) j_l(kr) \\ &= \frac{1}{2}\sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos\theta)[h_l^{(1)}(kr) + h_l^{(2)}(kr)], \end{aligned} \tag{1.30}$$

wobei wir die sphärischen Bessel-Funktionen j_l and Hankel-Funktionen $h_l^{(1,2)}$ eingeführt haben. Einen kleinen Exkurs über sphärische Bessel-Funktionen und einen Beweis von (1.30) gibt es in Anhang A.

Wir können zudem die gesuchte stationäre Lösung $\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ in Partialwellen entwickeln,

$$\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1)\, \underbrace{P_l(\cos\theta)}_{\propto Y_{l0}}\, R_l(r), \tag{1.31}$$

[5] Der $2l+1$ dimensionale Hilbertraum $\mathcal{H}_l = \{Y_{lm}\}_{m=-l}^{m=l}$ wird von den Kugelfunktionen zu l aufgespannt

wobei der Faktor $i^l(2l+1)$ eine Konvention ist, welche sich durch Vergleich mit (1.30) erklärt. Setzen wir den Ansatz (1.31) in die stationäre Schrödingergleichung $H\Psi_{\boldsymbol{k}} = E_k\Psi_{\boldsymbol{k}}$ ein, so erhalten wir das Radialproblem

$$\left[-\frac{p_r^2}{2m} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right] R_l(r) = V(r)R_l(r); \tag{1.32}$$

mit $p_r^2/\hbar^2 = -r^{-1}\partial_r^2 r$ führt dies auf die Differentialgleichung

$$\left[\partial_r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2\right] r\, R_l(r) = \frac{2m}{\hbar^2} rV(r)R_l(r), \tag{1.33}$$

wobei $\Psi_{\boldsymbol{k}}$ die Randbedingung (1.4) erfüllen muss. Für $r \to \infty$ geht $rV(r) \to 0$ und die rechte Seite der Gleichung wird verschwindend klein, so dass (1.33) sich auf eine Besselgleichungreduziert, siehe Anhang A. Im Fernfeld ($r \to \infty$) muss daher $R_l(r)$ die asymptotische Form

$$R_l(r) \sim \alpha_l \left[h_l^{(2)}(kr) + S_l\, h_l^{(1)}(kr)\right], \tag{1.34}$$

haben mit

$$h_l^{(1,2)}(\rho) \sim \frac{1}{\rho}\exp[\pm i(\rho - (l+1)\pi/2)], \qquad \rho = kr, \tag{1.35}$$

den beiden Fundamentallösungen für $V \equiv 0$, der einfallenden und auslaufenden Kugelwellen in der Form von Hankel-Funktionen.

Als nächstes müssen wir die Koeffizienten α_l und S_l, die Funktionen von k bzw. E_k sind, bestimmen; für $V \equiv 0$ gilt offensichtlich

$$R_l(r) \;=\; j_l(kr) = \frac{1}{2}\left[h_l^{(2)}(kr) + h_l^{(1)}(kr)\right], \tag{1.36}$$

und somit ist $\alpha_l = 1/2$ und $S_l = 1$. Für $V \not\equiv 0$ ändert sich die einfallende Welle $h_l^{(2)}$ nicht, wohl aber die auslaufende Komponente $h_l^{(1)}$, weshalb letztere ein nichttriviales Gewicht $S_l \neq 1$ bekommt. Es ist einfach zu sehen, dass für elastische Streuung die Teilchenzahlerhaltung verlangt, dass $|S_l(E_k)| = 1$ ist. Dies folgt, da für in der stationären Lösung die totale radiale Stromdichte [hier benutzen wir, dass $\int dz\, P_l^2(z) = 2/(2l+1)$]

$$\begin{aligned} j_{\mathrm{s},r}(r) &= \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\,(R_l^*\,\partial_r R_l) \\ &\downarrow \quad 2R_l \sim \left[e^{-i(kr-\phi_l)}/kr + S_l\, e^{i(kr-\phi_l)}/kr\right], \quad \phi_l = (l+1)\pi/2 \\ &\sim \frac{\hbar}{4mkr^2}\left[|S_l|^2 - 1\right] \end{aligned} \tag{1.37}$$

verschwinden muss, damit pro Zeiteinheit gleich viele Teilchen einfallen wie auslaufen. Wir können dann die komplexe Amplitude S_l

$$S_l(E_k) = e^{2i\delta_l(E_k)} \tag{1.38}$$

durch die reelle Streuphase $\delta_l(E_k)$ ausdrücken.[6]

Die Streuphasen δ_l beschreiben das Streuproblem komplett, indem sie die Streuamplitude $f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}})$ festlegten. Um diesen Zusammenhang zu bestimmen, bringen wir die Lösung (1.31) im asymptotischen Bereich wo der Ausdruck

$$\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \sim \frac{1}{2}\sum_l i^l(2l+1)P_l(\cos\theta)\left[h_l^{(2)}(kr) + e^{2i\delta_l}h_l^{(1)}(kr)\right] \tag{1.39}$$

gültig ist, mit Hilfe von (1.30) auf die Form

$$\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \sim e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + \underbrace{\frac{1}{2}\sum_l i^l(2l+1)P_l(\cos\theta)\left[e^{2i\delta_l}-1\right]h_l^{(1)}(kr)}_{\sim f_{\boldsymbol{k}}(\theta)e^{ikr}/r}. \tag{1.40}$$

Der Vergleich mit (1.4) $[h_l^{(1)} \sim (-i)^{l+1}e^{ikr}/kr]$ liefert die Streuamplitude

$$\begin{aligned} f_{\boldsymbol{k}}(\theta) &= \frac{1}{2ik}\sum_l (2l+1)P_l(\cos\theta)\left[e^{2i\delta_l}-1\right] \\ &= \frac{1}{k}\sum_l (2l+1)P_l(\cos\theta)e^{i\delta_l}\sin\delta_l. \end{aligned} \tag{1.41}$$

Der Ausdruck

$$\frac{\exp(2i\delta_l)-1}{2ik} = \frac{\exp(i\delta_l)\sin(\delta_l)}{k} = f_l \tag{1.42}$$

wird die Partialwellenamplitude genannt. Den totalen Wirkungsquerschnitt σ erhalten wir durch eine Winkelintegration,

$$\begin{aligned} \sigma &= \int d\Omega_{\boldsymbol{r}}\,|f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}})|^2 \\ &= \frac{4\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)\sin^2\delta_l = 4\pi\sum_l (2l+1)|f_l|^2. \end{aligned} \tag{1.43}$$

Die Größen

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2\delta_l \;=\; 4\pi(2l+1)|f_l|^2 \tag{1.44}$$

[6] In der allgemeinene Streutheorie ist $S_l(E_k)$ ein Eigenwert der S-matrix. Die S-matrix ist dann unitär wegen der Teilchenzahlerhaltung. Hier konnten wir auf Grund der Kugelsymmetrie des Streuproblems und der Annahme, dass wir nur elastische Streuung haben, das Problem auf einen eindimensionalen Unterraum reduziert.

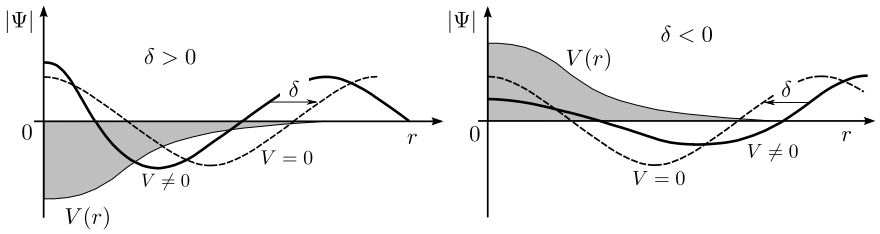


Abbildung 1.5: Phasenverschiebungen $\delta_l(E_k)$: Ein attraktives Potential (links) erhöht die kinetische Energie und die Wellenfunktion oszilliert schneller, was zu einer positiven Phasenverschiebung führt. Umgekehrt verlangsamt ein repulsives Potential (rechts) die Oszillation der Wellenfunktion und erzeugt ein negatives $\delta_l(E_k)$.

heißen partielle Wirkungsquerschnitte. Offensichtlich ist $\sigma_l \leq 4\pi(2l+1)/k^2$. Beachte, dass im totalen Wirkungsquerschnitt die verschiedenen Beiträge der Drehimpulssektoren sich einfach addieren und es keine Interferenz zwischen den verschiedenen Partialwellen gibt. Es ist allerdings nicht so, dass alle Größen sich einfach durch Addition der Ausdrücke der Partialwellen ergeben; zum Beispiel erhält man für $d\sigma/d\Omega_{\boldsymbol{r}}$ Interferenzterme der verschiedenenen Sektoren.

Die Phasenverschiebung $\exp(2i\delta_l)$ lässt sich auf einfache Weise physikalisch deuten. Die Wellenfunktion $R_l(r)$ hat die asymptotische Form

$$\begin{aligned} R_l(r) \sim \frac{1}{2}\left[h_l^{(2)}(kr) + e^{2i\delta_l} h_l^{(1)}(kr)\right] &\sim \frac{e^{i\delta_l}}{2}\left[\frac{(-i)^l e^{i(kr+\delta_l)}}{kr} + \frac{(+i)^l e^{-i(kr+\delta_l)}}{kr}\right] \\ &\overset{kr\gg\delta_l}{\sim} \frac{e^{i\delta_l}}{2}\left[\frac{(-i)^l e^{i(kr+\delta_l)}}{kr+\delta_l} + \frac{(+i)^l e^{-i(kr+\delta_l)}}{kr+\delta_l}\right] \sim e^{i\delta_l} j_l(kr+\delta_l). \end{aligned} \tag{1.45}$$

Vergleichen wir nun den Fall

$$V \equiv 0: \qquad R_l(r) = j_l(kr) \tag{1.46}$$

mit

$$V \not\equiv 0: \qquad R_l(r) \sim e^{i\delta_l} j_l(kr+\delta_l), \tag{1.47}$$

so sehen wir, dass eine positive Phasenverschiebung $\delta_l > 0$ die Wellenfunktion „ins Potential reinzieht“, während eine negative Phasenverschiebung $\delta_l < 0$ die Welle „rausdrückt“, siehe Abbildung 1.5.

1.5 Optisches Theorem

Betrachten wir den Imaginärteil der Vorwärtsstreuamplitude $f_{\boldsymbol{k}}(\theta = 0)$ in (1.41),

$$\begin{aligned} \text{Im } f_{\boldsymbol{k}}(\theta = 0) &= \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) P_l(\cos\theta) \sin^2 \delta_l \Big|_{\theta=0} \\ &= \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l \;=\; \frac{k}{4\pi} \underbrace{\frac{4\pi}{k^2} \sum (2l+1) \sin^2 \delta_l}_{\sigma} . \end{aligned} \tag{1.48}$$

so erhalten wir direkt das optische Theorem

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im } f_{\boldsymbol{k}}(\theta = 0). \tag{1.49}$$

Der physikalische Grund für das optische Theorem findet man in der Erhaltung der Teilchenzahl. Der gestreute Teilchenstrom $\propto \sigma$ muss dem einfallenden Strom durch Streuung entnommen werden und fehlt damit in der Vorwärtsamplitude ($\propto f_{\boldsymbol{k}}(\theta = 0)$). Es ist die Interferenz der Streuwelle mit der einfallenden Welle, welche die ungestreute Welle vermindert und damit einen Schatten des Streuers in Vorwärtsrichtung erzeugt. Die im Schatten fehlenden Teilchen sind gerade diejenigen, welche gestreut wurden. Die Relation (1.49) ist allgemein gültig, solange die Teilchenzahl erhalten bleibt, was der Fall ist, wenn kein Einfang und keine Umwandlung der Teilchen erfolgt.

Um das optische Theorem für ein allgemeines Potential (das nicht unbedingt radialsymmetrisch ist) zu zeigen, betrachten wir die radiale Stromdichte $j_r = (\hbar/m)\,\text{Im}(\Psi^* \partial_r \Psi)$ eines Wellenpaketes nach dem Streuvorgang in der Form (1.23). Die radiale Stromdichte

$$j_r(\boldsymbol{r}; t) = j_{\text{in},r}(\boldsymbol{r}; t) + j_{\text{s},r}(\boldsymbol{r}; t) + j_{r,\text{int}}(\boldsymbol{r}; t) \tag{1.50}$$

ist zusammengesetzt aus der einfallenden Stromdichte, $j_{\text{in},r}(\boldsymbol{r}; t) = \boldsymbol{j}_{\text{in}}(\boldsymbol{r}; t) \cdot \hat{\boldsymbol{r}} = (\hbar \boldsymbol{k} \cdot \hat{\boldsymbol{r}}/m)|\Psi_0(\boldsymbol{r}; t)|^2$ (1.25), der gestreuten Stromdichte $j_{\text{s},r}$ (1.26) und der Interferenzstromdichte zwischen der gestreuten und der transmittierten Wellenfunktion[7]

$$j_{\text{int},r}(\boldsymbol{r}; t) = \frac{\hbar k}{mr} \text{Im} \left[i f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}}) \Psi_0^*(\boldsymbol{r}; t) \Psi_0(\hat{\boldsymbol{k}} r; t)(1 + \hat{\boldsymbol{k}} \cdot \hat{\boldsymbol{r}}) \right]. \tag{1.51}$$

Als nächstes benutzen wir, dass $\Psi_0(\hat{\boldsymbol{k}} r; t)$ nur zu Zeiten nicht verschwindet, zu denen das Teilchen schon am Streuzentrum angekommen ist. In diesem Fall ist $\Psi_0(\boldsymbol{r}; t)$ (und damit der Interferenzstrom) nur in Vorwärtsrichtung von null verschieden. Somit können wir im Ausdruck für $j_{\text{int},r}$ die Beziehungen $\hat{\boldsymbol{k}} \cdot \hat{\boldsymbol{r}} = 1$ und $f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}}) = f_{\boldsymbol{k}}(\theta = 0)$ verwenden.

Im Grunde produziert der Interferenzterm den Schatten des Streuers, indem es den Strom in Vorwärtsrichtung kleiner als die einfallende Stromdichte $j_{\text{in},r}$ und damit den Strom in Vorwärtsrichtung um den gestreuten Strom absenkt. Damit die

[7] Wir benutzen $\partial_r \Psi_0(\hat{\boldsymbol{k}} r; t) \approx ik \Psi_0(\hat{\boldsymbol{k}} r; t)$, $\partial_r \Psi_0(\boldsymbol{r}; t) \approx (i\boldsymbol{k} \cdot \hat{\boldsymbol{r}}) \Psi_0(\boldsymbol{r}; t)$, vgl. Kapitel 1.3.

Gesamtteilchenzahl erhalten bleibt, muss Gesamtzahl der gestreuten Teilchen gerade den Teilchen entsprechen, welche dem einfallenden Teilchenstrahl entnommen werden. Oder in anderen Worten: Das Integral von (1.51) über alle Raumwinkel und Zeiten muss genau minus dem Integral von (1.26) über alle Raumwinkel und Zeiten sein. Nun haben wir aber

$$\int d\Omega_{\boldsymbol{r}}\, j_{\mathrm{int},r}(\boldsymbol{r};t) = \frac{2\hbar k}{r}\,\mathrm{Im}\left[i f_{\boldsymbol{k}}(\theta=0)\Psi_0(\hat{\boldsymbol{k}}r;t)\int d\Omega_{\boldsymbol{r}}\,\Psi_0^*(\boldsymbol{r};t)\right]. \tag{1.52}$$

Für die Winkelintegration des Wellenpaket Ψ_0, (1.22), benötigen wir [$q \approx \boldsymbol{q}\cdot\hat{\boldsymbol{k}}$ siehe (1.19)]

$$\int d\Omega_{\boldsymbol{r}}\, e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} = 2\pi\int_{-1}^{1} d(\cos\theta) e^{iqr\cos\theta} \overset{\boldsymbol{q}\approx\boldsymbol{k}}{\approx} \frac{2\pi(e^{i\boldsymbol{q}\cdot\hat{\boldsymbol{k}}r} - e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\hat{\boldsymbol{k}}r})}{ikr}.$$

Somit erhalten wir

$$\int d\Omega_{\boldsymbol{r}}\,\Psi_0(\boldsymbol{r};t) = \frac{2\pi}{ikr}[\Psi_0(\hat{\boldsymbol{k}}r;t) - \Psi_0(-\hat{\boldsymbol{k}}r;t)],$$

und (1.52) wird zu

$$\int d\Omega_{\boldsymbol{r}}\, j_{\mathrm{int},r}(\boldsymbol{r};t) = -\frac{4\pi\hbar}{mr^2}\,\mathrm{Im}\, f_{\boldsymbol{k}}(\theta=0)|\Psi_0(\hat{\boldsymbol{k}}r;t)|^2, \tag{1.53}$$

da $\Psi_0(\hat{\boldsymbol{k}}r;t)\Psi_0(-\hat{\boldsymbol{k}}r;t) = 0$ im Fernfeld. Wenn wir nun (1.53) mit dem Integral von (1.26) über alle Winkel vergleichen, finden wir das optische Theorem $\sigma = (4\pi/k)\,\mathrm{Im}\, f_{\boldsymbol{k}}(\theta=0)$. Beachte, dass dieser Beweis unabhängig von einer mögliche Radialsymmetrie des Streuproblems ist.

1.6 Bornsche Näherung

Außer in speziellen Fällen kann man die Streuamplitude oder die Phasenverschiebungen nur numerisch bestimmen, indem man (1.14) bzw. (1.33) löst. Für schwache Potentiale (was genau ein „schwaches“ Potential ist, werden wir später genauer definieren) kann man versuchen, die Lippmann-Schwinger Gleichung (1.14) iterativ zu lösen,

$$\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + \int d^3r'\, G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}';E_k)V(\boldsymbol{r}')\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}') \tag{1.54}$$

$\downarrow$

0^{te} Näherung

1^{te} 2^{te} n^{te}

$$
\begin{aligned}
\delta\Psi_{\boldsymbol{k}}^{(0)}(\boldsymbol{r}) &= e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}, \\
\delta\Psi_{\boldsymbol{k}}^{(1)}(\boldsymbol{r}) &= \int d^3r'\, G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}';E_k)V(\boldsymbol{r}')\overbrace{e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}}^{\delta\Psi_{\boldsymbol{k}}^{(0)}(\boldsymbol{r}')}, \\
&\vdots \\
\delta\Psi_{\boldsymbol{k}}^{(n)}(\boldsymbol{r}) &= \int d^3r'\, G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}';E_k)V(\boldsymbol{r}')\delta\Psi_{\boldsymbol{k}}^{(n-1)}(\boldsymbol{r}'), \\
\rightarrow \Psi_{\boldsymbol{k}}^{(N)}(\boldsymbol{r}) &= \sum_{n=0}^{N}\delta\Psi_{\boldsymbol{k}}^{(n)}(\boldsymbol{r}).
\end{aligned}
\tag{1.55}
$$

Für $N<\infty$ ist (1.55) die N^{te} bornsche Näherung, der Grenzfall $N\to\infty$ ergibt die bornsche Reihe.

Im Weiteren werden wir nur die erste bornsche Näherung,

$$
\Psi_{\boldsymbol{k}}^{(1)}(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + \int d^3r'\, G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}';E_k)V(\boldsymbol{r}')\, e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'},
\tag{1.56}
$$

verwenden. Für die Streuamplitude $f_{\boldsymbol{k}}^{(1)}(\Omega_{\boldsymbol{r}})$ finden wir aus (1.16)

$$
f_{\boldsymbol{k}}^{(1)}(\Omega_{\boldsymbol{r}}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3r'\, V(\boldsymbol{r}')\, e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}'}
\tag{1.57}
$$

mit dem $\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}_s=k\hat{\boldsymbol{r}}$; d. h. $f_{\boldsymbol{k}}^{(1)}(\Omega_{\boldsymbol{r}})$ ist proportional zu der Fouriertransformierten $V_{\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}}$ des Streupotentials.

Als nächstes möchten wir einen expliziten Ausdruck für die Streuphasen δ_l eines sphärisch symmetrischen Potentials bekommen. Dazu verwenden wir, dass die Streuamplitude in diesem Fall nur von $q=|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'|=2k|\sin(\theta/2)|$ abhängt, siehe Abbildung 1.6. Die Winkelintegration in (1.57) kann daher direkt ausgeführt werden, und wir erhalten (Ω' ist der Winkel zwischen $\boldsymbol{r}'$ und $\boldsymbol{q}$)

$$
\begin{aligned}
f_{\boldsymbol{k}}^{(1)}(\theta) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int_0^{2\pi} dr'\, r'^2\, V(r')\overbrace{\int d\Omega'\, e^{iqr'\cos\theta'}}^{2\pi(e^{iqr'}-e^{-iqr'})/iqr'} \\
&= -\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^{\infty} dr'\, r'^2\, V(r')\frac{\sin(qr')}{qr'}
\end{aligned}
\tag{1.58}
$$

Verwenden wir nun das Additionstheorem der Legendre Polynome[8]

$$
\frac{\sin\Big[2x\sin(\theta/2)\Big]}{2x\sin(\theta/2)} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)j_l^2(x)
\tag{1.59}
$$

[8] Siehe Abramowitz und Stegun 10.1.45.

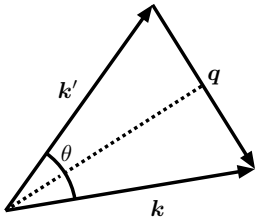


Abbildung 1.6: Skizze des Streuwinkel θ, wobei $\boldsymbol{q} = \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'$. Da das Dreieck gleichschenklig ist, halbiert die Höhenlinie (gestrichelte Line) das Dreieck und es gilt $q = 2k|\sin(\theta/2)|$.

mit $x = kr'$ und (1.41), erhalten wir den Ausdruck der Streuphasenverschiebung

$$\delta_l^{(1)}(E_k) \approx e^{i\delta_l}\sin(\delta_l) = -\frac{2mk}{\hbar^2}\int_0^\infty dr\, r^2\, V(r)\, j_l^2(kr). \tag{1.60}$$

in der bornschen Näherung.

Die Gültigkeit der Näherung muss von Fall zu Fall geprüft werden. Es ist sicher notwendig, dass $|\delta\Psi^{(1)}(r)| \ll |\delta\Psi^{(0)}(\boldsymbol{r})| = 1$ ist; also

$$\left|\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3r' V(\boldsymbol{r}')\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}\right| \ll 1. \tag{1.61}$$

Für große Teilchenenergien und schwaches Streupotential, so dass $V_0\, ka \ll E_k$, (wobei $V_0 \geq 0$ die Stärke und a die Ausdehnung von $V(r)$ bezeichnen), ist die bornsche Näherung zulässig. Um dies zu zeigen, untersuchen wir $r = 0$ (dort ist $\delta\Psi^{(1)}(r)$ mit am Größten). Die Korrektur der Wellenfunktion $|\delta\Psi^{(1)}(r=0)|$ lässt sich schreiben als

$$\left|\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3r'\frac{V(r')}{r'}\, e^{ikr'(1+\cos\theta')}\right| = \left|\frac{m}{\hbar^2 k}\int_0^\infty dr'\, V(r')\left(e^{2ikr'}-1\right)\right|.$$

Für $ka \gg 1$ und V genügend glatt mittelt sich der Faktor $\propto \exp(2ikr')$ weg und wir erhalten mit $V(r) \approx V_0$ (für $r < a$)

$$\left|\frac{m}{\hbar^2 k}\int_0^\infty dr\, V(r)\right| \ll 1 \Rightarrow V_0 ka \ll E_k. \tag{1.62}$$

Für kleine Energien mit $ka \ll 1$ ist die obenstehende Bedingung nicht erfüllt. Allerdings kann man in diesem Grenzfall $\exp(2ikr') - 1 \sim 2ikr'$ benutzen, so dass wir die Bedingung

$$\left|\frac{m}{\hbar^2}\int_0^\infty dr\, r\, V(r)\right| \ll 1 \Rightarrow V_0 a^2 \ll \frac{\hbar^2}{m} \tag{1.63}$$

erhalten d. h. $V_0 \ll E_B = \hbar^2/ma^2$, was einem flachen Potential entspricht (ein entsprechendes attraktives flaches Potential hat keine gebundenen Zustände). Die bornsche Näherung ist daher anwendbar, falls entweder

$$V_0 ka \ll E_k \quad \text{oder} \quad V_0 \ll E_B \tag{1.64}$$

erfüllt ist.

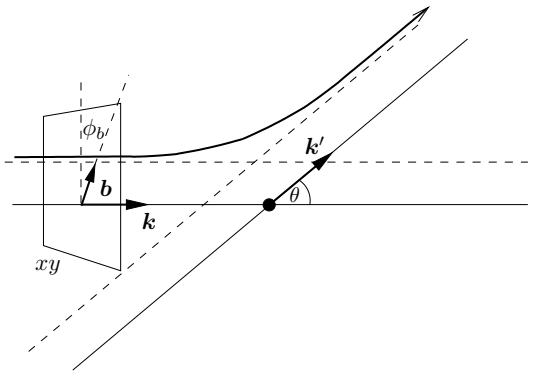


Abbildung 1.7: Streubahn mit dem Stoßparameter $\boldsymbol{b}$ in der xy-Ebene. Das Teilchen nähert sich (quasi-)klassisch dem Streuzentrum in Richtung $\boldsymbol{k} \perp \boldsymbol{b}$. Es wird durch das Zentrum in Richtung $\boldsymbol{k}'$ mit dem Streuwinkel $\theta \ll 1$ abgelenkt.

1.7 Eikonalnäherung

Die Eikonalnäherung der Streuung entspricht der geometrische Optik als Näherung für die Lichtpropagation. Sie ist gut, solange $V(r)$ sich wenig auf der Größenordnung einer Wellenlänge $\lambda\!\!\!^{-} = k^{-1}$ ändert. Somit ist $\lambda\!\!\!^{-}$ unser „kleiner“ Parameter. Beachte, dass wir nicht voraussetzen müssen, dass V selbst schwach ist solange $E_k \gg V_0$ und daher ist der Anwendungsbereich der Eikonalnäherung verschieden von der bornschen Näherung. Wie schon in der WKB-Näherung besprochen, kann man die exakte Wellenfunktion $\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ durch die semiklassische Wellenfunktion

$$\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \sim e^{i\mathcal{S}(\boldsymbol{r})/\hbar} \tag{1.65}$$

ersetzen. Wenn man zudem annimmt, dass $\hbar|\nabla^2\mathcal{S}| \ll |\nabla\mathcal{S}|^2$, was formal dem Grenzwert $\hbar \to 0$ entspricht, dann wird die Schrödingergleichung zur Hamilton-Jacobi Gleichung

$$\frac{(\boldsymbol{\nabla}\mathcal{S})^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) = E_k \tag{1.66}$$

für die Wirkung $\mathcal{S}(\boldsymbol{r})$. Die Lösung der Gleichung (1.66) besteht aus der Lösung des klassischen Streuproblems und ist im Allgemeinen nicht explizit bestimmbar. Deshalb machen wir die zusätzliche Annahme, dass wir nur an kleinen Streuwinkeln interessiert sind und ersetzen die klassische Trajektorie durch eine Gerade mit $S(\boldsymbol{r}) = S(z)$. Damit reduziert sich die partielle Differentialgleichung (1.66) auf eine gewöhnliche Differentialgleichung. Für ein Teilchen, das mit Stoßparameter $\boldsymbol{b} \perp \hat{\boldsymbol{z}}$ entlang der z-Achse einfällt, siehe Abbildung 1.7, erhalten wir

$$\frac{\mathcal{S}}{\hbar} = \int_{-\infty}^{z} dz' \left[k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V\left(\sqrt{b^2 + z'^2}\right)\right]^{1/2}; \tag{1.67}$$

die additive Konstante wurde durch die Eigenschaft $\mathcal{S}/\hbar = kz$ für $V \equiv 0$ bestimmt, damit die Streulösung $\Psi_{\boldsymbol{k}}$ ohne Potential sich auf eine ebene Welle reduziert. Für

$E_k \gg V_0$ können wir die Wurzel entwickeln und erhalten

$$\frac{\mathcal{S}}{\hbar} \approx kz - \frac{m}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{z} dz'\, V\left(\sqrt{b^2+z'^2}\right), \tag{1.68}$$

was auf

$$\Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \Psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{b}+z\hat{\boldsymbol{z}}) \approx e^{ikz}\exp\left[-\frac{im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{z} dz'\, V\left(\sqrt{b^2+z'^2}\right)\right]. \tag{1.69}$$

führt. Beachte, dass der Ausdruck (1.68) nicht die richtige asymptotische Form $e^{ikz} + f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}})e^{ikr}/r$ hat, da er nur für die Vorwärtsrichtung (mit $\theta \approx 0$) gültig ist. Trotzdem können wir mit (1.16) die Streuamplitude

$$f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}}) \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3r'\, e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}'} V\left(r'\right) \times \exp\left[-\frac{im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{z'} dz''\, V\left(\sqrt{b^2+z''^2}\right)\right] \tag{1.70}$$

bestimmen. Der Grund ist, dass das Potential die Integration auf den Bereich $|\boldsymbol{r}'| \le a$ einschränkt, in dem die Beziehung (1.69) gültig ist. Beachte, dass der Ausdruck ohne dem letzten Faktor genau der bornschen Näherung entspricht.

Als letzten Schritt führen wir in $d^3r' = d^2b\,dz'$ die Integration über $d^2b = b\,db\,d\phi_b$ durch. Dazu benutzen wir die Näherung [wir verwenden $\boldsymbol{k} \perp \boldsymbol{b}$ und $(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\hat{\boldsymbol{z}} = O(\theta^2)$]

$$(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}' \approx -\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{b} \approx -kb\theta\cos\phi_b \tag{1.71}$$

für kleine Winkel und erhalten

$$\begin{aligned} f_{\boldsymbol{k}}^{\text{eik}}(\Omega_{\boldsymbol{r}}) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int_0^\infty db\, b \overbrace{\int_0^{2\pi} d\phi_b e^{-ikb\theta\cos\phi_b}}^{2\pi J_0(kb\theta)} \\ &\qquad \times \int_{-\infty}^{\infty} dz\, \underbrace{V\exp\left[-\frac{im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{z} dz'\, V\right]}_{\frac{i\hbar^2 k}{m}\frac{d}{dz}\exp\left[-\frac{im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{z} dz'\, V\right]} \\ &= -ik\int_0^\infty db\, bJ_0(kb\theta)\left[e^{2i\Delta(b)}-1\right] \end{aligned} \tag{1.72}$$

mit der Streuphase

$$\Delta(b) = -\frac{m}{2k\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} dz\, V\left(\sqrt{b^2+z^2}\right) \simeq \frac{V_0 ka}{E_k}. \tag{1.73}$$

In der Herleitung der Eikonalnäherung haben wir vorausgesetzt, dass

$$V_0 \ll E_k = E_B\,(ka)^2 \quad \text{und} \quad ka \gg 1 \tag{1.74}$$

gilt; d. h. die Eikonalnäherung ist auch für $V_0 ka \gtrsim E_k$ anwendbar, wo man die bornsche Näherung nicht verwenden kann. In diesem Sinne ist die Eikonalnäherung komplementär zur bornschen Näherung. Im Grenzfall $V_0 ka \ll E_k$ können wir $\exp[2i\Delta(b)] - 1 \approx 2i\Delta(b)$ verwenden, so dass wir mit (1.71)

$$\begin{aligned} f_{\boldsymbol{k}}^{\text{eik}}(\theta) &= -\frac{m}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} dz \int_0^{\infty} db\, b\, J_0(kb\theta) V\left(\sqrt{b^2+z^2}\right) \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3r'\, V(r') e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k})'\cdot\boldsymbol{r'}} \end{aligned} \tag{1.75}$$

erhalten, in Übereinstimmung mit (1.57).

Wir wollen nun zeigen, dass die Eikonalnäherung im Gegensatz zur bornschen Näherung das optische Theorem (1.49) erfüllt. Damit führt die Eikonalnäherung auf selbstkonstistente Resultate, welche die Teilchenzahlerhaltung erfüllen. Dazu berechnen wir den total Wirkungsquerschnitt

$$\begin{aligned} \sigma &= 2\pi \int_0^{\infty} d(\cos\theta) |f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}})|^2 \\ &= 2\pi k^2 \int_0^{\infty} db\, b \left[e^{2i\Delta(b)} - 1\right] \int_0^{\infty} db'\, b' \left[e^{-2i\Delta(b')} - 1\right] \\ &\quad \times \underbrace{\int_0^{\pi} d\theta\, \sin\theta J_0(kb\theta) J_0(kb'\theta)}_{=I} . \end{aligned} \tag{1.76}$$

Wegen der endlichen Reichweite des Potentials gilt $\Delta(b \gtrsim a) \approx 0$, so dass nur der Bereich $b \lesssim a$ den Hauptbeitrag zum Integral in (1.76) liefert. Im Winkelintegral I substituieren wir daher $x = ka\theta$ und erhalten[9]

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{ka}\int_0^{ka\pi} dx \underbrace{\sin(x/ka)}_{\approx x/ka} J_0(bx/a) J_0(b'x/a) \\ &\approx \frac{1}{(ka)^2}\int_0^{\infty} dx\, x J_0(bx/a) J_0(b'x/a) = \frac{1}{k^2 b}\delta(b-b'), \end{aligned} \tag{1.77}$$

[9] Hier benutzen wir die Orthogonalitätsrelation

$$\int_0^{\infty} dx\, x J_0(kx) J_0(k'x) = \frac{1}{k}\delta(k'-k)$$

der Bessel-Funktionen, welche wie folgt aus der wohlbekannten Relation $\delta^{(2)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}) = \int d^2k/(2\pi)^2 \times e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'})}$ durch Integration über den Winkel ϕ hergeleitet werden kann

$$\begin{aligned} \frac{2\pi}{r}\delta(r-r') &= \int_0^{2\pi} d\phi\, \delta^{(2)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}) = \int_0^{\infty} dk\, k \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \overbrace{\int_0^{2\pi} d\phi\, e^{ikr\cos(\phi-\varphi)}}^{2\pi J_0(kr)} e^{-ikr'\cos(\phi'-\varphi)} \\ &= 2\pi \int_0^{\infty} dk\, k J_0(kr) J_0(kr'). \end{aligned}$$

wobei wir benutzt haben, dass die Bessel-Funktionen das Integral bei $x \simeq b/a \lesssim 1$ abschneiden, so dass wir die obere Integrationsgrenze nach ∞ setzen und den Sinus entwickeln können. Einsetzen von (1.77) in (1.76) liefert das optische Theorem

$$\sigma = 2\pi \int_0^\infty db\, b \left| e^{2i\Delta(b)} - 1 \right|^2 = 8\pi \int_0^\infty db\, b \sin^2 \Delta(b) = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f_{\boldsymbol{k}}(\theta = 0)$$

als Endresultat. Beachte, dass das optische Theorem eine einfache Berechnung des totalen Wirkungsquerschnittes über die Bestimmung von $\operatorname{Im} f_{\boldsymbol{k}}(\theta = 0)$ ermöglicht.

Es besteht ein schöner Zusammenhang zwischen der Eikonalnäherung und der Partialwellenentwicklung für $l \gg 1$. In diesem Fall kann man l als kontinuierliche Variable betrachten. Gleichsetzen des quantenmechanischen Drehimpulses $\hbar l$ mit dem semiklassischen Drehimpuls $bp = \hbar bk$ liefert $l = bk$. Die folgenden Zusammenhänge

$$\sum_l \mapsto k \int db, \qquad P_l(\cos\theta) \overset{\theta \ll 1}{\approx} J_0(l\theta) = J_0(kb\theta), \qquad \delta_l \mapsto \Delta(b = l/k), \tag{1.78}$$

ermöglichen es aus (1.41) die Gleichung (1.72) direkt „herzuleiten“.

1.8 Analytische Eigenschaften der Streumatrix

Wir betrachten ein kurzreichweitiges Potential, welches außerhalb von $r = a$ verschwindet (mit mehr Aufwand kann man zeigen, dass die Resultate richtig bleiben solange $r^2 V(r) \to 0$ für $r \to \infty$). Die radiale Lösung für $r > a$ ist dann gegeben durch

$$R_l(r) = \frac{1}{2}\left[h_l^{(2)}(kr) + S_l\, h_l^{(1)}(kr) \right], \tag{1.79}$$

während R_l für $r < a$ durch Integration von (1.33) gefunden werden muss. Die Streuphase S_l ist so einzurichten, dass sowohl R_l als auch $\partial_r R_l$ bei $r = a$ stetig sind. Da die Wellenfunktion nur bis auf einen (Normierungs-) Faktor eindeutig bestimmt ist, müssen wir einfach nur die Stetigkeit der logarithmischen Ableitung, $\partial_r \log R_l = (\partial_r R_l)/R_l$, fordern. Damit erhalten wir die Randbedingung

$$\alpha_l = \frac{1}{R_l}\frac{\partial R_l}{\partial r}\bigg|_{a^-} = \frac{\partial_r h_l^{(2)} + S_l\, \partial_r h_l^{(1)}}{h_l^{(2)} + S_l\, h_l^{(1)}}\bigg|_{a^+} = \frac{2\partial_r j_l + (S_l - 1)\partial_r h_l^{(1)}}{2 j_l + (S_l - 1) h_l^{(1)}}\bigg|_{a^+}.$$

Auflösen nach der Streuphase ergibt das Resultat

$$S_l - 1 = \frac{2(\partial_r - \alpha_l) j_l}{(\alpha_l - \partial_r) h_l^{(1)}}\bigg|_{a^+} \tag{1.80}$$

$$\downarrow \text{ mit } S_l - 1 = \frac{2i}{\cot\delta_l - i}$$

$$\cot\delta_l = \frac{(\partial_r - \alpha_l) n_l}{(\partial_r - \alpha_l) j_l}\bigg|_{a^+}, \tag{1.81}$$

womit wir δ_l aus α_l bestimmt haben. Der partielle Wirkungsquerschnitt als Funktion von $\cot\delta_l$ ist gegeben durch

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2\delta_l = \frac{4\pi}{k^2}\frac{2l+1}{1+\cot^2\delta_l}. \tag{1.82}$$

Die Analyse der Ausdrücke für $S_l(\cot\delta_l)$ und $\sigma_l(\cot\delta_l)$ zeigt, dass folgende Aussagen gelten: Für[10]

$$\begin{aligned} &\cot\delta_l = i \quad \text{hat } S_l \text{ eine Polstelle und } \sigma_l \text{ ist } \infty, \\ &\cot\delta_l = 0 \quad \text{ist } S_l = -1 \text{ und } \sigma_l = 4\pi(2l+1)/k^2 \text{ ist maximal.} \end{aligned} \tag{1.83}$$

Wie in einer Dimension (siehe Übungen) entsprechen den Polstellen von S_l gerade gebundene Zustände. Um das zu verstehen, untersuchen wir S_l für einen gebundenen Zustand mit $E = -E_B < 0$. Die radiale Wellenfuntion hat in diesem Fall die asymptotische Form $R_l(r) \sim h_l^{(1)}(i\kappa r) \propto e^{-\kappa r}$ mit der Bindungsenergie $E_B = \hbar^2\kappa^2/2m$. Der Term $\propto h_l^{(2)}$ ist nicht erlaubt, da er zu einer exponentiell wachsenden Wellenfunktion gehört, die nicht normierbar ist. Die Stetigkeitsbedingung ist daher gegeben durch

$$\alpha_l = \partial_r h_l^{(1)}/h_l^{(1)}\Big|_{a^+} = \partial_r \log h_l^{(1)}\Big|_{a^+}. \tag{1.84}$$

Das Einsetzen dieser Beziehung in die allgemeine Relation (1.81) ergibt das erwartete Resultat

$$\cot\delta_l = \frac{h_l^{(1)}\partial_r n_l - n_l\,\partial_r h_l^{(1)}}{h_l^{(1)}\partial_r j_l - j_l\,\partial_r h_l^{(1)}} \overset{h_l^{(1)}=j_l+in_l}{=} i. \tag{1.85}$$

Ähnlich wollen wir zeigen, dass die Nullstellen von $\cot\delta_l$ gerade den Streuresonanzen entsprechen. Dazu entwickeln wir $\cos\delta_l$ um die Resonanz mit $E = E_r > 0$,

$$\begin{aligned} \cot\delta_l(E) &\approx \overbrace{\cot\delta_l(E_r)}^{=0} - \frac{1}{\sin^2\delta_l}\,\frac{d\delta_l}{dE}\Big|_{E_r}(E-E_r) \\ &= -\frac{d\delta_l}{dE}\Big|_{E_r}(E-E_r) \qquad (1.86) \\ &\downarrow \text{ mit } \Gamma_r = \tfrac{2}{\delta_l'(E_r)} \\ &= -\frac{2}{\Gamma_r}(E-E_r). \qquad (1.87) \end{aligned}$$

[10] Beachte, dass $\cot\delta_l = i$ nicht möglich ist für $\delta_l(E)$ mit $E \in \mathbb{R}^+$. Wir betrachten hier, die analytische Fortsetzung von δ_l auf die ganze komplexe Ebene. Auf der rellen Achse haben wir $\sigma_l \leq 4\pi(2l+1)/k^2$ und das Maximum wird für $\cot\delta_l = 0$ erreicht.

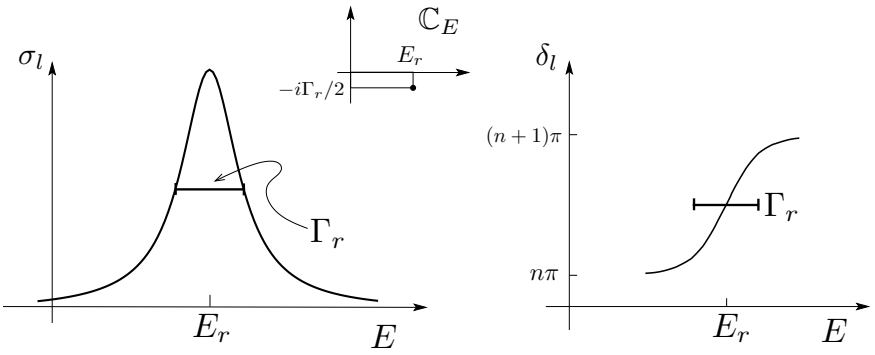


Abbildung 1.8: Resonanz der Breite Γ_r: Links der Wirkungsquerschnitt $\sigma_l(E)$ und rechts die Streuphase $\delta_l(E)$; in der Mitte ist die Lage der Polstelle in der komplexen E-Ebene skizziert.

Durch Einsetzen in (1.82) sehen wir, dass der partiellen Wirkungsquerschnitt σ_l um E_r eine Resonanz der Breite Γ_r aufweist,

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\frac{(\Gamma_r/2)^2}{(E-E_r)^2+(\Gamma_r/2)^2}, \tag{1.88}$$

vgl. Abbildung 1.8. Analog erhalten wir, dass die Streuamplitude $S_l(E)$ eine Polstelle in der zweiten riemannschen Fläche der komplexen E-Ebene hat mit

$$S_l - 1 = \frac{-i\Gamma_r}{E-(E_r-i\Gamma_r/2)}. \tag{1.89}$$

Über eine Resonanz nimmt die Streuphase $\delta_l(E)$ um π zu, je schmaler die Resonanz desto abrupter die Zuname. Der Wert $\delta_l(E=0)$ ist proportional zu der Anzahl gebundener Zustände ν_l im Drehimpulssektor l. Es gilt $\delta_l(0) = \nu_l\pi$, wobei eine zusätzliche Phasenverschiebung $+\pi/2$ im Sektor $l=0$ auftritt falls ein „virtueller“ Zustand[11] zu $E=0$ existiert. Dies ist die Aussage des Levinson Theorems.

Im Folgenden betrachten wir das niederenergetische $ka \ll 1$ Verhalten für einen Streuer der Ausdehnung a etwas genauer.

1.9 Niederenergetische Streuung, $ka \ll 1$

Niederenergetische Streuung ist neuerdings ein sehr relevantes Thema, da dies der hauptsächliche Streuprozess kalter Atome in der Quanten Atomoptik darstellt. Wir benutzen die Entwicklungen[12] $j_l \sim x^l/(2l+1)!!$ und $n_l \sim (2l-1)!!/x^{l+1}$ in (1.81)

[11] Im $l=0$ Sektor wird ein gebundener Zustand bei $E<0$ zu einem virtuellen Zustand (statt einer Resonanz) wenn die Bindungsenergie verschwindet, d. h. mit $E_B \to 0$.

[12] Die Doppelfakultät $(2l-1)!!$ einer ungeraden Zahl $2l-1$ ist definiert durch $(2l-1)!! = (2l)!/(2^l l!) = 1\cdot 3\cdot 5\cdots(2l-1)$.

und erhalten für $ka \ll 1$

$$\cot \delta_l \approx \frac{(2l+1)!!\,(2l-1)!!}{(ka)^{2l+1}} \frac{l+1+a\,\alpha_l(E)}{l-a\,\alpha_l(E)}. \tag{1.90}$$

Für $ka \to 0$ geht $\cot \delta_l \to \infty$, da $\alpha_l(E) \approx \alpha_l(0)$, mit dem Resultat

$$\delta_l \approx \sin \delta_l \approx \tan \delta_l \sim (ak)^{2l+1}; \tag{1.91}$$

d. h. die Streuphasen δ_l und die partiellen Wirkungsquerschnitte σ_l werden im Niedrigenergiebereich mit zunehmendem Drehimpuls rasch kleiner. Der s-Wellensektor ist demnach dominant und wir konzentrieren uns auf diesen Fall. Es ist instruktiv die Streuphase δ_0 durch die Streulänge a_s auszudrücken,

$$k \cot \delta_0 \overset{\alpha_0(E)\approx\alpha_0(0)}{\approx} -\frac{1+a\alpha_0(0)}{a^2\alpha_0(0)} = -\frac{1}{a_s}; \tag{1.92}$$

damit wird die Streulänge a_s zum einzig relevanten Parameter im Problem. Für den wichtigen Fall, dass $a\alpha_0 \gg 1$ ist $a_s \approx a$.[13] Der totale Wirkungsquerschnitt σ ist

$$\sigma \approx \sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \frac{1}{1+\cot^2 \delta_0} \approx \frac{4\pi a_s^2}{1+(ka_s)^2}. \tag{1.93}$$

Insbesondere ist

$$\sigma(E=0) = 4\pi a_s^2; \tag{1.94}$$

für die harte Kugel mit $a_s = a$ finden wir einen vierfach größeren Streuquerschnitt als klassisch erwartet, $\sigma_{\text{kl}} = \pi a^2$.

1.9.1 Gebundene Zustände und Resonanzen

Wir wollen die in Kapitel 1.8 diskutierten analytischen Eigenschaften der Streumatrix (mit gebundenen Zustände und Streuresonanzen) am Beispiel der niederenergetische s-Wellenstreuung nochmals genauer untersuchen. Die Streuphase lässt sich mit Hilfe der Streulänge a_s schreiben als

$$S_0 - 1 = \frac{2i}{\cot \delta_0 - i} \approx \frac{2ka_s}{i - ka_s} \qquad (\text{für } ka \ll 1). \tag{1.95}$$

Die Streumatrix $S_0(E)$ hat eine Polstelle bei $k = i/a_s$ oder $\kappa = -ik = a_s^{-1} > 0$ solange $a_s > 0$ und $a \ll a_s$.[14] Damit bekommt man einen (schwach) gebundenen

[13] Für die harte Kugel ist $R_l(a) = 0$, damit $\alpha_l = \infty$, $a_s = a > 0$ und $\cot \delta_0 = -1/ka$. Für kleine ka ist daher $\delta_0 \approx -ka < 0$. Die negative Phasenverschiebung war zu erwarten, da es sich um ein repulsives Potential handelt.

[14] Dass die Bedingung $a \ll a_s$ erfüllt sein muss, sieht man am Beispiel der harten Kugel. Es gilt $a = a_s$ aber natürlich hat das Potential keinen gebundenen Zustand und damit $S_0 = e^{2i\delta_0}$ keine Polstelle.

Zustand bei der Energie $E = -E_B = -\hbar^2/2ma_s^2$. Man kann die Argumentation auch umdrehen und sagen, dass ein schwach gebundener Zustand im Potential eine große positive Streulänge $a_s \gg a > 0$ erzeugt, d. h. ein schwach gebundener Zustand stößt ein niederenergetisch streuendes Teilchen ab. Berechnet man den totalen Wirkungsquerschnitt, vgl. (1.93),

$$\sigma \approx \sigma_0 \approx \frac{2\pi\hbar^2/m}{E + E_B}, \quad E_B \gtrsim 0. \tag{1.96}$$

erhält man das bemerkenswerte Resultat, dass die Energie des schwach gebundenen Zustandes den niederenergetischen Streuquerschnitt komplett bestimmt.

Analog erhält man eine Resonanz im s-Kanal, siehe (1.90), wenn

$$\cot\delta_0 = 0 \Rightarrow 1 + a\alpha_0(E_r) = 0. \tag{1.97}$$

Für eine Resonanz muss zudem noch die Bedingung $\Gamma_r < E_r$ gelten, welche ein (wenn auch breites) Resonanzmaximum garantiert. Mit

$$\begin{aligned}\cot\delta_0(E) &= \frac{1}{k_r a}\frac{\overbrace{1 + a\alpha_0(E_r)}^{=0} + a\alpha_0'(E_r)(E - E_r)}{\underbrace{-a\alpha_0(E_r)}_{=1}} \\ &\approx -\frac{2}{\Gamma_r}(E - E_r)\end{aligned} \tag{1.98}$$

erhalten wir die Bedingung

$$\Gamma_r = -\frac{2k_r a}{a\alpha_0'(E_r)} = -\frac{2k_r}{\alpha_0'(E_r)} < \frac{\hbar^2 k_r^2}{2m} = E_r, \tag{1.99}$$

$$\Rightarrow \left|\frac{\partial\alpha_0}{\partial k^2}\right| > \frac{2}{k_r} \tag{1.100}$$

für die Bildung einer Resonanz im s-Kanal.

Da die Resonanzen im s-Kanal wegen der strengen Bedingung (1.100) üblicherweise nicht sehr ausgeprägt sind, untersuchen wir als Nächstes den Fall $l > 0$. Wir haben schon gesehen (1.91), dass die Streuung für $l > 0$ im Allgemeinen klein ist,

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2}\frac{(2l+1)}{1 + \cot^2\delta_l} = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2\delta_l \overset{(k\to 0)}{\propto} a^2(ak)^{4l}. \tag{1.101}$$

In der Nähe einer Resonanz ist allerdings $\cot\delta_l \approx 0$ und σ_l geht durch ein Maximum mit

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k_r^2}(2l+1). \tag{1.102}$$

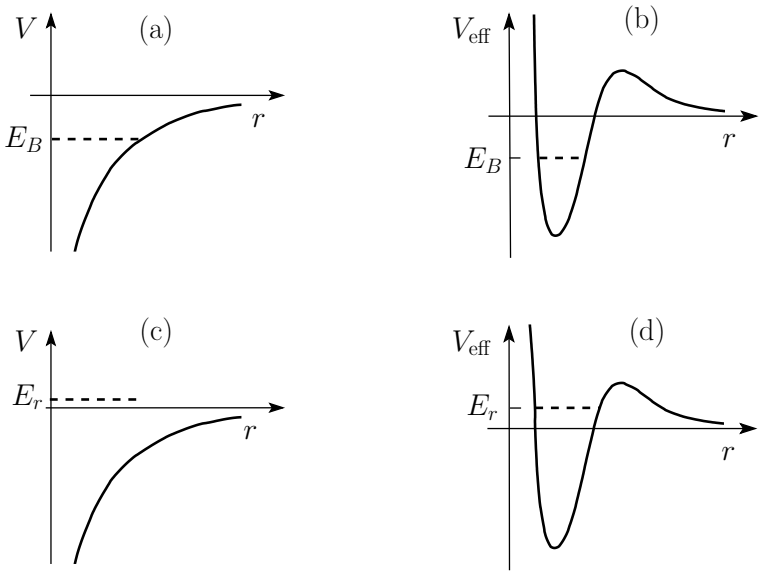


Abbildung 1.9: Gebundene Zustände (a,b) und Resonanzen (c,d): (a) Gebundener Zustand für $l = 0$. (b) Gebundener Zustand für $l > 0$, mit dem Potential $V(r)$ ersetzt durch das effektive Potential mit Zentrifugalbarriere $\hbar^2 l(l+1)/2mr^2$. (c) Im s-Wellen Sektor sind die Resonanzen breit, meist undefiniert mit $\Gamma_r > E_r$. Eine definierte Resonanz mit $\Gamma_r < E_r$ bedingt, dass $|\alpha_0'(E_r)|$ groß ist. (d) Für $l > 0$ ergeben sich scharfe Resonanzen, da der Zerfall des Zustandes durch die Anwesenheit der Zentrifugalbarriere unterdrückt wird. Die Resonanzen sind umso schärfer je kleiner k_r, je größer l, und je größer $\alpha_l'(E_r)$ sind.

Gemäß (1.90) finden wir Resonanzen bei

$$l + 1 + a\alpha_l(E_r) = 0. \tag{1.103}$$

Für die Breite der Resonanz erhalten wir[15]

$$\Gamma_r = -\frac{2k_r(ak_r)^{2l}}{[(2l-1)!!]^2\alpha_l'(E_r)} \propto k_r^{2l+1}; \tag{1.104}$$

d. h. je kleiner k_r, je größer $l \geq 1$ und je größer $\alpha_l'(E_r)$, desto schärfer ist die Resonanz. Dabei ist zu beachten, dass für $l > 0$, $\Gamma_r \ll E_r \propto k_r^2$ wenn $k_r \to 0$. Für $l = 0$ andererseits verschwindet E_r schneller als Γ_r und daher muss $\alpha_0'(E_r)$ im Nenner groß werden, um die Sichtbarkeit der Resonanz zu retten, vgl. (1.100).

[15] Wir benutzen, dass der Ausdruck $l - a\alpha_l$ im Nenner von

$$\cot\delta_l \approx \frac{(2l+1)!!(2l-1)!!}{(k_r a)^{2l+1}} \frac{l+1+a\left[\alpha_l(E_r)+\alpha_l'(E_r)(E-E_r)\right]}{l-a\alpha_l(E_r)} = -\frac{2}{\Gamma_r}(E-E_r)$$

wegen (1.103) durch $2l+1$ ersetzt werden kann.

Kapitel 2

Identische Teilchen

Wenn wir in der Quantenmechanik mehrere identische Teilchen beschreiben wollen, dann müssen wir das Prinzip der „Ununterscheidbarkeit“ gleichartiger Teilchen einführen, welches kein Gegenstück in der klassischen Mechanik hat. In der klassischen Mechanik verlieren gleichartige Teilchen, trotz Identität der physikalischen Eigenschaften, ihre Individualität nicht; wir können im Prinzip jedem Teilchen eine Markierung aufprägen und so die Teilchen identifizieren. Tatsächlich sind sogar die Markierungen überflüssig da wir den Trajektorien der Teilchen folgen und diese daher identifizieren können – klassisch ist die Physik unterscheidbarer und identischer Teilchen dieselbe.

In der Quantenmechanik können wir weder Markierungen anbringen noch den Trajektorien folgen, eine Folge des heisenbergschen Unschärfeprinzips. In der Quantenmechanik gibt es also prinzipiell keine Möglichkeit, ein einzelnes von gleichartigen Teilchen gesondert zu verfolgen und damit die Teilchen zu unterscheiden. Eine konsistente Berücksichtigung der Ununterscheidbarkeit von Teilchen erzeugt erstaunliche physikalische Effekte, die wir im Folgenden beschreiben.

2.1 Beschreibung von N Teilchen

Wir starten mit dem Problem der Beschreibung von N (unterscheidbaren) Teilchen. Die Begriffe der Wellenfunktionen und Operatoren werden in der offensichtlichen Art von Ein- auf Mehrteilchensysteme verallgemeinert:

- die Wellenfunktionen hängen von den N Teilchen-Koordinaten ab, zum Beispiel von Orts- und Spin Koordinaten $\boldsymbol{r}_1, s_1; \ldots; \boldsymbol{r}_N, s_N$, oder in kompakter Notation $x_1, \ldots, x_N$ mit $x_i = (\boldsymbol{r}_i, s_i)$,

$$\Psi(x_1, \ldots, x_N) = \langle x_1, \ldots, x_N | \Psi \rangle; \tag{2.1}$$

  entsprechend definieren wir einen Hilbertraum $\mathcal{H}_N$ über die komplexwertigen

Funktionen $\Psi(x_1, \ldots, x_N)$ von N Argumenten x_N mit dem Skalarprodukt

$$\begin{aligned}\langle\Psi|\Phi\rangle &= \sum_{s_1\cdots s_N} \int dr_1 \cdots dr_N \, \Psi^*(x_1, \ldots, x_N)\Phi(x_1, \ldots, x_N) \\ &= \int dx_1 \cdots dx_N \, \Psi^*(x_1, \ldots, x_N)\Phi(x_1, \ldots, x_N)\,. \end{aligned} \tag{2.2}$$

Die kanonische Basis in $\mathcal{H}_N$ ist die Produktbasis $|\alpha_1, \ldots, \alpha_N\rangle = |\varphi_{\alpha_1}\rangle \otimes \cdots \otimes |\varphi_{\alpha_N}\rangle$ erzeugt aus einer Einteilchenbasis $\{\varphi_\alpha(x)\}$ mit

$$\begin{aligned}\Psi_{\alpha_1,\ldots,\alpha_N}(x_1, \ldots, x_N) &= \langle x_1, \ldots, x_N|\alpha_1, \ldots, \alpha_N\rangle \\ &= \langle x_1|\varphi_{\alpha_1}\rangle \cdots \langle x_N|\varphi_{\alpha_N}\rangle = \varphi_{\alpha_1}(x_1) \cdots \varphi_{\alpha_N}(x_N)\,. \end{aligned} \tag{2.3}$$

Es sind natürlich aber auch andere Basen möglich.

- Die Operatoren wirken auf die N-Teilchen Wellenfunktionen. Die Einteilchenoperatoren A sind gegeben durch

$$A = \sum_{i=1}^{N} a_i, \tag{2.4}$$

wobei a_i nur auf das i-te Teilchen wirkt. In der Produktbasis sieht das wie folgt aus:

$$\begin{aligned}\langle x_1, \ldots, x_N|A\Psi\rangle &= A\Psi(x_1, \ldots, x_N) \\ &= [a\varphi_{\alpha_1}(x_1)]\varphi_{\alpha_2}(x_2) \ldots \varphi_{\alpha_N}(x_N) \\ &\quad + \varphi_{\alpha_1}(x_1)[a\varphi_{\alpha_2}(x_2)] \ldots \varphi_{\alpha_N}(x_N) + \cdots\,. \end{aligned} \tag{2.5}$$

Mathematisch bedeutet das, dass der Operator a_i als $\cdots \otimes I \otimes a \otimes I \otimes \cdots$ im Hilbertraum $\mathcal{H}_N = \mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \cdots = \mathcal{H}^{\otimes N}$ wirkt.

Operatoren können natürlich auch auf zwei (oder mehrere) Teilchen gleichzeitig wirken und erzeugen damit Wechselwirkungen zwischen den Teilchen, zum Beispiel Paarwechselwirkungen,

$$V = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} v_{ij}, \qquad v_{ij} \text{ wirkt nur auf Teilchenpaare } i, j. \tag{2.6}$$

Als Beispiel betrachten wir N Teilchen im $\mathbb{R}^3$ ohne Spin. Damit ist der Einteilchen-Jilbertraum gegeben durch $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$.

- Die Produktbasis wird aus der Ein-Teilchen-Basis $\{|\varphi_{\boldsymbol{k}_i}\rangle\}$ konstruiert,

$$|\boldsymbol{k}_1, \ldots, \boldsymbol{k}_N\rangle = |\varphi_{\boldsymbol{k}_1}\rangle \otimes |\varphi_{\boldsymbol{k}_2}\rangle \otimes \cdots |\varphi_{\boldsymbol{k}_N}\rangle; \tag{2.7}$$

in der Ortsdarstellung gilt

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{r}_i|\varphi_{\boldsymbol{k}_i}\rangle &= \varphi_{\boldsymbol{k}_i}(\boldsymbol{r}_i), \\ \langle \boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N|\boldsymbol{k}_1, \ldots, \boldsymbol{k}_N\rangle &= \varphi_{\boldsymbol{k}_1}(\boldsymbol{r}_1) \cdots \varphi_{\boldsymbol{k}_N}(\boldsymbol{r}_N). \end{aligned} \tag{2.8}$$

- Die ebene-Wellen-Basis, (Ω ist das Quantisierungsvolumen)

$$\begin{aligned} \varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) &= e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}/\sqrt{\Omega}, \\ \langle \boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N|\boldsymbol{k}_1,\ldots,\boldsymbol{k}_N\rangle &= \prod_i e^{i\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}_i}/\sqrt{\Omega}, \end{aligned} \tag{2.9}$$

  spannt den Produkt-Hilbertraum

$$\mathcal{H}^{\otimes N} = L^2(\mathbb{R}^3)\otimes\cdots\otimes L^2(\mathbb{R}^3) = L^2(\mathbb{R}^3)^{\otimes N} \tag{2.10}$$

  auf.

- Beispiele von Operatoren sind (bis auf die Wechselwirkung sind alles Einteilchenoperatoren)
  - der (Gesamt-)Impuls

$$\boldsymbol{P} = \sum_i \boldsymbol{p}_i, \quad \boldsymbol{p}_i = \frac{\hbar}{i}\boldsymbol{\nabla}_i, \tag{2.11}$$

  - die (Gesamt-)Energie

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_i \frac{p_i^2}{2m}, \quad \text{für freie Teilchen,} \\ H &= H_0 + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j), \quad \text{für WW Teilchen,} \end{aligned} \tag{2.12}$$

  - die Dichte

$$\rho(\boldsymbol{r}) = \sum_i \delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i), \tag{2.13}$$

  - die Stromdichte

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) = \sum_i \left[\frac{\boldsymbol{p}_i}{2m}\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i) + \delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)\frac{\boldsymbol{p}_i}{2m}\right]. \tag{2.14}$$

  - Damit bilden wir die Erwartungswerte

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{P}\rangle &= \sum_i \int d^3r_1\cdots d^3r_N\, \Psi^*(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N)\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{\nabla}_i\Psi(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N), \\ &= \sum_i \int d^3r_i\, \varphi^*_{\boldsymbol{k}_i}(\boldsymbol{r}_i)\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{\nabla}_i\varphi_{\boldsymbol{k}_i}(\boldsymbol{r}_i) = \sum_i \hbar\boldsymbol{k}_i, \end{aligned} \tag{2.15}$$

$$\langle H_0\rangle = \sum_i \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m}, \tag{2.16}$$

$$\begin{aligned}\langle H\rangle &= \langle H_0\rangle + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\int d^3r_1\cdots d^3r_N \\ &\qquad \times \Psi^*(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N)V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)\Psi(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N) \\ &= \langle H_0\rangle + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\int d^3r_i\, d^3r_j \\ &\qquad \times \varphi^*_{\boldsymbol{k}_i}(\boldsymbol{r}_i)\varphi^*_{\boldsymbol{k}_j}(\boldsymbol{r}_j)V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)\varphi_{\boldsymbol{k}_i}(\boldsymbol{r}_i)\varphi_{\boldsymbol{k}_j}(\boldsymbol{r}_j) \\ &= \langle H_0\rangle + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\int d^3r_i\, d^3r_j\, |\varphi_{\boldsymbol{k}_i}(\boldsymbol{r}_i)|^2 V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)|\varphi_{\boldsymbol{k}_j}(\boldsymbol{r}_j)|^2. \end{aligned} \tag{2.17}$$

2.2 Beschreibung N identischer Teilchen

Wenn wir die Wellenfunktion $\Psi(x_1,\ldots,x_N)$ eines Mehrteilchensystems aufschreiben, dann benutzen wir den Begriff „erstes Teilchen“ für das Teilchen, das mit dem ersten Argument bezeichnet wird, „zweites Teilchen“ für das Teilchen, das mit dem zweiten Argument bezeichnet wird, usw. Es stellt sich nun die Frage, ob man damit nicht die Teilchen markiert und die grundsätzliche Ununterscheidbarkeit verletzt. Die Antwort ist, dass wir die Markierung/Namen brauchen, um das System überhaupt mathematisch Beschreiben zu können. Die führt allerdings nicht notwendigerweise zu einer physikalischen Unterscheidbarkeit. Wir müssen einfach dazu Sorge tragen, dass wir alle Teilchen als absolut äquivalent behandeln. Insbesondere darf kein (physikalischer) Operator existieren, welcher eine Identifikation der Teilchen zulässt. Das bedeutet, dass alle zugelassenen Operatoren symmetrisch sind. In der Koordinatendarstellung sind die zugelassenen Operatoren zum Beispiel symmetrisch in den Koordinaten,

$$A(x_1,\ldots,x_N) = A(x_{\pi(1)},\ldots,x_{\pi(N)}), \tag{2.18}$$

mit $\pi \in S_N$ einer beliebigen Permutation,

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & N \\ \pi(1) & \pi(2) & \pi(3) & \cdots & \pi(N)\end{pmatrix}, \tag{2.19}$$

welche die obere Zeile auf die untere abbildet.

Als nächstes betrachten wir die Erwartungswerte von A,

$$\begin{aligned}\langle A\rangle &= \int dx_1\cdots dx_N\, \Psi^*(x_1,\ldots,x_N)A(x_1,\ldots,x_N)\Psi(x_1,\ldots,x_N) \\ &= \int dx_1\cdots dx_N\, \Psi^*(x_1,\ldots,x_N)A(x_{\pi(1)},\ldots,x_{\pi(N)})\Psi(x_1,\ldots,x_N) \\ &= \int dx_1\cdots dx_N\, \Psi^*(x_{\pi^{-1}(1)},\ldots,x_{\pi^{-1}(N)})A(x_1,\ldots,x_N)\Psi(x_{\pi^{-1}(1)},\ldots,x_{\pi^{-1}(N)});\end{aligned} \tag{2.20}$$

dabei ist π^{-1} die zu π inverse Permutation. Offensichtlich können wir die Argumente in Ψ beliebig vertauschen, da A symmetrisch ist bleibt $\langle A\rangle$ invariant. Die Invarianz von $\langle A\rangle$ gibt uns damit keine Bedingung an das Verhalten der Wellenfunktionen Ψ unter Vertauschung der Argumente.

Wir können die obige Diskussion etwas formalisieren: Analog zu den Translations- und Rotationsdarstellungen im Hilbertraum,

$$\begin{aligned} &\text{Translationen:} && U_{\boldsymbol{a}}\,\Psi(\boldsymbol{r}) = e^{-i\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{p}/\hbar}\Psi(\boldsymbol{r}) = \Psi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{a}),\\ &\text{Rotationen:} && U_{\boldsymbol{\omega}}\,\Psi(\boldsymbol{r}) = e^{-i\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{L}/\hbar}\Psi(\boldsymbol{r}) = \Psi(\mathbf{R}_{-\boldsymbol{\omega}}\,\boldsymbol{r}), \end{aligned} \tag{2.21}$$

führen wir die folgende (unitäre) Darstellung der Permutationsgruppe S_N ein,[1]

$$U_\pi\,\Psi(x_1,\ldots,x_N) = \Psi(x_{\pi^{-1}(1)},\ldots,x_{\pi^{-1}(N)}). \tag{2.22}$$

Mit der Definition von U_π können wir symmetrische Operatoren wie folgt definieren: Ein Operator A ist symmetrisch, wenn für alle $\pi\in S_N$ gilt, dass

$$U_\pi^{-1}AU_\pi = A \qquad\Leftrightarrow\qquad [A,U_\pi] \;=\; 0. \tag{2.23}$$

Die zentrale Frage, welche wir als nächstes angehen, ist wie die permutierte Wellenfunktion $U_\pi\Psi$ mit Ψ zusammenhängt. Offensichtlich definiert U_π eine Darstellung von S_N in $\mathcal{H}$. Weiter gilt für alle (zugelassenen, d. h. symmetrischen) Operatoren A, insbesondere auch für den Hamiltonoperator H, dass $[H,U_\pi]=0$ ist. Das bedeutet, dass wir jeden Operator A und U_π gleichzeitig diagonalisieren können.

Sei nun $A\Psi_a = a\Psi_a$, dann ist auch $AU_\pi\Psi_a = aU_\pi\Psi_a$ und $\{U_\pi\Psi_a \mid \pi\in S_N\}$ spannt den Eigenraum Eig_a zu A auf.[2] Im Eigenraum Eig_a mit $\dim\mathrm{Eig}_a = D_a$ lässt sich eine D_a-dimensionale Darstellung von S_N erzeugen. Die Darstellung kann dann in irreduzible Darstellungen von S_N zerlegt werden. Im Allgemeinen kann eine beliebige irreduzible Darstellung von Dimension $d\le D_a$ auftreten. Falls $d>1$ sind allerdings alle Energieeigenzustände von H (und auch die Eigenzustände eines beliebigen Operators A) d-fach entartet. Diese Entartung nennt man Austauschentartung, da sie nur wegen der Ununterscheidbarkeit der Teilchen auftritt. Diese Entartung hat messbare Folgen, da sie z. B. die spezifische Wärme erhöht oder eine Mischentropie zweier gleicher Gase liefert[3]. Es ist nun eine experimentelle Tatsache, dass keine Austauschentartung irgendeines Teilchen vorliegt. Deshalb brauchen wir nicht die ganze Maschinerie der Gruppentheorie auf dieses Problem loslassen und müssen nur die eindimensionalen Darstellungen berücksichtigen. Davon gibt es in S_N zwei, nämlich die symmetrische Darstellung S und die antisymmetrische Darstellung A. Wir bezeichnen mit $\mathcal{H}_{\mathcal{S}/\mathcal{A}}$ die dazugehörigen invarianten Hilberträume.

[1] Weil S_N keine kontinuierliche Gruppe ist, existiert keine infinitesimale Erzeugende.

[2] Im Fall $A=H$ betrachten wir Ψ_E mit $H\Psi_E = E\Psi_E$ und stellen fest, dass $U_\pi\Psi_E$ ebenfalls in Eig_E liegt.

[3] Das fehlen der Austauschentartung bei Mischung geht in der statistischen Mechanik unter dem Begriff gibbsches Paradoxon.

2.3 Fermionen und Bosonen

Sei $\mathcal{H}$ der Hilbertraum der N-Teilchen Funktionen. Es sind von $\mathcal{H}$ nur die Sektoren

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\mathcal{A}} &= \{\mathcal{A}\,\Psi | \Psi \in \mathcal{H}\}, \\ \mathcal{H}_{\mathcal{S}} &= \{\mathcal{S}\,\Psi | \Psi \in \mathcal{H}\}, \end{aligned} \tag{2.24}$$

relevant; hier sind

$$\mathcal{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\pi \in S_N} (-1)^{\pi} U_{\pi}, \tag{2.25}$$

$$\mathcal{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\pi \in S_N} U_{\pi}, \tag{2.26}$$

die (anti-)symmetrisierungs-Operatoren mit $(-1)^{\pi}$ der Signatur von π, siehe B.1. Die Normierung wurde dabei so gewählt, dass die Operatoren Projektoren sind mit $\mathcal{S}^2 = \mathcal{S}$ und $\mathcal{A}^2 = \mathcal{A}$. Für die Funktionen in $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ gilt

$$\Psi(x_{\pi(1)}, \ldots, x_{\pi(N)}) = (-1)^{\pi} \Psi(x_1, \ldots, x_N), \quad \forall \pi \in S_N, \tag{2.27}$$

für diejenigen in $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$ gilt

$$\Psi(x_{\pi(1)}, \ldots, x_{\pi(N)}) = \Psi(x_1, \ldots, x_N). \tag{2.28}$$

In der Natur ist also nur ein kleiner Teil von $\mathcal{H}$ realisiert, nämlich der symmetrische und antisymmetrische Teil. Wir nennen Teilchen deren Wellenfunktionen in $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ ($\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$) liegen und damit antisymmetrisch (symmetrisch) unter Vertauschung der Argumente sind Fermionen (Bosonen).

$\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$		$\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$
antisymmetrisch	$\leftrightarrow$	symmetrisch
Fermionen		Bosonen

Damit ergibt sich das Problem, welchen Hilbertraum, $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ oder $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}$, man für eine bestimmte Teilchensorte wählen soll, oder in anderen Worten sind die Teilchen Fermionen oder Bosonen. Die Antwort gibt der Satz von Spin und Statistik.

2.4 Spin und Statistik

Der folgende Zusammenhang zwischen dem Teilchenspin und den Symmetrieeigenschaften der Wellenfunktionen unter S_N kann man in der relativistischen Quantenfeldtheorie beweisen:

Halbzahliger Spin		Ganzzahliger Spin
Fermionen	$\leftrightarrow$	Bosonen

Beispiele von Teilchen mit den entsprechenden Eigenschaften sind:

Fermionen

- Leptonen $e^-,\ \mu,\ \tau$
- Leptonen-Neutrinos $\nu_e,\ \nu_\mu,\ \nu_\tau$
- Barionen $p, n, \Lambda, \Sigma, \Xi, \cdots$ mit je 3 Quarks
- ^{3}He

Alle hier aufgeführten Fermionen haben Spin-1/2.

Bosonen

- Higgs (Spin-0)
- Mesonen π, K mit Spin-0, oder ρ, ω mit Spin-1, mit je zwei 2 Quarks.
- Eichbosonen (Yang-Mills) der
  - elektro-schwachen WW: $\gamma, W^\pm, Z^0$ mit Spin-1.
  - starken WW: Gluonen (Spin-1).
- ^{4}He (Spin-0).

2.5 Anwendungen

2.5.1 Wellenfunktionen zweier (Spin-1/2) Fermionen

Wir betrachten zwei Spin-1/2 Fermionen, z. B. zwei Elektronen. Sei $\Psi(\boldsymbol{r}_1, s_1; \boldsymbol{r}_2, s_2) \in \mathcal{H}$ ein Element der Produktbasis

$$\Psi_{\mu,\nu}(x_1, x_2) = \varphi_\mu(x_1)\varphi_\nu(x_2). \tag{2.30}$$

Die physikalische Zustände sind

$$\begin{aligned}\Psi^{\mathcal{A}}_{\mu,\nu}(x_1, x_2) = \sqrt{2}\mathcal{A}\Psi_{\mu,\nu} &= \frac{1}{\sqrt{2!}} \sum_{\pi\in S_2} (-1)^\pi U_\pi \Psi_{\mu,\nu}(x_1, x_2) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\big[\Psi_{\mu,\nu}(x_1, x_2) - \Psi_{\mu,\nu}(x_2, x_1)\big] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\big[\varphi_\mu(x_1)\varphi_\nu(x_2) - \varphi_\mu(x_2)\varphi_\nu(x_1)\big]. \end{aligned} \tag{2.31}$$

Falls $\mu = \nu$ ist, folgt $\mathcal{A}\Psi_{\mu,\mu} = 0$, also können keine zwei Fermionen in demselben Zustand sein: Das ist das berühmte paulische Ausschlussprinzip. Das paulische Ausschlussprinzip für Fermionen gilt auch allgemein für N Fermionen.

2.5.2 Spin und Bahn-Wellenfunktionen

Als nächstes separieren wir die Spin- und Bahnanteile für die Wellenfunktion Ψ zweier Spin-1/2 Fermionen,

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, s_1; \boldsymbol{r}_2, s_2) = \varphi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\chi(s_1, s_2). \tag{2.32}$$

Die Gesamtwellenfunktion Ψ ist antisymmetrisch, wenn

$$\left.\begin{matrix}\varphi & \text{symmetrisch} \\ \chi & \text{antisymmetr.}\end{matrix}\right\} \text{ oder } \left\{\begin{matrix}\varphi & \text{antisymmetr.} \\ \chi & \text{symmetrisch}\end{matrix}\right. \tag{2.33}$$

ist. Der Spinanteil $\chi(s_1, s_2)$ lässt sich gemäß $\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{S}_2$ ausreduzieren, $\mathcal{H}_{1/2} \otimes \mathcal{H}_{1/2} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1$. Im Spin-Hilbertraum $\mathcal{H}_0$ ist der Singulettzustand $\chi_{0,0}(s_1, s_2)$ antisymmetrisch in s_1, s_2,[4]

$$\begin{aligned}\chi_{0,0}(s_1, s_2) &= \langle s_1, s_2|0, 0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\big[\langle s_1|\uparrow\rangle\langle s_2|\downarrow\rangle - \langle s_1|\downarrow\rangle\langle s_2|\uparrow\rangle\big] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\big[\chi_\uparrow(s_1)\chi_\downarrow(s_2) - \chi_\downarrow(s_1)\chi_\uparrow(s_2)\big].\end{aligned} \tag{2.34}$$

Der Spin-Hilbertraum $\mathcal{H}_1$ wird von den drei Zuständen $\chi_{1,1}$, $\chi_{1,0}$ und $\chi_{1,-1}$ aufgespannt. Dieses sind die symmetrischen Triplettzustände,

$$\begin{aligned}\chi_{1,1}(s_1, s_2) &= \langle s_1, s_2|1, 1\rangle = \chi_\uparrow(s_1)\chi_\downarrow(s_2), \\ \chi_{1,0}(s_1, s_2) &= \langle s_1, s_2|1, 0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\big[\chi_\uparrow(s_1)\chi_\downarrow(s_2) + \chi_\downarrow(s_1)\chi_\uparrow(s_2)\big], \\ \chi_{1,-1}(s_1, s_2) &= \langle s_1, s_2|1, -1\rangle = \chi_\downarrow(s_1)\chi_\downarrow(s_2).\end{aligned} \tag{2.35}$$

Die obigen symmetrischen und anti-symmetrischen Spin-Funktionen χ kombinieren wir mit entsprechend symmetrisierten Bahnfunktionen φ. Wir definieren demnach die symmetrisierten Kombinationen

$$\begin{aligned}&\varphi \text{ symmetrisch:} && \varphi_{\mathcal{S}} = \big[\varphi_1(\boldsymbol{r}_1)\varphi_2(\boldsymbol{r}_2) + \varphi_2(\boldsymbol{r}_1)\varphi_1(\boldsymbol{r}_2)\big]/\sqrt{2}, \\ &\varphi \text{ antisymmetrisch:} && \varphi_{\mathcal{A}} = \big[\varphi_1(\boldsymbol{r}_1)\varphi_2(\boldsymbol{r}_2) - \varphi_2(\boldsymbol{r}_1)\varphi_1(\boldsymbol{r}_2)\big]/\sqrt{2}.\end{aligned}$$

Damit können wir S^2, S_z und S_N gleichzeitig diagonalisieren und erhalten Wellenfunktionen Ψ mit definiertem Spin und definierter Symmetrie. Dabei legt der Spin die Symmetrie von χ und von φ fest:

$$\begin{aligned}S = 1 \Rightarrow \chi &= \text{symmetrisch}, \quad \varphi = \text{antisymmetrisch}; \\ S = 0 \Rightarrow \chi &= \text{antisymmetrisch}, \quad \varphi = \text{symmetrisch}.\end{aligned} \tag{2.36}$$

[4] Es gilt $\chi_\uparrow(s = \uparrow) = 1$ und $\chi_\uparrow(s = \downarrow) = 0$.

Ein ähnliches Prinzip gilt im Allgemeinen für N Spin-1/2 Fermionen, siehe Anhang B: aus dem Satz von Weyl und dem Pauli-Prinzip folgt, dass der Gesamtspin S die Rasse (die Darstellung unter der Permutationsgruppe) der Bahnwellenfunktion festlegt. Die Rasse aber bestimmt wesentlich den Wert der „Austauschintegrale“, also die Energie des Zustandes. So beeinflusst also der Gesamtspin indirekt die Energie eines Zustandes. Magnetische Eigenschaften wie der Ferromagnetismus sind daher Folgen des Zusammenhangs von Spin und Bahnrasse.

Offensichtlich interferieren Fermionen miteinander über das Pauliprinzip und es stellt sich die Frage, ob wir immer alle Elektronen der Welt antisymmetrisieren müssen. Glücklicherweise ist dies nicht der Fall. Betrachte zwei nichtwechselwirkende Elektronen in Aachen und in Köln, beschrieben durch Einteilchenzustände $\varphi_A(\boldsymbol{r}_1, s_1)$ und $\varphi_K(\boldsymbol{r}_1, s_1)$ mit $\int dx\, \varphi_A^* \varphi_K \approx 0$, welche (korrekt) durch die antisymmetrische Wellenfunktion

$$\Psi \approx \frac{1}{\sqrt{2}}\big[\varphi_A(x_1)\varphi_K(x_2) - \varphi_K(x_1)\varphi_A(x_2)\big] \tag{2.37}$$

beschrieben werden. Sei $A(x)$ ein lokaler Einteilchenoperator. Dann ist sein Erwartungswert gegeben durch

$$\begin{aligned}\langle A\rangle = \frac{1}{2}\int dx_1 dx_2 \Big[&\varphi_A^*(x_1)\varphi_K^*(x_2)\, A(x_1)\, \varphi_A(x_1)\varphi_K(x_2)\\ &+ \varphi_K^*(x_1)\varphi_A^*(x_2)\, A(x_1)\, \varphi_K(x_1)\varphi_A(x_2)\\ &-\varphi_A^*(x_1)\varphi_K^*(x_2)\, A(x_1)\, \varphi_K(x_1)\varphi_A(x_2)\\ &-\varphi_K^*(x_1)\varphi_A^*(x_2)\, A(x_1)\, \varphi_A(x_1)\varphi_K(x_2)\Big] \Big\} \approx 0\\ \approx \langle A\rangle_A + \langle A\rangle_K.&\end{aligned} \tag{2.38}$$

Es sind die Interferenzterme, welche die Symmetrisierungseigenschaften tragen.[5] Für nicht überlappende Wellenfunktionen verschwinden diese Terme und wir können auf die (Anti-)Symmetrisierung verzichten: die Ergebnisse in Aachen hängen nur von der Wellenfunktion in Aachen ab und analog für Köln.

2.5.3 Wellenfunktion zweier (Spin-0) Bosonen

Für zwei Bosonen muss die Produktwellenfunktion $\Psi_{\mu,\nu}$ symmetrisiert werden. Die erlaubte Wellenfunktionen ist daher gegeben durch

$$\Psi^{\mathcal{S}}_{\mu,\nu}(x_1, x_2) = \sqrt{2}\mathcal{S}\Psi_{\mu,\nu} = \frac{1}{\sqrt{2}}\big[\varphi_\mu(x_1)\varphi_\nu(x_2) + \varphi_\mu(x_2)\varphi_\nu(x_1)\big]. \tag{2.39}$$

Für Bosonen ist nun $\mu = \nu$ erlaubt und die Wellenfunktion zweier Bosonen im gleichen Zustand ist gegeben durch (beachte die neue Normierung, vgl. (2.53) später)

$$\Psi^{\mathcal{S}}_{\mu,\mu}(x_1, x_2) = \varphi_\mu(x_1)\varphi_\mu(x_2) \overset{x_1=x_2=x}{\longrightarrow} \varphi_\mu(x)^2 \neq 0, \tag{2.40}$$

[5] Beachte, dass für Bosonen die beiden letzten Terme in (2.38) addiert werden.

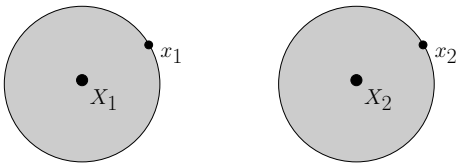


Abbildung 2.1: Zur Symmetrie der Wellenfunktion zweier Wasserstoffatome: X_1, X_2 bezeichnen die Koordinaten der Protonen, x_1, x_2 die Koordinaten der Elektronen.

und beide Bosonen dürfen am selben Platz sitzen.

Beachte: Fermionen meiden sich, Bosonen mögen sich

$$\begin{aligned}\Psi_{1,2}^{\mathcal{S}/\mathcal{A}}(x_1,x_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[\varphi_1(x_1)\varphi_2(x_2) \mp \varphi_2(x_1)\varphi_1(x_2)\Big] \\ &\downarrow x_1 = x_2 = x \\ &= \begin{cases} 0, & \text{Fermionen,} \\ \sqrt{2}\varphi_1(x)\varphi_2(x), & \text{Bosonen.} \end{cases}\end{aligned} \tag{2.41}$$

□

2.5.4 Kombinierte Teilchen

Betrachte zwei H-Atome wie in Abbildung 2.1 skizziert. Die total Wellenfunktion $\Psi(x_1, X_1, x_2, X_2)$ muss antisymmetrisch in den Elektronenkoordinaten x_1, x_2 und auch antisymmetrisch in den Koordinaten X_1, X_2 der Protonen sein. Vertauschungen von x_1, X_1; x_1, X_2; x_2, X_1; x_2, X_2 unterliegen keinen Vorschriften. Da dabei die vertauschten Teilchen nicht identisch sind, sind solche Vertauschungen physikalisch auch nicht sinnvoll. Die Vertauschung der Atome ergibt (erst die Elektronen, dann die Protonen vertauschen)

$$\begin{aligned}\Psi(x_2, X_2, x_1, X_1) &= -\Psi(x_1, X_2, x_2, X_1) \\ &= (-1)^2\Psi(x_1, X_1, x_2, X_2).\end{aligned} \tag{2.42}$$

Daraus erhalten wir, dass sich die H-Atome, die aus je 2 Fermionen bestehen, wie Bosonen verhalten. Beachte die Kompatibilität mit dem Theorem von Spin und Statistik aus Kap. 2.4,

$$\text{H-Atom} \Rightarrow \ \mathcal{H}_{1/2} \otimes \mathcal{H}_{1/2} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1; \tag{2.43}$$

damit besitzen die H-Atome einen ganzzahligen Spin und sind also Bosonen. Ähnlich behandelt man andere zusammengesetzte Teilchen, zum Beispiel

$$\begin{aligned}{}^3\text{He} &= 2p + 1n + 2e = \text{Fermion} \to \text{Paarungsübergang}, \\ {}^4\text{He} &= 2p + 2n + 2e = \text{Bosonen} \to \lambda - \text{Übergang};\end{aligned} \tag{2.44}$$

beide He Flüssigkeiten werden bei tiefen Temperaturen supraflüssig. Während ^{4}He „Bose-kondensiert“ (bei tiefen Temperaturen $T < 2.17\,\mathrm{K}$ besetzen alle ^{4}He Atome den gleichen Einteilchenzustand), müssen sich die fermionischen ^{3}He Atome erst Paaren ($\rightarrow$ Bosonen) um dann via einem so genannten BCS (Bardeen Cooper Schrieffer) Übergang bei tiefsten Temperaturen $T \sim 10\,\mathrm{mK}$ in den supraflüssigen Zustand überzugehen.

2.5.5 Symmetrie unter Zeitevolution

Die Zeitevolution erhält die Symmetrie, denn sei

$$U_\pi \Psi = (\pm)^\pi \Psi, \qquad \begin{matrix}\text{Bosonen } (+),\\ \text{Ferminonen } (-),\end{matrix} \tag{2.45}$$

dann ist

$$\begin{aligned} U_\pi \Psi(t+dt) &= U_\pi \Psi(t) + U_\pi[\partial_t \Psi(t)]dt \\ &= (\pm)^\pi \Psi - iU_\pi(H/\hbar)\Psi dt \\ &\quad \downarrow_{[H,U_\pi]=0} \\ &= (\pm)^\pi \Psi - i(H/\hbar)U_\pi \Psi dt \qquad (2.46) \\ &= (\pm)^\pi[\Psi + (\partial_t \Psi)dt] = (\pm)^\pi \Psi(t+dt). \qquad (2.47) \end{aligned}$$

2.5.6 Vielteilchenzustände nichtwechselwirkender identischer Teilchen

Für nichtwechselwirkende Teilchen können wir den Hamiltonoperator schreiben als

$$H = \sum_{i=1}^{N} H_0(x_i), \qquad x_i = (\boldsymbol{r}_i, s_i), \tag{2.48}$$

wobei H_0 den Einteilchen-Hamiltonoperator bezeichnet. Mit den Einteilchenlösungen

$$H_0 \varphi_\alpha = \varepsilon_\alpha \varphi_\alpha, \qquad \{\varphi_\alpha\} \text{ ein vollständiges Orthonormalsystem (vONS)}, \tag{2.49}$$

können wir N-Teilchen Produkteigenzustände

$$\Psi(x_1, \ldots, x_N) = \varphi_{\alpha_1}(x_1)\varphi_{\alpha_2}(x_2)\cdots\varphi_{\alpha_N}(x_N) \tag{2.50}$$

zu H definieren. Die Gesamtenergie ist dabei $E = \sum_i \varepsilon_{\alpha_i}$. Gleichung (2.50) beschreibt ein N-Teilchen System in den Zuständen $\varphi_{\alpha_1}, \varphi_{\alpha_2}, \ldots \varphi_{\alpha_N}$, zum Beispiel für $N = 4$ und V ein Potentialtopf

$$\Psi_{1356} = \varphi_1(\boldsymbol{r}_1)\varphi_3(\boldsymbol{r}_2)\varphi_5(\boldsymbol{r}_3)\varphi_6(\boldsymbol{r}_4), \tag{2.51}$$

wie in Abbildung 2.2 dargestellt.

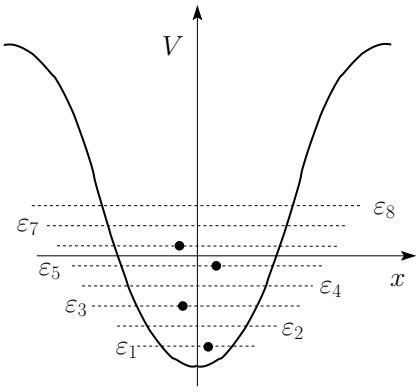


Abbildung 2.2: Besetzung eines fermionischen Systems im Zustand Ψ_{1356}. Das Pauliprinzip (die Symmetrie der Wellenfunktion) lässt höchstens ein Teilchen pro Zustand zu.

Fermionen: Für Fermionen müssen wir Ψ antisymmetrisieren,

$$\Psi \mapsto \Psi_{\mathcal{A}} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\pi \in S_N} (-1)^{\pi} \varphi_{\alpha_1}(x_{\pi(1)}) \cdots \varphi_{\alpha_N}(x_{\pi(N)})$$
$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{\alpha_1}(x_1) & \cdots & \varphi_{\alpha_1}(x_N) \\ \varphi_{\alpha_2}(x_1) & \cdots & \varphi_{\alpha_2}(x_N) \\ \vdots & \vdots & \\ \varphi_{\alpha_N}(x_1) & \cdots & \varphi_{\alpha_N}(x_N) \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \phi_{\alpha_i}(x_j); \tag{2.52}$$

Hier garantiert der Faktor $(N!)^{-1/2}$ die Normierung der Vielteilchen-Wellenfunktion. Die Determinante im Ausdruck (2.52) heißt Slaterdeterminante. Falls es ein Paar $i \neq j$ gibt, mit $\alpha_i = \alpha_j$ ist $\Psi_{\mathcal{A}} \equiv 0$. Damit verlangt das paulische Ausschlussprinzip,[6] dass keine zwei Fermionen denselben Zustand in Spin und Bahn besetzen.

Bosononen: Für Bosonen müssen wir die Wellenfunktion Ψ symmetrisieren,

$$\Psi \mapsto \Psi_{\mathcal{S}} = \sqrt{\frac{1}{N! \prod_j n_j!}} \sum_{\pi \in S_N} \varphi_{\alpha_1}(x_{\pi(1)}) \cdots \varphi_{\alpha_N}(x_{\pi(N)}); \tag{2.53}$$

es ist eine einfache Übung zu zeigen, dass der Vorfaktor die Normierung der Wellenfunktion garantiert. Die Entartung n_j gibt an, wieviele der Indizes α_i den gleichen Wert j aufweisen (dabei gilt $\sum_j n_j = N$).

2.5.7 Fermisee

Die Elektronen im Festkörper werden im einfachsten Fall beschrieben durch

- Innere- oder Valenz-Elektronen; dies sind fest an die Atome (oder im Atomverband) gebundene Elektronen und definieren volle Elektronen-Bänder.

[6] 1925 erstmals zur Erklärung des Periodensystems der Elemente durch W. Pauli postuliert.

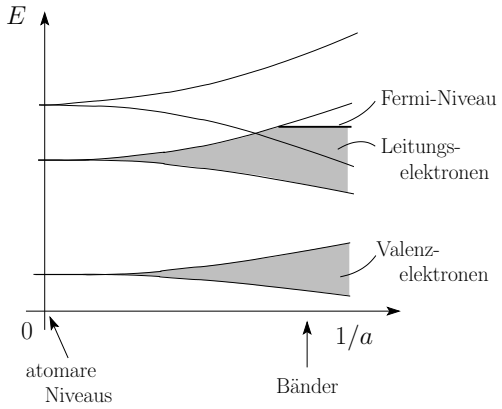


Abbildung 2.3: Elektronenzustände im Festkörper formieren sich zu Bändern. Gut separierte Atome mit $a \to \infty$, a der Gitterabstand, zeigen ein diskretes Spektrum. Bei endlichen (kleinen) Abständen vermögen die Elektronen zwischen den Gitterplätzen zu hüpfen und es formieren sich Energiebänder die bis zum Fermi Niveau gefüllt sind.

- Leitungselektronen. Das sind quasi-freie bewegliche Elektronen in teilweise gefüllten Bändern, vgl. Abbildung 2.3.

Die Bänder sind bis zum Fermi-Niveau gefüllt. Liegt das Fermi-Niveau in einem Band handelt es sich um ein Metall, liegt das Fermi-Niveau in einer Energielücke liegt ein Halbleiter oder ein Isolator vor.

Die Leitungselektronen lassen sich am einfachsten als Gas von freien Spin-1/2 Fermionen beschreiben mit dem Hamiltonoperator $H_0 = p^2/2m$. Der Grundzustand $|\Phi_0\rangle$ („Fermisee“) hat die Form einer Slaterdeterminanten, wobei die niederenergetischen Zustände mit $k \leq k_F$ besetzt sind, der Fermikugel mit Radius k_F. Die Eigenzustände des Einteilchen-Hamiltonoperators sind ebene Wellen $\phi_{\boldsymbol{k}} \propto e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$. Für den konkreten Fall, dass sich die Teilchen im Volumen $\Omega = L^3$ mit periodische Randbedinungen befinden, erhält man die Quantisierungsbedingung $\boldsymbol{k} = (2\pi/L)\mathbb{Z}^3$. Die Anzahl Zustände in der Fermikugel sind

$$N = \frac{\text{Volumen der Kugel}}{\text{Volumen pro Gitterpunkt}} = g_s \frac{(4\pi/3)k_F^3}{(2\pi/L)^3} \tag{2.54}$$

wobei der Faktor $g_s = 2$ die Spinentartung berücksichtigt.[7] Man erhält aus (2.54) den Zusammenhang zwischen der Elektronendichte $n = N/\Omega$ und den Parametern $\varepsilon_F = p_F^2/2m$ (Fermienergie), $p_F = \hbar k_F$ (Fermiimpuls), $k_F = \sqrt{2m\varepsilon_F}/\hbar$ (Fermiwellenzahl) des Fermigases gegeben durch

$$k_F^3 = \frac{6\pi^2}{g_s} n \tag{2.55}$$

[7]Wenn man anstelle der periodischen Randbedinungen unendlich hohe Potentialwände annimmt, so dass $\phi_j(\boldsymbol{r})$ am Rand verschwindet, erhalten wir die Einteilchenwellenfunktionen $\phi_{\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{r}) = \prod_{i=1}^3 \sin k_i' r_i$ mit $k_i = \pi n_i/L$ und $n_i \in \mathbb{N}$. Die Anzahl der Zustände in der Fermikugel ist dann gegeben durch $N = g_s V_{k_F}^{>}/(\pi/L)^3$ wobei $V_{k_F}^{>}$ das Volumen der Fermikugel im ersten Oktant mit $V_{k_F}^{>} = (4\pi/3)k_F^3/8$. Das Resultat (2.54) (und damit auch die folgenden Resultate) bleiben daher unverändert.

Die zugehörige Grundzustandsenergie ist

$$E_0 = g_s \sum_{k<k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = g_s \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int_{k<k_F} d^3k \, \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = N \frac{3}{5} \varepsilon_F. \tag{2.56}$$

Damit findet man für die Grundzustandsenergiedichte $e_0 = 3\varepsilon_F n/5$ und welche dem Fermidruck $p = \partial E_0/\partial \Omega = e_0$ des Quantengases bei 0 K entspricht. Die Grundzustandsenergie $\propto N\varepsilon_F$ von N Fermionen ist immer hoch, da sich die Teilchen meiden und somit hochenergetische Zustände besetzen werden. Wir finden folgende Energieskala in typischen Metallen: Mit

$$\begin{aligned} \varepsilon_F &= \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = 3{,}81 \,\text{eV} \cdot k_F^2 \,[\text{Å}^{-2}] \quad \text{und} \\ k_F &\approx \frac{\pi}{a}, \qquad a = \text{Gitterkonstante} \approx 3\text{Å}, \end{aligned} \tag{2.57}$$

erhalten wir $k_F \sim 1$ Å^{-1} und $\varepsilon_F \sim$ einige eV typischerweise, das sind einige 10^4 K. Somit ist die kinetische Energie von Elektronen in Metallen bei Zimmertemperatur nicht 300 K sondern ~ 30000 K. Der Fermidruck entspricht dabei $\sim \varepsilon_F/a^3 \sim 10^6$ atm.

2.5.8 Bosekondensat

Der Grundzustand des bosonischen Vielteilchensystems (mit Spin-0) sieht sehr verschieden vom Fermisee aus. Der Produktzustand

$$\Psi_0 = \prod_{i=1}^{N} \varphi_0(\boldsymbol{r}_i) \tag{2.58}$$

mit φ_0 dem Einteilchengrundzustand ist bereits symmetrisch und $E_0 = N\varepsilon_0$: Die Bosonen kondensieren im Zustand tiefster Energie. Dieses Kondensationsphänomen führt schließlich zur Suprafluidität eines Bosesystems bei tiefen Temperaturen. Fermionen können nur kondensieren wenn sie sich zuerst paaren, zum Beispiel in der Form von Cooperpaaren bei der Supraleitung in Metallen.[8]

2.5.9 Streuung identischer Teilchen

Betrachte die Kollision/Streuung zweier identischen Teilchen. Wir separieren in Schwerpunkts- und Relativkoordinaten $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{r}_2$ und $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$. Damit ist $\boldsymbol{R}$ symmetrisch und $\boldsymbol{r}$ antisymmetrisch in $\boldsymbol{r}_1$ und $\boldsymbol{r}_2$. Wir teilen die Gesamtwellenfunktion in Spin- und Bahnanteile aus,

$$\Psi(x_1, x_2) = e^{i\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{R}} \psi(\boldsymbol{r}) \chi(s_1, s_2). \tag{2.59}$$

[8] Dieses Paarungsphänomen ist etwas komplexerer Natur und wir verweisen auf Kap. 5.2 und auf die entsprechende Standardliteratur zur BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer) Theorie.

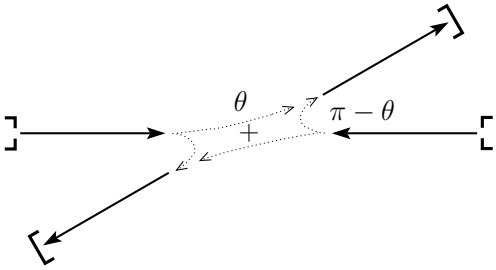


Abbildung 2.4: Die Symmetrisierung der Streuwellenfunktion erzeugt zwei Trajektorien mit Streuwinkeln θ und $\pi - \theta$ die kohärent zu addieren sind.

Für unterscheidbare Teilchen hat die Streulösung die asymptotische Form

$$\psi(\boldsymbol{r}) \sim e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}})\frac{e^{ikr}}{r}. \tag{2.60}$$

Spin-0 Bosonen: Für Bosonen mit Spin-0 ist $\chi = 1$ und wegen der Symmetrie von Ψ gilt $\psi(\boldsymbol{r}) = \psi(-\boldsymbol{r})$; entsprechend müssen wir die Streulösung symmetrisieren und wir erhalten

$$\psi \sim \left(e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\right) + [f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}}) + f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{-\boldsymbol{r}})]\frac{e^{ikr}}{r}. \tag{2.61}$$

Für den differentiellen Wirkungsquerschnitt erhalten wir

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega_{\boldsymbol{r}}} &= \left|f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}}) + f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{-r})\right|^2 \\ &= \underbrace{\left|f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}})\right|^2 + \left|f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{-\boldsymbol{r}})\right|^2}_{\text{klassische Terme}} + \underbrace{2\mathrm{Re}\left[f^*_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}})f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{-\boldsymbol{r}})\right]}_{\text{Interferenzterme}}.\end{aligned} \tag{2.62}$$

Die klassischen Terme ist die Addition der Wirkungsquerschnitte für die Detektion eines der beiden Teilchens (der Detektor kann ja nicht unterscheiden, welches Teilchen ankommt). Die Interferenzterme erscheinen als Folge der Symmetrisierung auf Grund der Teilchen-Statistik.

Für eine zentralsymmetrisches Potential $V(r)$ hängt die Streuamplitude $f_{\boldsymbol{k}}$ nur vom Streuwinkel θ ab. Die Inversion $\boldsymbol{r} \mapsto -\boldsymbol{r}$ in Polarkoordinaten gegeben ist durch $\theta \mapsto \pi - \theta, r \mapsto r$. Damit vereinfacht sich Gl. (2.62) in

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\boldsymbol{r}}} = \left|f_{\boldsymbol{k}}(\theta) + f_{\boldsymbol{k}}(\pi-\theta)\right|^2 = \left|f_{\boldsymbol{k}}(\theta)\right|^2 + \left|f_{\boldsymbol{k}}(\pi-\theta)\right|^2 + 2\mathrm{Re}\left[f^*_{\boldsymbol{k}}(\theta)f_{\boldsymbol{k}}(\pi-\theta)\right].$$

Die dabei auftretenden Winkel sind in Abbildung 2.4 dargestellt. Durch die Interferenzterme verdoppelt sich für Bosonen im Fall $\theta = \pi/2$ der Wirkungsquerschnitt gegenüber dem klassischen Resultat,

$$\theta = \frac{\pi}{2}: \qquad \frac{d\sigma}{d\Omega_{\boldsymbol{r}}} = 4\left|f_{\boldsymbol{k}}(\pi/2)\right|^2. \tag{2.63}$$

In der Partialwellendarstellung

$$\begin{aligned} f_{\boldsymbol{k}}(\theta) &= \sum_l i^l (2l+1) f_l P_l(\cos\theta) \\ \downarrow P_l(\cos\theta) &= (-1)^l P_l(\cos(\pi-\theta)) \\ f_{\boldsymbol{k}}(\theta) + f_{\boldsymbol{k}}(\pi-\theta) &= 2 \sum_{l \text{ gerade}} i^l (2l+1) f_l P_l(\cos\theta), \end{aligned} \tag{2.64}$$

finden wir, dass nur gerade Drehimpulse l vorkommen (für ungerade l wechselt das Legendre Polynom das Vorzeichen und die Beiträge löschen sich gegenseitig aus).

Spin-1/2 Fermionen: Im Falle der Spin-1/2 Fermionen sind zwei Fälle möglich:

1. Der Spin-Singulett Zustand $\chi_s = \big[(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\big]/\sqrt{2}$ ist antisymmetrisch und konsequenterweise muss der Bahnanteil

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \psi(-\boldsymbol{r}) \tag{2.65}$$

symmetrisch sein. Der Wirkungsquerschnitt ist gleich dem der Spin-0 Bosonen,

$$\left.\frac{d\sigma}{d\Omega_{\boldsymbol{r}}}\right|_s = \big|f_{\boldsymbol{k}}(\theta) + f_{\boldsymbol{k}}(\pi-\theta)\big|^2. \tag{2.66}$$

2. Die symmetrischen Spin-Triplett Zustände

$$\chi_t = \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \big[|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\big]/\sqrt{2} \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases} \tag{2.67}$$

erzwingen eine antisymmetrische Bahnwellenfunktion $\psi(\boldsymbol{r}) = -\psi(-\boldsymbol{r})$ und wir erhalten eine Streuamplitude $f_{\boldsymbol{k}}(\theta) \to f_{\boldsymbol{k}}(\theta) - f_{\boldsymbol{k}}(\pi-\theta)$ die nur ungerade Drehimpulse l enthält. Damit ergibt sich der Wirkungsquerschnitt

$$\left.\frac{d\sigma}{d\Omega_{\boldsymbol{r}}}\right|_t = \big|f_{\boldsymbol{k}}(\theta) - f_{\boldsymbol{k}}(\pi-\theta)\big|^2 \qquad (=0 \text{ für } \theta=\pi/2). \tag{2.68}$$

Beachte, dass polarisierte Fermionen nur in ungeraden Drehimpulskanälen streuen: kalte bosonische Atome zeigen ein Kontaktpotential und Streuen hauptsächlich im s-Wellen Kanal, vgl. (2.64)]. Kalte polarisierte fermionische Atome hingegen wechselwirken viel schwächer, da erst der p-Wellen Kanal auftritt (der Wirkungsquerschnitt σ_l verhält sich wie $\sim a^2(ak)^{4l}$ bei tiefen Energien).

Im Fall eines statistischen Ensembles für einen unpolarisierten Strahl ergibt sich das gewichtete Mittel (aus 3 Triplett Zustände und 1 Singulett Zustand)

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega_{\boldsymbol{r}}} &= \frac{3}{4}\left.\frac{d\sigma}{d\Omega_{\boldsymbol{r}}}\right|_t + \frac{1}{4}\left.\frac{d\sigma}{d\Omega_{\boldsymbol{r}}}\right|_s \\ &= \big|f_{\boldsymbol{k}}(\theta)\big|^2 + \big|f_{\boldsymbol{k}}(\pi-\theta)\big|^2 - \mathrm{Re}\left[f^*_{\boldsymbol{k}}(\theta) f_{\boldsymbol{k}}(\pi-\theta)\right]. \end{aligned} \tag{2.69}$$

Kapitel 3

Atome

3.1 Atom mit zwei Elektronen

Zum Einstieg betrachten wir das 2-Elektronen Atom, Helium He ($Z = 2$) oder die Ionen H^- ($Z = 1$), Li^+ ($Z = 3$) und Be^{++} ($Z = 4$) beschrieben durch den Hamiltonoperator

$$H = H_0 + H_{\text{ww}} = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|}. \tag{3.1}$$

Hier beschreiben $\boldsymbol{r}_1$ und $\boldsymbol{r}_2$ die Position der Elektronen bezüglich dem Atomkern und $e > 0$ bezeichnet die Elementarladung. Wir haben angenommen das der Kern sich nicht bewegt, was auf Grund des Masseunterschieds zwischen den Elektronen und dem Kern eine vernünftige Näherung darstellt. Der Hamiltonoperator (3.1) ist wegen des Wechselwirkungsterms $H_{\text{ww}} = e^2/r_{12}$, $r_{12} = |\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|$, zwischen den beiden Elektronen nicht exakt lösbar. Die einfachste approximative Lösung behandelt diesen Term störungstheoretisch, das heißt wir lösen zuerst das nicht wechselwirkende Problem $H_0\Psi_0 = E_0\Psi_0$ und bestimmen dann die Korrektur $E_1 = \langle\Psi_0|e^2/r_{12}|\Psi_0\rangle$. Die Lösungen von $H_0\Psi_0 = E_0\Psi_0$ sind die Produktwellenfunktionen $\Psi_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \varphi_{\alpha_1}(\boldsymbol{r}_1)\varphi_{\alpha_2}(\boldsymbol{r}_2)$, wobei $\varphi_\alpha(\boldsymbol{r})$ eine Wasserstoff Wellenfunktion zur Kernladung Z ist mit $\alpha = nlm$. Die zugehörigen Energien sind

$$E_0 = \varepsilon_{\alpha_1} + \varepsilon_{\alpha_2} \tag{3.2}$$

mit

$$\varepsilon_\alpha = -\frac{Z^2}{n^2}E_R, \qquad E_R = \frac{e^2}{2a_B} = 1\,\text{Ry} \approx 13{,}6\,\text{eV}, \qquad a_B = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0{,}529\,\text{Å}. \tag{3.3}$$

Zusätzlich müssen wir das Pauliprinzip für Fermionen berücksichtigen. Die totale Wellenfunktion $\Psi(x_1, x_2)$ ist antisymmetrisch in $x_i = (\boldsymbol{r}_i, s_i)$,

$$\Psi(x_1, x_2) = -\Psi(x_2, x_1). \tag{3.4}$$

Die Separation von Spin- und Bahnanteilen ergibt

$$\Psi(x_1, x_2) = \Psi_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\chi_0(s_1, s_2), \tag{3.5}$$

wobei sich die Antisymmetrie der Gesamtwellenfunktion auf zwei Arten konstruieren lässt, entweder mit

$$\begin{cases} \Psi_0 & \text{symmetrisch,} \\ \chi_0 & \text{antisymmetrisch,} \quad (S = 0, \quad \text{Singulett}) \end{cases} \tag{3.6}$$

also einer antisymmetrischen Spinfunktion (Spin-Singulett Zustand), oder via

$$\begin{cases} \Psi_0 & \text{antisymmetrisch,} \\ \chi_0 & \text{symmetrisch,} \quad (S = 1, \quad \text{Triplett}) \end{cases} \tag{3.7}$$

mit einer symmetrischen Spinfunktion (Spin-Triplett Zustand). Mit Ψ_0 antisymmetrisch muss $\alpha_1 \neq \alpha_2$ sein, was uns mindestens die zusätzliche Energie

$$\Delta E = Z^2(1 - 1/2^2)E_R \approx Z^2 \times 10\,\text{eV} \tag{3.8}$$

kostet. Wir wählen daher den Spin-Singulett Zustand als Kandidaten für den Grundzustand mit

$$\begin{aligned} \Psi_0(x_1, x_2) &= \varphi_{100}(\boldsymbol{r}_1)\,\varphi_{100}(\boldsymbol{r}_2)\,\chi_{00}(s_1, s_2), \\ \varphi_{100}(r) &= (Z^3/\pi a_B^3)^{1/2}\exp(-Zr/a_B), \\ \chi_{00}(s_1, s_2) &= [\chi_\uparrow(s_1)\chi_\downarrow(s_2) - \chi_\downarrow(s_1)\chi_\uparrow(s_2)]/\sqrt{2}, \\ E_0 &= -2Z^2E_R = -Z^2e^2/a_B. \end{aligned} \tag{3.9}$$

Die Korrektur E_1 folgt durch Integration

$$\begin{aligned} E_1 &= \int d^3r_1\, d^3r_2\, \frac{Z^6e^2}{a_B^6\pi^2}\frac{\exp[-2Z(r_1 + r_2)/a_B]}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|} \\ &= \frac{5}{8}\frac{Ze^2}{a_B}. \end{aligned} \tag{3.10}$$

Wir erhalten die Grundzustandsenergie

$$E_G = E_0 + E_1 = -\Big(Z - \frac{5}{8}\Big)\frac{Ze^2}{a_B}. \tag{3.11}$$

in erster Ordnung Störungstheorie. Diese Energie stellt eine obere Schranke für den wirklichen Wert der Grundzustandsenergie dar, weil die erste Ordnung Störungstheorie äquivalent zum Rayleigh-Ritz Variationsprinzip mit der ungestörten Grundzustandwellenfunktion als Testfunktion ist.

Für das He-Atoms ($Z = 2$) erhalten wir $E_G \approx -5{,}5\,\mathrm{Ry}$. Der experimentell gemessene Wert ist $E_G^{\mathrm{He}} \approx -5{,}8\,\mathrm{Ry}$, etwa 4 eV tiefer als unser berechneter Wert. Mit einem Variationsansatz $Z \mapsto \alpha$ (α Variationsparameter)[1] finden wir die Abschätzung

$$\begin{aligned} E_G &= \min_\alpha \Big(\alpha - 2Z + \frac{5}{8}\Big)\frac{\alpha\, e^2}{a_B} = -\Big(Z - \frac{5}{16}\Big)^2 \frac{e^2}{a_B} \qquad (\alpha = Z - 5/16) \\ &\approx -5{,}7\ \mathrm{Ry}, \end{aligned} \tag{3.12}$$

eine Verbesserung um $\approx 2{,}7\,\mathrm{eV}$; es fehlen noch etwa 1,4 eV von total 79 eV, ein ansehnliches Resultat. Die durch $Z \mapsto \alpha$ erbrachte Verbesserung ist eine Folge der Berücksichtigung von Abschirmeffekten: jedes Elektron „sieht“ nur eine Ladung $2 - 5/16 = 27/16$ statt $Z = 2$.

Für das Wasserstoffion H^- ($Z = 1$) erhalten wir

$$E_G = -\Big(\frac{11}{16}\Big)^2 \frac{e^2}{a_B} \approx -12{,}86\,\mathrm{eV}. \tag{3.13}$$

Die Konfiguration $\mathrm{H} + \mathrm{e}^-$ entspricht der Energie $-13{,}6$ eV, womit H^- instabil wäre; experimentell ist aber H^- stabil, weshalb unser Resultat um mindestens $(3/4)\,\mathrm{eV}$ falsch liegen muss.

3.2 Hartree- und Hartree-Fock-Näherung

Gehen wir zu größeren Atomen über, sind wir mit einem komplizierten elektronischen Vielteilchenproblem konfrontiert. Die allgemeine Form dieses Vielteilchenproblems lässt sich durch den Hamiltonoperator

$$H = \sum_{i=1}^{N} \Big[\frac{p_i^2}{2m} + U(\boldsymbol{r}_i)\Big] + \underbrace{\frac{1}{2}\sum_{i\neq j} \overbrace{\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|}}^{V_{\mathrm{int}}^{ij}}}_{V_{\mathrm{int}}} \tag{3.14}$$

beschreiben (wir vernachlässigen hier Wechselwirkungen die den Spin einbeziehen). Das Potential $U(\boldsymbol{r})$ sei ein vorgegebenes (externes) Potential; für Atome der Ladung Z ist $U(\boldsymbol{r}) = -Ze^2/r$. Naiv könnten wir wiederum erst das Einteilchenproblem

$$h = \frac{p^2}{2m} + U(\boldsymbol{r}), \qquad\qquad h\varphi_j(\boldsymbol{r}) = \varepsilon_j \varphi_j(\boldsymbol{r}), \tag{3.15}$$

lösen, die Vielteilchenfunktion als antisymmetrische Produktwellenfunktion [d. h. als Slater-Determinante (2.52)] ansetzen und den Wechselwirkungsterm im Hamiltonoperator als Störung behandeln. Die zu erwartenden Resultate sind mittelmäßig, wie

[1] Man ersetze $Z \mapsto \alpha$ nur in der Wellenfunktion nicht im Hamiltonoperator!

wir am Beispiel des He-Atoms gesehen haben. Das Problem ist, dass die Elektronen nicht nur dem Potential $U(\boldsymbol{r})$ unterworfen sind, sondern sich zudem im (mittleren) Feld der anderen Elektronen bewegen, was zu einer Abschirmung von U führt. Diese Abschirmung hängt wiederum von den Bahnen der Elektronen ab, somit müssen wir die Bahnen und die Abschirmungseffekte selbstkonsistent bestimmen. Dies ist gerade die Leistung der Hartree- und Hartree-Fock-Näherung: Die Hartree-Näherung berücksichtigt dabei (nur) die Abschirmungseffekte und nicht die Austauscheffekte auf Grund der fermionischen Natur der Elektronen. Die vollständige Hartree-Fock-Theorie bezieht darüber hinaus die Antisymmetrie der Wellenfunktion mit ein.

3.2.1 Hartree-Näherung

In der Hartree-Näherung besteht die Aufgabe im Auffinden der optimalen Produktwellenfunktion

$$\Psi_{\mathrm{H}} = \varphi_1(\boldsymbol{r}_1)\,\varphi_2(\boldsymbol{r}_2)\cdots\varphi_N(\boldsymbol{r}_N). \tag{3.16}$$

Wir können das Pauli Prinzip wenigstens teilweise berücksichtigen indem wir die φ_i orthogonalisieren und jeden Zustand maximal doppelt besetzen (wegen $g_s = 2$). Mathematisch suchen wir Einteilchenfunktionen φ_i so dass der Erwartungswert der Energie $\langle H\rangle_{\mathrm{H}} = \langle\Psi_{\mathrm{H}}|H|\Psi_{\mathrm{H}}\rangle$ minimal ist; dabei sollen die Wellenfunktionen normiert sein, $\|\varphi_i\| = 1$. Mit diesen Nebenbedingungen, die wir durch Lagrangemultiplikatoren berücksichtigen, haben wir folgendes Funktional zu minimieren:[2]

$$\begin{aligned}\mathcal{F}[\varphi_1(x_1),\ldots,\varphi_N(x_N)] &= \langle H\rangle_{\mathrm{H}} - \sum_{i=1}^{N}\lambda_i\langle\varphi_i|\varphi_i\rangle \\ &= \int\prod_{i=1}^{N} d^3r_i\,(\varphi_1^*\cdots\varphi_N^* H\varphi_1\cdots\varphi_N) - \sum_{i=1}^{N}\lambda_i\int dr_i^3\,\varphi_i^*\varphi_i \\ &= \sum_{i=1}^{N}\int dr_i^3\,\varphi_i^*\left[\frac{p_i^2}{2m} + U(\boldsymbol{r}_i) + \frac{1}{2}{\sum_j}'\int d^3r_j\,\varphi_j^*\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|}\varphi_j - \lambda_i\right]\varphi_i.\end{aligned} \tag{3.17}$$

Im Minimum von $\mathcal{F}$ verschwindet die Variation $\delta\mathcal{F} = 0$ und wir finden die Bedingung $(\delta\mathcal{F}/\delta\varphi_i^* = 0)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\boldsymbol{r}) + \int d^3r'\frac{e}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}{\sum_j}'e|\varphi_j(\boldsymbol{r}')|^2\right]\varphi_i(\boldsymbol{r}) = \lambda_i\varphi_i(\boldsymbol{r}). \tag{3.18}$$

Die Summe $n_i(\boldsymbol{r}') = {\sum_j}'|\varphi_j(\boldsymbol{r}')|^2$ beschreibt die mittlere Ladungsverteilung $-e\,n_i(\boldsymbol{r}')$ der anderen Elektronen $j \neq i$. Das System (3.18) definiert die Hartree-Gleichungen;

[2] Das Symbole ${\sum_j}'$ beschreibt die Summe über j ohne den Term $j = i$.

die Optimierung der Einteilchenwellenfunktionen φ_i berücksichtigt die Präsenz der anderen Elektronen über den Wechselwirkungsterm

$$V_{\mathrm{H}}(\boldsymbol{r}) = \int d^3r' \, \frac{e^2 n_i(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|}. \tag{3.19}$$

Beachte, dass die φ_i im allgemeinen nicht orthogonal sind, da $n_i(\boldsymbol{r})$ von i abhängt. Man schreibt deshalb meist $n_i(\boldsymbol{r}) \approx n(\boldsymbol{r})$ für die Teilchendichte, da ein Elektron nur eine kleine Störung der $N \gg 1$ Elektronenwolke darstellt. Die Dichte $-e\,n(\boldsymbol{r})$ beschreibt dann die Ladungsverteilung, welche eine externe Testladung wahrnimmt und die φ_i werden damit orthogonal. Der (Hartree-) Erwartungswert der Grundzustandsenergie $E_{\mathrm{H}} = \langle H \rangle_{\mathrm{H}} = \sum_i \lambda_i - \langle V_{\mathrm{int}} \rangle_{\mathrm{H}}$ stellt eine obere Schranke für die exakte Grundzustandsenergie dar.

Die Lagrangemultiplikatoren λ_i erscheinen in der Hartree-Gleichung wie Einteilchenenergien ε_i. Um ihre physikalische Bedeutung zu bestimmen, multiplizieren wir (3.18) mit φ_i^* und integrieren über $\boldsymbol{r}$. Wir erhalten

$$\lambda_i = \int d^3r \left[\frac{p^2}{2m} + U(\boldsymbol{r}) \right] |\varphi_i(\boldsymbol{r})|^2 + {\sum_j}' \int d^3r \, d^3r' \, \frac{e^2 |\varphi_i(\boldsymbol{r})|^2 |\varphi_j(\boldsymbol{r}')|^2}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|}. \tag{3.20}$$

Da λ_i gerade diejenigen Terme von $\langle H \rangle_{\mathrm{H}}$ berücksichtigt (siehe (3.17)), welche φ_i enthalten, entspricht $-\lambda_i$ der Ionisationsenergie unter der Annahme, dass sich die anderen Wellenfunktionen nicht ändern (Koopmans Theorem). In Realität relaxieren die anderen Wellenfunktionen, d. h. der relaxierte Zustand $\Psi_{\mathrm{H},i}^{(N-1)}$ (mit $N-1$ Teilchen) enthält modifizierte Einteilchenwellen. Allerdings hinterlässt das „Herausschlagen“ des i-ten Elektrons, zum Beispiel in einem Photoemissionsexperiment, ein Austauschloch, welches erst nach einer endlichen Relaxationszeit gefüllt wird. Ein schneller Ionisierungsprozess (z. B. via Photoemission) involviert daher die unrelaxierte Ionisierungsenergie $-\lambda_i$ und nicht die relaxierte Größe $\lambda_i^{\mathrm{ion}} = \langle H \rangle_{\mathrm{H}} - \langle \Psi_{\mathrm{H},i} | H | \Psi_{\mathrm{H},i} \rangle$.

3.2.2 Hartree-Fock-Näherung

Die Hartree-Fock-Theorie geht einen Schritt weiter und minimiert

$$\langle \Psi_{\mathrm{HF}} | H | \Psi_{\mathrm{HF}} \rangle - \sum_i \lambda_i \langle \varphi_i | \varphi_i \rangle \tag{3.21}$$

im Variationsraum aufgespannt durch die Slaterdeterminante[3]

$$\Psi_{\mathrm{HF}} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(\boldsymbol{r}_1)\chi_{\sigma_1}(s_1) & \cdots & \varphi_1(\boldsymbol{r}_N)\chi_{\sigma_1}(s_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_N(\boldsymbol{r}_1)\chi_{\sigma_N}(s_1) & \cdots & \varphi_N(\boldsymbol{r}_N)\chi_{\sigma_N}(s_N) \end{vmatrix}. \tag{3.22}$$

[3] Beachte, dass die Slaterdeterminante Ψ_{HF} in Wirklichkeit nur vom Variationsraum $\mathrm{span}\{\varphi_1, \ldots, \varphi_N\}$ abhängt und nicht von der Wahl der Basisfunktionen φ, welche diesen Raum aufspannen.

Die Einteilchenerwartungswerte von p_i^2 und $U(\boldsymbol{r}_i)$ bleiben unverändert, während der Wechselwirkungsterm jetzt zwei Terme erzeugt,

$$\langle V_{\text{int}}\rangle_{\text{HF}} = \frac{1}{2}\int d^3r\, d^3r'\, \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\sum_{i\neq j}\Big[\varphi_i^*(\boldsymbol{r})\varphi_j^*(\boldsymbol{r}')\varphi_j(\boldsymbol{r}')\varphi_i(\boldsymbol{r}) - \delta_{\sigma_i\sigma_j}\varphi_i^*(\boldsymbol{r})\varphi_j^*(\boldsymbol{r}')\varphi_j(\boldsymbol{r})\varphi_i(\boldsymbol{r}')\Big]. \quad (3.23)$$

Der spinabhängige Term $\propto \delta_{\sigma_i\sigma_j}$ wird Fock- oder Austausch-Term genannt.

Seine Herleitung involviert die folgende Schritte: Ausgehend vom Produktzustand $\Psi_{\text{H}} = \prod_i \varphi_i(\boldsymbol{r}_i)\chi_{\sigma_i}(s_i)$ definieren wir den anti-symmetrisierten Zustand $\Psi_{\text{HF}} = \sqrt{N!}\mathcal{A}\Psi_{\text{H}} = 1/\sqrt{N!}\sum_{\pi\in S_N}(-1)^\pi U_\pi\Psi_{\text{H}}$ und berechnen das Matrixelement[4]

$$\begin{aligned}
\langle V_{\text{int}}\rangle_{\text{HF}} &= N!\langle\Psi_{\text{H}}\mathcal{A}V_{\text{int}}\mathcal{A}\Psi_{\text{H}}\rangle \\
&\downarrow \qquad (\mathcal{A}V_{\text{int}}\mathcal{A}=V_{\text{int}}\mathcal{A}^2=V_{\text{int}}\mathcal{A}, \quad \text{da } [\mathcal{A},V_{\text{int}}]=0) \\
&= \frac{1}{2}\sum_{j\neq i}\sum_{\pi\in S_N}(-1)^\pi\langle\Psi_{\text{H}}V_{\text{int}}^{ij}U_\pi\Psi_{\text{H}}\rangle \quad [\text{nur } \pi=1 \text{ und } \pi=(i\leftrightarrow j) \text{ verschwinden nicht}] \\
&= \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\langle\Psi_{\text{H}}|V_{\text{int}}^{ij}[1-(i\leftrightarrow j)]|\Psi_{\text{H}}\rangle\,. \qquad (3.24)
\end{aligned}$$

Nun gilt $\langle\chi_{\text{H}}|\chi_{\text{H}}\rangle = 1$ und

$$\langle\chi_{\text{H}}|(i\leftrightarrow j)|\chi_{\text{H}}\rangle = \delta_{s_is_j}. \quad (3.25)$$

mit $\chi_{\text{H}} = \prod_i \chi_{\sigma_i}$ auf dem Spinraum. Der beiden Terme in (3.24) beschreiben dann gerade den Hartree- und den Austauschbeitrag in Gleichung (3.23).

Analog zu (3.18) variieren wir $\delta\mathcal{F}/\delta\varphi_i^* = 0$ und erzeugen damit die Hartree-Fock-Integro-Differentialgleichungen

$$\begin{aligned}
&\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\boldsymbol{r}) + \int d^3r'\,\frac{e^2n_i(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\right]\varphi_i(\boldsymbol{r}) \qquad (3.26)\\
&\quad -\sum_j \delta_{\sigma_i\sigma_j}\int d^3r'\Big[\varphi_j^*(\boldsymbol{r}')\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\varphi_i(\boldsymbol{r}')\Big]\varphi_j(\boldsymbol{r}) = \lambda_i\varphi_i(\boldsymbol{r}).
\end{aligned}$$

In der zweiten Zeile wird über die gesuchte Eigenfunktion φ_i integriert; entsprechend unterliegt das Elektron einem nichtlokalen Potential. Die Formeln (3.18) und (3.26) müssen numerisch durch Iteration gelöst werden.

Beachte, dass die Hartree-Fock-Näherung noch keine Korrelationseffekte[5] berücksichtigt und daher weder (3.18) noch (3.26) exakt sind. Die Grundzustandsenergie

[4] Siehe (2.26) für die Definition des Antisymmetrisieroperators.

[5] Korrelationsenergie: Ein Elektron am Ort $\boldsymbol{r}$ reduziert die Wahrscheinlichkeit dort ein anderes Elektron anzutreffen. Insbesondere kreiert ein Elektron mit Spin-$|\uparrow\rangle$ ein Austausch- und Korrelationsloch für andere Spin-$|\uparrow\rangle$ Elektronen. Die HF Theorie berücksichtigt den Austauschteil; jegliche Anteile zum Austauschloch die über die Molekularfeld HF Theorie hinausgehen werden als Korrelationseffekte bezeichnet.

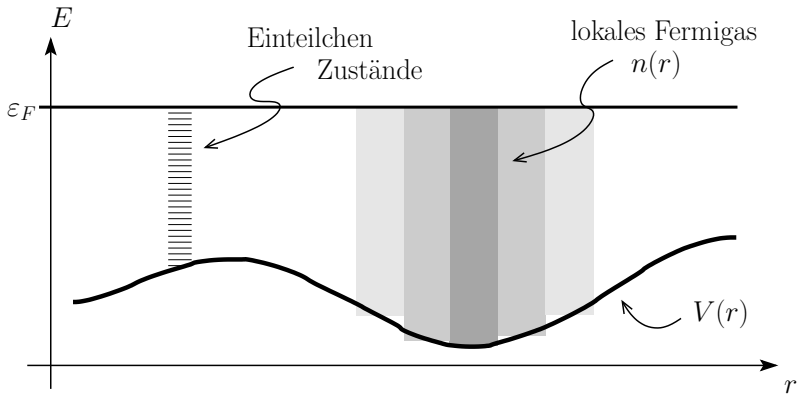


Abbildung 3.1: Thomas-Fermi Abschirmung: Das inhomogene Fermigas wird durch ein lokales Fermigas der Dichte $n(\boldsymbol{r}) = k_F^3(\boldsymbol{r})/3\pi^2$ approximiert. Die ortsabhängige Fermiwellenzahl $k_F(\boldsymbol{r})$ ergibt sich aus dem lokalen Potential $V(\boldsymbol{r})$ unter Berücksichtigung von Abschirmeffekten, vgl. (3.30).

$E_{\text{HF}} = \langle H \rangle_{\text{HF}}$ des Systems berücksichtigt die Terme

$$E_{\text{HF}} = \underbrace{\underbrace{\underbrace{E_0}_{\text{Einteilchen-}} + E_{\text{WW}}}_{\text{Hartree-}} + E_{\text{Austausch.}}}_{\text{Hartree-Fock-}} \tag{3.27}$$

Hinzu kommt noch eine Korrelationsenergie $E_{\text{Korrelation}}$ die man im Rahmen der Vielteilchenphysik/Quantenfeldtheorie via systematischer Entwicklung in einer Störungstheorie findet. Für die Atome liefert die Hartree-Fock-Näherung Resultate, die bis auf typische Korrelations-Energien der Größe $\simeq 0{,}5\,\text{eV}$ pro Elektron genau sind.

3.3 Thomas-Fermi Abschirmung

Wir betrachten Elektronen in einem langsam variierenden Potential $U(\boldsymbol{r})$, welches wir als lokal konstant auffassen können, vgl. dazu Abbildung 3.1. Die Elektronen bilden dann lokal ein Fermigas der Dichte [vgl. (2.55) mit $g_s = 2$]

$$n(\boldsymbol{r}) = \frac{k_F^3(\boldsymbol{r})}{3\pi^2}. \tag{3.28}$$

Eine Testladung am Ort $\boldsymbol{r}$ spürt ein lokales Potential zusammengesetzt aus dem „nackten“ Potential $U(\boldsymbol{r})$ und dem Potential generiert durch das inhomogene Elektronengas,

$$V(\boldsymbol{r}) = U(\boldsymbol{r}) + \int d^3r' \, \frac{e^2\, n(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|}. \tag{3.29}$$

Der zweite Term entspricht dabei genau dem Hartree-Potential, das wir im letzten Kapitel kennengelernt haben.

Die Elektronen im Fermigas verteilen sich im Gleichgewicht so, dass die Zugabe eines Testelektrons an jedem Ort $\boldsymbol{r}$ die identische Energie ε_F kostet, somit gilt

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2(\boldsymbol{r})}{2m} + V(\boldsymbol{r}); \tag{3.30}$$

der erste Term beschreibt die kinetische Energie des zugeführten Elektrons während der zweite Term seine potentielle Energie $V(\boldsymbol{r})$ beschreibt. Die Kombination von (3.28) und (3.30) liefert den Zusammenhang zwischen der lokalen Dichte $n(\boldsymbol{r})$ und dem effektiven Potential $V(\boldsymbol{r})$,

$$n(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{3\pi^2}\left[\frac{2m}{\hbar^2}\big(\varepsilon_F - V(\boldsymbol{r})\big)\right]^{3/2}; \tag{3.31}$$

beachte, dass dies mit (3.29) eine Integralgleichung für die Dichte $n(\boldsymbol{r})$ darstellt. Die Gleichung (3.31) für $n(\boldsymbol{r})$ kann in eine Differentialgleichung für $V(\boldsymbol{r})$ verwandelt werden: die Anwendung des Laplace-Operators ∇^2 auf (3.29) unter Ausnutzung von $\nabla^2\, 1/|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'| = -4\pi\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ ergibt

$$\begin{aligned}\nabla^2 V(\boldsymbol{r}) &= \nabla^2 U(\boldsymbol{r}) - 4\pi e^2 n(\boldsymbol{r}) \\ &= -4\pi e^2\left[-\rho_{\text{ext}}(\boldsymbol{r})/e + n(\boldsymbol{r})\right],\end{aligned} \tag{3.32}$$

wobei $\rho_{\text{ext}}(\boldsymbol{r})$ die das externe Potential $U(\boldsymbol{r})$ erzeugende Ladungsdichte und $n(\boldsymbol{r})$ die abschirmende Elektronendichte bezeichnet. Mit der üblichen Definition der Dielektrizitätskonstanten

$$\varepsilon(\boldsymbol{q}) = \frac{U(\boldsymbol{q})}{V(\boldsymbol{q})} \tag{3.33}$$

erhalten wir [mit $q^2[V(\boldsymbol{q}) - U(\boldsymbol{q})] = 4\pi e^2 n(\boldsymbol{q})$ aus (3.32)]

$$\varepsilon(\boldsymbol{q}) = \frac{q^2(V - V + U)}{q^2 V} = 1 - \frac{(V-U)q^2}{q^2 V} = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2}\frac{n}{V}; \tag{3.34}$$

für kleine $V(\boldsymbol{q})$, $\boldsymbol{q} \neq 0$ ist die abschirmende (induzierte) Ladungsdichte gegeben durch $n \approx (\partial n/\partial V)V = (-\partial n/\partial \varepsilon_F)_{V=0} V$. Einsetzen in (3.33) liefert das Thomas-Fermi Resultat für die Dielektrizitätskonstante eines Metalles,

$$\varepsilon(\boldsymbol{q}) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2}\frac{\partial n}{\partial \varepsilon_F} \equiv 1 + \frac{q_{\text{TF}}^2}{q^2}. \tag{3.35}$$

Um zu sehen, dass das Resultat (3.35) Abschirmung beschreibt, berechnen wir die Rücktransformation von (3.33)

$$V(\boldsymbol{r}) = \int d^3 r' \frac{e^{-q_{\text{TF}}|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{4\pi|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} U(\boldsymbol{r}'). \tag{3.36}$$

In der Tat wird das externe Potential U auf der Länge q_{TF}^{-1} abgeschirmt. Die Thomas-Fermi Wellenzahl wird von der Elektronendichte via k_F bestimmt,

$$q_{\mathrm{TF}}^2 = 4\pi e^2 \frac{\partial n}{\partial \varepsilon_F} = \frac{4e^2 m k_F}{\pi \hbar^2} = \frac{4}{\pi}\frac{k_F}{a_B}. \tag{3.37}$$

In einem typischen Metall ist $k_F \approx 1\,\text{Å}^{-1}$ und damit ist $q_{\mathrm{TF}} \simeq 1\,\text{Å}^{-1}$: eine Ladung in einem Metall wird innerhalb von $\simeq 1\,\text{Å} = 10^{-10}\,\text{m}$ durch andere Elektronen abgeschirmt.

3.4 Thomas-Fermi Atom

Wir möchte Atome mit der Kernladungszahl $Z \gg 1$ untersuchen. Das Lösung des Wasserstoffproblems (mit nur einem Elektron) liefert den Radius $r_K = a_B/Z$. Dieses Resultat ist für die Beschreibung der innersten $1s$-Schale anwendbar. Der Grund ist, dass das Kernpotential dort noch „nackt“ ist und nicht schon durch die Anwesenheit anderer Elektronen abgeschirmt. Für das letzte Elektron (in der äußersten Schale) bleibt hingegen nur noch eine effektive Kernladung $Z_{\mathrm{eff}} \approx 1$ übrig. Somit hat die letzte Schale den Radius $R = a_B$ (unabhängig der Kernladungszahl). Für die Behandung der Elektronenwolke der „mittleren“ Schalen mit typischen Radius $\bar{r}$ müssen wir die Abschirmungseffekte genauer berücksichtigen. Das einfachste Model dazu ist das Thomas-Fermi Atom.

Wir wenden das Prinzip der Thomas-Fermi Abschirmung auf die Behandlung von Atomen an und starten von (3.32) mit $\rho_{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{r})/e = Z\delta^{(3)}(\boldsymbol{r})$ (auf Grund der Kernladung). Wir approximieren $V(\boldsymbol{r})$ als sphärisch symmetrisch und erhalten für $r > 0$

$$\nabla^2 V(r) = \frac{1}{r^2}\partial_r r^2 \partial_r V(r) = -\frac{4e^2}{3\pi\hbar^3}\Big[2m\big(\varepsilon_F - V(r)\big)\Big]^{3/2}. \tag{3.38}$$

Für $r \to 0$ muss die Abschirmung verschwinden und die Elektronen sollten dem „nackten“ Kernpotential mit $V(r) \sim -Ze^2/r$ ausgesetzt sein; dies liefert eine Randbedingung an (3.38). Der Atomradius R ist durch die Bedingung $n(R) = 0$ festgelegt. Daraus folgt mit (3.31) die zweite Randbedingung $V(R) = \varepsilon_F$. Für ein neutrales Atom ist $V(r > R) = \text{konst.} = 0$ und daher $\varepsilon_F = 0$; für ein geladenes Ion gilt $V(r > R) = -(Z - N)e^2/r$, mit N der Anzahl Elektronen, vgl. Abbildung 3.2.

Im Folgenden betrachten wir den neutralen Fall mit $N = Z$ und definieren die dimensionslosen Skalen x und Φ für die Länge und für die Energie (das Potential),

$$r = \left(\frac{3\pi}{4\sqrt{Z}}\right)^{2/3}\frac{a_B x}{2} = \beta\frac{a_B x}{Z^{1/3}}, \quad V(r) = -\frac{Ze^2}{r}\Phi(x) \qquad (\text{mit } \beta = 0{,}8853). \tag{3.39}$$

Das universelle Atom[6] wird dann durch ein dimensionsloses Potential $\Phi(x)$ charakte-

[6] Das Potential $\Phi(x)$ ist unabhängig von Z.

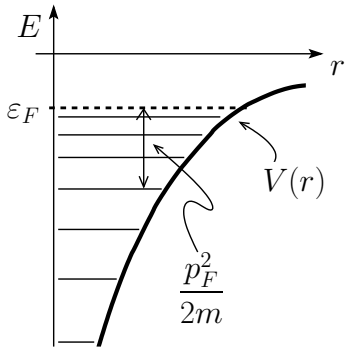


Abbildung 3.2: Potential mit gebundenen Zuständen im Thomas-Fermi Atom. Die Zustände sind bis zum Fermi-Niveau ε_F gefüllt; ihre Ladung trägt, via Abschirmung, zum effektiven Potential bei.

risiert, welches die Thomas-Fermi Gleichung

$$\sqrt{x}\,\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} = \Phi(x)^{3/2}, \qquad \Phi(0) = 1, \tag{3.40}$$

löst. Das Potential genügt der Asymptotik

$$\Phi(x) = \begin{cases} 1 - 1{,}59\,x, & x \to 0, \\ 144/x^3, & x \to \infty, \end{cases} \tag{3.41}$$

und ist ansonsten durch numerische Integration der Differentialgleichung (3.40) zu finden. Beachte, dass das Potential des universellen Thomas-Fermi Atoms bis ins Unendliche reicht da $\Phi(x)$ nur algebraisch zerfällt.

In der Tat ist die Thomas-Fermi Näherung nur für mittlere Radien (mit $r_{\min} \ll r \ll r_{\max}$) anwendbar. Die lokale Dichtenäherung setzt voraus, dass das Potential sich auf der (lokalen) Fermiwellenlänge nicht stark ändert. Dabei ist die typische Skala d der Potentialänderung gegeben durch den Abstand r, da $d \simeq V/\partial_r V \simeq r$. Auf der anderen Seite ist die Fermiwellenzahl näherungsweise gegeben durch $k_F^2 \simeq 2mV(r)/\hbar^2 \simeq Z\Phi(x)/a_B r$. Damit erhält man die Bedingung

$$1 \ll (k_F d)^2 \qquad \Leftrightarrow \qquad 1 \ll Z\,\Phi(x)\,r/a_B \tag{3.42}$$

für die Anwendbarkeit der Thomas-Fermi Näherung. Für kleine Abstände gilt $\Phi(x) \approx 1$ und damit $r_{\min} \simeq r_K = a_B/Z$. Für große Abstände verwenden wir $\Phi(x) \sim x^{-3} \simeq (a_B/r)^3/Z$ und erhalten, dass $r_{\max} \simeq R = a_B$ (unabhängig von Z). Damit gilt die Thomas-Fermi Näherung von der innersten Schale $r_K = a_B/Z$ bis zur äußeren Schale $R = a_B$. In diesem Bereich befinden sich

$$\int_{r_K \le r \le R} d^3r\, n(r) = -\frac{1}{e^2}\int_{r_K}^{R} dr\, r^2\, \nabla^2 V(\boldsymbol{r}) = \left.\frac{r^2 \partial_r V(r)}{e^2}\right|_{r=R}^{r_K}$$
$$\simeq -\frac{r_K\, V(r_K)}{e^2} \simeq Z\Phi(1) \propto Z$$

Elektronen. Damit tragen die Mehrzahl der Elektronen (bis auf die in den äußeren und inneren Schalen) zur Formierung des Thomas-Fermi Atoms bei.

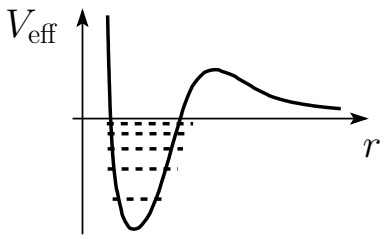


Abbildung 3.3: Effektives Potential des Thomas-Fermi Atoms inklusive der Zentrifugalbarriere. Das TF-Atom bindet einen Zustand mit Drehimpuls l wenn V_{eff} ein Minimum mit negativer Energie aufweist.

Wir finden folgende Skalierungsgesetze als Funktion von Z für das Thomas-Fermi Atom:

- Radius: $\bar{r} \simeq Z^{-1/3} a_B$, schwere Atome sind kleiner,[7]
- Potential: $V \simeq Ze^2\Phi(x)/r \simeq Z^{4/3} E_R \Phi(x)/x \propto Z^{4/3}$ bei festem $x \propto Z^{1/3} r$,
- e^--Dichte: $n \simeq \nabla^2 V/e^2 \simeq V/e^2 r^2 \simeq Z\Phi(x)/r^3 \simeq (Z^2/a_B^3)\Phi(x)/x^3 \propto Z^2$ bei festem x,
- kinetische Energie: $p^2/2m = \hbar^2 k_F^2/2m \simeq \hbar^2 n^{2/3}/m \simeq Z^{4/3} E_R$,
- Geschwindigkeit:[8] $v \simeq p/m \simeq Z^{2/3} e^2/\hbar \propto Z^{2/3}$.

Die Elektronen arrangieren sich im Thomas-Fermi Atom in Schalen. Das Thomas-Fermi Atom bindet einen Zustand mit Drehimpuls l falls das effektive Potential [inklusive Zentrifugalpotential $\hbar^2 l(l+1)/2mr^2$]

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} = \frac{Z^{2/3} e^2}{\beta\, a_B} \left[-Z^{2/3} \frac{\Phi(x)}{x} + \frac{l(l+1)}{2\beta\, x^2} \right] \tag{3.43}$$

ein lokales Minimum mit $V_{\text{eff}} < 0$ hat, vgl. Abbildung 3.3.

Mit dem TF Potential $\Phi(x)$ gemäß (3.40) findet man für das Thomas-Fermi Atom Schalen für folgende l und Z Bereiche:

	$l = 0$	$l \leq 1$	$l \leq 2$	$l \leq 3$
TF-Atom	$Z \leq 4$	$5 \leq Z \leq 19$	$20 \leq Z \leq 53$	$54 \leq Z$
	nur s	s & p	s, p & d	s, p, d & f
Experimentell		p-Elektronen	d-e^-	f-e^-
		für $Z \geq 5$	für $Z \geq 20$	für $Z \geq 58$

Schalen im Thomas-Fermi Atom

Beachte, dass wegen $V_{\text{eff}}(r) \neq Ze^2/r$ die Einteilchenenergien ε_i in der Thomas-Fermi Näherung von n und l abhängen (aber wegen der Radialsymmetrie natürlich nicht

[7] Numerisch findet man, dass 50% der Atome in einem Radius $1{,}33\, Z^{-1/3} a_B$ zu finden sind.
[8] Es gilt $e^2/\hbar = \alpha c$ mit $\alpha \approx 1/137$ der Feinstrukturkonstanten.

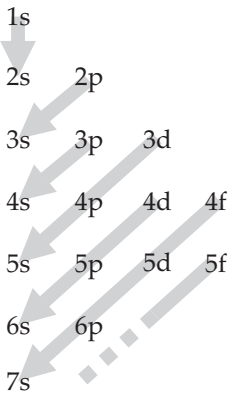


Abbildung 3.4: Sequenz der Schalen nl für die Energie des zuletzt eingebauten Elektrons im Thomas-Fermi Atom. n = Hauptquantenzahl, l = Drehimpulsquantenzahl. Beachte, dass die energetisch tiefliegenden/inneren Elektronen eine andere Sequenz (nämlich die triviale) aufweisen: Die Sequenz der sogenannten Röntgen Schalen lautet $1s$ (die 1K-Schale), $2s$, $2p$ (2L-Schale), $3s$, $3p$, $3d$ (3M-Schale), $4s$, $4p$, $4d$, $4f$ (4N-Schale), etc.

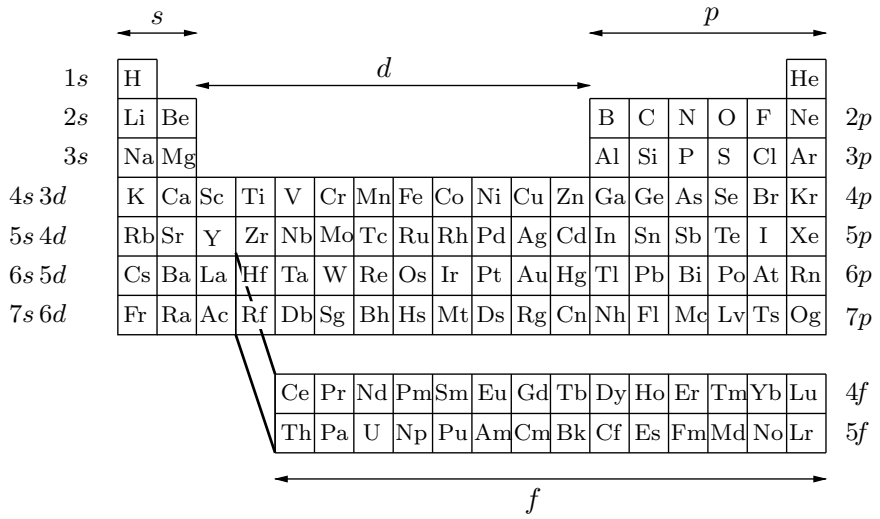


Abbildung 3.5: Periodentafel der Elemente.

von m). Insbesondere gibt es in einem Atom die Schalen nl zu Energie ϵ_{nl} mit der Entartung $(2l+1)(2s+1) = 4l+2$, das heißt

$$s\text{-Schale (ent. 2)}, \qquad p\text{- (ent. 6)}, \qquad d\text{- (ent. 10)} \quad \text{und} \quad f\text{- (ent. 14)}. \tag{3.44}$$

Die Bestimmung der Schalen Sequenz (Erhöhung von l oder von n) benötigt eine numerische Analyse. Man findet die Folge

$$\begin{aligned} 1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p \\ < 6s < 4f < 5d < 6p < 7s < 5f. \end{aligned} \tag{3.45}$$

Diese Anordnung lässt sich mit Hilfe des Schemas 3.4 einprägen. Entsprechend findet man das Periodensystem der Elemente in der Form 3.5.

Wir gehen durch die Periodentafel mit einigen Kommentaren:

- H, He: die $1s$ Schale wird aufgefüllt

- Li, Be: die $2s$ Schale, Be–Ne: die $2p$ Schale wird aufgefüllt. $2s$ und $2p$ haben verschiedene Energien, die Orbitale mit kleinem l sind näher am Kern und deshalb sind ihre Energien kleiner, $\varepsilon_{2s} < \varepsilon_{2p}$.

- Na–A: wie zuvor wird erst die $3s$, dann die $3p$ Schale gefüllt.

- K–Kr: die Energien von $4s$ sind fast gleich wie die von $3d$. Es ergibt sich die komplizierte Füllung (wir geben nur die Anzahl der Elektronen in der $4s$ Schale an):

$$\text{K } 4s^1,\ \text{Ca } 4s^2,\ \cdots,\ \text{V } 4s^2,\ \text{Cr } 4s^1,\ \text{Mn } 4s^2, \cdots,\ \text{Ni } 4s^2,\ \text{Cu } 4s^1,\ \text{Zn } 4s^2$$

  Mit Ga–Kr wird die p-Schale gefüllt. Die $3d$-Schalen sind kompakt, und daher chemisch weniger wichtig; sie liefern aber die magnetischen Momente welche den Ferro- oder Antiferro-Magnetismus der Elemente Cr–Ni erzeugt.

- Rb–Xe: im Wesentlichen eine Wiederholung der Sequenz K–Kr. Wiederum haben die s-Orbitale etwa die gleiche Energie wie die d-Orbitale der vorherigen Schale, wodurch sich die unregelmäßige Füllung

$$\text{Rb } 5s^1,\ \text{Sr } 5s^2,\ \cdots,\ \text{Zr } 5s^2,\ \text{Nb } 5s^1, \cdots,\ \text{Rh } 5s^1,\ \text{Pd } 4d^{10}\,5s^0,$$
$$\text{Ag } 4d^{10}\,5s^1,\ \text{Cd } 4d^{10}\,5s^2$$

  ergibt. Mit In–Xe wird die p-Schale gefüllt.

- Cs–Rn: Cs und Ba füllen das $6s$-Orbital. La füllt das erste $5d^1$ Orbital, dann folgen die Lanthaniden (seltene Erden) La–Lu mit dem Auffüllen der $4f$ Schale die energetisch nahe bei $5d$ liegt. Wieder gibt es Verschiebungen in den Besetzungen,

$$\text{Ce } 5d^0\,4f^2, \cdots,\ \text{Eu } 5d^0\,4f^7,\ \text{Gd } 5d^1\,4f^7,\ \text{Tb } 5d^0\,4f^9, \cdots,\ \text{Yb } 5d^0\,4f^{14}.$$

  Die kompakten f-Orbitale sind in den chemischen Bindungen passiv, ergeben aber große magnetische Momente, insbesondere im Falle von Ce, Pr, Nd, Sm–Yb. Anschließend an der Füllung der f-Schale werden die $5d$ und $6p$ Schalen gefüllt; Pt und Au zeigen wieder eine Umbesetzung mit $5s^1$.

- Fr–Rg: Fr und Ra füllen das $7s$ Orbital, Ac hat die Konfiguration $6d^1$, dann folgen die Actiniden mit dem Auffüllen des f-Orbitals. Die Energien zu $6d$ und $5f$ liegen nahe zusammen und es kommt wieder zu entsprechenden Umbesetzungen mit $6d^{0,1}$ bis Lr und $6d^{2,3}$ für Rf und Db. Es gibt keine stabilen Elemente mit gefüllten $6d$, $7p$-Orbitalen.

Für die chemischen Eigenschaften der Elemente sind die jeweils äußeren Elektronen relevant. Entsprechend haben Elemente in einer Kolonne der periodischen Tafel ähnliche chemische Eigenschaften. Zum Beispiel sind

- die Edelgase He–Rn mit ihren vollen Orbitalen sehr inert,
- die Alkali-Metalle (H), Li–Fr mit einem Elektron und
- die Halogene F–At mit einem „Loch“ sehr reaktiv.

3.5 Hundsche Regeln

Für Elektronen in teilweise gefüllten p-, d- oder f-Schalen stellt sich die Frage, wie sich die Elektronen dieser Schalen im Grundzustand anordnen. Diese Frage kann am Beispiel des Kohlenstoff-Atoms ($1s^2\,2s^2\,2p^2$) mit zwei $2p$-Elektronen illustriert werden. Die Elektronen in der p-Schale haben die 6 Zustände $\{\phi_{p_x}, \phi_{p_y}, \phi_{p_z}\} \otimes \{\chi_\uparrow, \chi_\downarrow\}$ zur Verfügung. Die beiden Elektronen können unter $\binom{6}{2} = 15$ verschiedenen Konfigurationen „auswählen“. Die Energie der Zustände wird durch den Hamiltonoperator $H = H_0 + H_{\text{WW}} + H_{\text{SO}}$ bestimmt, wobei

$$H_0 = \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{p_i^2}{2m} + V_{\text{H}}(\boldsymbol{r}_i) - \frac{Ze^2}{r_i} \right] \tag{3.46}$$

mit $V_{\text{H}}(\boldsymbol{r})$ dem effektiven Potential in der Hartree-Näherung, siehe Gl. (3.19). Auf Grund der Rotationsysmmetrie sind die $2p$ Zustände von H_0 entartet.

Die weiteren Terme spalten diese Entartung teilweise auf: Die (Rest-)Wechselwirungsenergie ist gegen durch

$$H_{\text{WW}} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|} - \sum_{i=1}^{N} V_{\text{H}}(\boldsymbol{r}_i) \tag{3.47}$$

und die (relativistische) Spin-Bahn (Russel-Saunders- oder LS-Kopplung) hat die Form

$$H_{\text{SO}} = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{l}_i \cdot \boldsymbol{s}_i \tag{3.48}$$

mit $\boldsymbol{l}_i$ und $\boldsymbol{s}_i$ dem Bahndrehimpuls und Spin des i-ten Elektrons. Zählt man diese Energien dazu, so spalten die 15 Zustände auf. Daraus ergibt sich die Frage, welches der resultierende Grundzustand und wie groß seine verbleibende Entartung ist.

Zur Lösung dieser Frage behandeln wir die Terme H_{WW} und H_{SO} in Störungstheorie. $H_0 + H_{\text{WW}}$ ist immer noch $SO(3)$-symmetrisch und spinunabhängig. Damit definieren

$\boldsymbol{L} = \sum_i \boldsymbol{l}_i$ und $\boldsymbol{S} = \sum_i \boldsymbol{s}_i$ gute Quantenzahlen.[9] Die Spin-Bahn Kopplung zerstört diese Symmetrie und $\boldsymbol{L}$, $\boldsymbol{S}$ sind einzeln nicht mehr erhalten. Deshalb geht man zum totalen Drehimpuls $\boldsymbol{J}$ über mit

$$\boldsymbol{J} = \sum_i \boldsymbol{j}_i, \qquad \boldsymbol{j}_i = \boldsymbol{l}_i + \boldsymbol{s}_i, \tag{3.49}$$

welcher immer noch erhalten ist.

3.5.1 Aufbau der Störungstheorie

Um die Aufspaltung der LS-Multipletts in der Störungstheorie zu beschreiben, müssen wir wissen, welcher der beiden Störterme $H_{\rm WW}$ und $H_{\rm SO}$ wichtiger ist. Deshalb beginnen wir mit einer groben Abschätzung der beiden Terme (jeweils pro Elektron in neutralen Atomen mit $N = Z$):[10]

$$E_{\rm WW} \simeq \frac{\langle (H_{\rm WW})^2\rangle^{1/2}}{Z} \simeq \frac{e^2}{\bar r} \simeq 0{,}1\frac{e^2}{a_B} Z^{1/3} \simeq \text{eV}\, Z^{1/3} \tag{3.50}$$

$$E_{\rm SO} \simeq \frac{\langle H_{\rm SO}\rangle}{Z} \simeq \frac{1}{2m^2c^2}\Big\langle \underbrace{\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}}_{Ze^2/\bar r^3} \underbrace{\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}}_{\hbar^2}\Big\rangle \qquad [\text{mit}\ \ \bar r = a_B/Z^{1/3}]$$

$$\simeq \underbrace{\frac{\hbar^2}{2ma_B^2}}_{\simeq \text{Ry}} \underbrace{\frac{1}{mc^2}}_{\simeq 1/\text{MeV}} \underbrace{\frac{e^2}{a_B}}_{\simeq \text{Ry}} Z^2 \simeq 10^{-3}\,\text{eV}\, Z^2. \tag{3.51}$$

Die relative Größe der beiden Korrekturen ist daher gegeben durch

$$\begin{aligned} &E_{\rm WW} > E_{\rm SO}, \quad \text{für} \quad Z < 10^{9/5} \approx 60, \\ &E_{\rm WW} < E_{\rm SO}, \quad \text{für} \quad Z > 60; \end{aligned} \tag{3.52}$$

eine genauere Abschätzung liefert den Schnittpunkt der beiden Energien bei $Z \simeq 80$ was der Atomzahl von Blei Pb entspricht. Wir diskutieren nun den Fall leichter Atome mit $E_{\rm WW} > E_{\rm SO}$.

3.5.2 Atome leichter als Pb

Wir behandeln zuerst das Problem $H_0 + H_{\rm WW}$ und betrachten dann die Spin-Bahn Kopplung $H_{\rm SO}$ als Störung. Die Strategie sieht folgendermaßen aus: Ohne $H_{\rm SO}$ sind L

[9] Beachte, dass die totale Wellenfunktion Ψ antisymmetrisch sein muss, das heißt die Mischung der Spinwellenfunktionen bewirkt, dass die individuellen Spins $\boldsymbol{s}_i$ keine guten Quantenzahlen sind. Zum Beispiel ist für $n = 2$ die Singulett-Spinfunktion $\chi_S = [|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle]\,/\sqrt{2}$ ist $S_z\chi_S = 0$ aber $s_{1z}\chi_S \not\propto \chi_S$.

[10] Es ist $\langle H_{\rm WW}\rangle = 0$, da die Einteilchenzustände die Hartree-Gleichung erfüllen. Daher ist die Wechselwirkung ein Fluktuationsterm und wir erhalten die Skalierung $\langle (H_{\rm WW})^2\rangle \simeq Z^2(e^2/\bar r)^2$ (wir haben Z^2 Terme von der Ordnung $(e^2/\bar r)^2$). Die Abschätzung des numerischen Vorfaktors erhält man aus dem He-Result mit $Z = 2$.

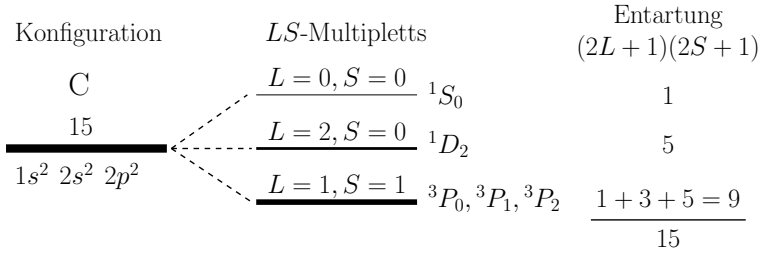


Abbildung 3.6: Konfiguration des Kohlenstoffatomes C mit Aufspaltung in LS-Multipletts und deren Entartung. Die Aufspaltung des hoch entarteten Konfigurationsniveaus involviert denjenigen Anteil der Coulombenergie der nicht bereits in den Einteilchenenergien berücksichtigt wurde.

und S noch gute Quantenzahlen und wir finden ihre durch die Konfiguration erlaubten Werte und mit dem Pauliprinzip verträglichen Kombinationen. Das hoch entartete Konfigurationsniveau wird dann durch die unterschiedliche Wechselwirkung für die verschiedenen L, S Kombinationen in die LS-Multipletts aufgespalten. Anschließend wird die weitere Aufspaltung der LS-Multipletts durch H_{SO} diskutiert was zur Feinstruktur führt. Die verbleibende $2J+1$-fache Entartung in der Feinstruktur aufgrund der $SO(3)$ Symmetrie wird schließlich durch ein Magnetfeld aufgehoben.

Die Symmetrie im Problem ist $SO(3)$. Wir kombinieren die entarteten Konfigurationszustände in Zustände mit scharfen Drehimpulsen und Spins $\boldsymbol{L}^2$, L_z, $\boldsymbol{S}^2$, S_z und finden den Zustand mit niedrigster Energie. Dieser Zustand ist noch $(2L+1)(2S+1)$-fach entartet. In unserem konkreten Beispiel des Kohlenstoffs C mit der Konfiguration $1s^2\,2s^2\,2p^2$ lassen sich die $2p$-Orbitale kombinieren in

$$L_{\max} = 2 \text{ bis } L_{\min} = 0 \qquad (\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2), \tag{3.53}$$

$$S_{\max} = 1 \text{ bis } S_{\min} = 0 \qquad (\mathcal{H}_{1/2} \otimes \mathcal{H}_{1/2} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1). \tag{3.54}$$

Das Pauliprinzip erlaubt dann die Kombinationen

$$\begin{array}{llllll} L=2 & \text{symmetrisch} & \mapsto & S=0 & \text{antisymm.} & \mapsto J=2, \\ L=0 & \text{symmetrisch} & \mapsto & S=0 & \text{antisymm.} & \mapsto J=0, \\ L=1 & \text{antisymm.} & \mapsto & S=1 & \text{symmetrisch} & \mapsto J=0,1,2; \end{array}$$

die sogenannten LS-Multipletts. Zur ihrer Charakterisierung verwendet man das sogenannte Termsymbol

$$^{2S+1}L_J. \tag{3.55}$$

Dabei ist S der Spin, L der Bahn-Drehimpuls und J der totale Drehimpuls des Atoms; letzterer kann für ein festes LS-Multiplett verschiedene Werte annehmen.

Unter H_{WW} spalten die Konfigurationszustände auf. In Abbildung 3.6 ist diese Aufspaltung am Beispiel des Kohlenstoffs C illustriert. Die Sequenz dieser Aufspaltung ist nichttrivial — die L, S, (J) Quantenzahlen für den atomaren Grundzustand werden durch die hundschen Regeln gegeben, siehe Abschnitt 3.5.4.

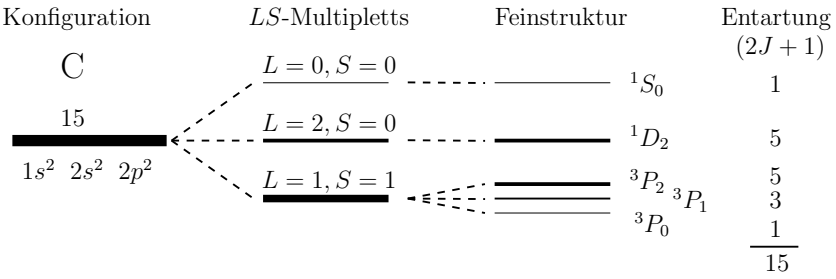


Abbildung 3.7: Konfiguration des Kohlenstoffatomes C mit Aufspaltung in LS-Multipletts und deren Feinstruktur (Aufspaltung im Bereich 10 meV). Letztere wird durch die (relativistische) Spin-Bahn Kopplung induziert welche den Bahn- und Spin-Drehimpuls mischt und somit nur noch den Gesamtdrehimpuls J als Symmetriequantenzahl respektiert.

Im nächsten Schritt betrachten wir die Spin-Bahn Kopplung $H_{\rm SO}$. $H_{\rm SO}$ koppelt $\boldsymbol{L}$ und $\boldsymbol{S}$ und nur der Gesamtdrehimpuls $\boldsymbol{J}$ verbleibt als noch als gute Quantenzahl. Daher gehen wir im $(2L+1)(2S+1)$ dimensionalen LS-Multiplett zur $\boldsymbol{J}$-Basis über (die „Quantenzahl“ K symbolisiert die nicht näher beschriebene Elektronen-Konfiguration) mit

$$|K\,L\,S\,M_L\,M_S\rangle \mapsto |K\,L\,S\,J\,M\rangle \tag{3.56}$$

Wenn wir $H_{\rm SO}$ in der LS-Multiplett Basis ausdrücken, erhalten wir[11]

$$a\sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{l}_i\cdot\boldsymbol{s}_i \mapsto A\,\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S} = \frac{A}{2}\big(\boldsymbol{J}^2-\boldsymbol{L}^2-\boldsymbol{S}^2\big) \tag{3.57}$$

$$= \frac{A}{2}\big[J(J+1)\underbrace{-L(L+1)-S(S+1)}_{\text{Konstante im } LS\text{-Multiplett}}\big] \tag{3.58}$$

wobei A von L und S abhängt. Man findet, dass A in unserem Fall positiv ist und daher $J=0$ dem tiefsten Energiezustand entspricht. Damit erhalten wir die Aufspaltung des LS-Multipletts in Niveaus separiert durch typische Energien $\simeq (\mathrm{Ry}^2/mc^2)Z^2\cdot J$ im sub-eV Bereich. Das Termschema für Kohlenstoff mit der LS-Aufspaltung und der Feinstruktur der Spin-Bahn Kopplung ist in Abbildung 3.7 skizziert.

Die verbleibende $(2J+1)$-fache Entartung kann durch ein (schwaches) Magnetfeld aufgehoben werden, siehe dazu die Diskussion im Abschnitt 3.6. Die resultierende Zeeman Aufspaltung für das Kohlenstoffatom ist in Abbildung 3.8 skizziert.

[11] Wir werden später argumentieren, dass $a\sum_i \boldsymbol{l}_i\cdot\boldsymbol{s}_i = A\,\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ ist. Ein Beweis folgt aus dem Wigner-Eckart Theorem, siehe G. Baym.

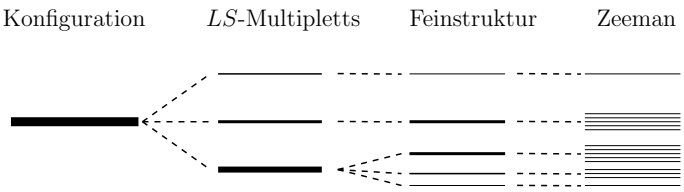


Abbildung 3.8: Konfiguration des Kohlenstoffatomes C mit Aufspaltung in LS-Multipletts, deren Feinstruktur und der Zeeman-Aufspaltung im Magnetfeld. Der zugehörige Hamiltonoperator mit den verschiedenen Aufspaltungstermen ist gegeben durch $H_0 + H_{\mathrm{WW}} + H_{\mathrm{SO}} + \mu_B \sum_i \boldsymbol{H} \cdot (\boldsymbol{l}_i + 2\boldsymbol{s}_i)/\hbar$. Zusätzlich zur Aufspaltung im externen Magnetfeld (Zeeman) erzeugt auch der Kernspin ein effektives Magnetfeld für die Elektronen, was auf die Hyperfeinstruktur führt.

3.5.3 Atome schwerer als Pb

Für schwere Atome behandeln wir zuerst $H_0 + H_{\mathrm{SO}}$ und betrachten H_{WW} als Störung. Wir kombinieren die Einteilchenorbitale $|n\,l\,m\,s\rangle = \varphi_{nlm}\chi_s = R_{nl}Y_{lm}\chi_s$ zu festem l und s in solche zu festem $\boldsymbol{j}$, $j = l \pm 1/2$, und erhalten die neuen Orbitale $|n\,l\,j\,m_j\rangle$. Die neuen Orbitale berücksichtigen die Spin-Bahn Wechselwirkung bereits auf Einteilchenniveau. Schließlich berücksichtigen wir H_{WW} indem wir Zustände zu festem Gesamtdrehimpuls $\boldsymbol{J}$ kombinieren[12] und H_{WW} in jedem dieser $(2J+1)$-dimensionalen Räume diagonalisieren, womit wir einen Grundzustand zu festen j_i^2, J^2, J_z erhalten.

Die genau Berechnung der Termschemata und des Grundzustandes ${}^{2S+1}L_J$ involviert eine komplizierte Rechnung. Andererseits lässt sich die Aufgabe der Auffindung der Grundzustandskonfigurationen (resp. des entsprechenden Termsymbols ${}^{2S+1}L_J$) für die leichten Atome leicht durch die empirischen hundschen Regeln finden.

3.5.4 Hundsche Regeln

1. Volle Schalen geben keinen Beitrag zu den Bahn-/Spin- Drehimpulsen L und S.
2. Das LS-Multiplett mit dem größten S hat die kleinste Energie.
3. Bei mehreren L mit gleichen S hat das größte L die kleinste Energie.
4. Ist die Schale weniger als halb voll oder halb voll ist

   $$J = |L - S|, \text{ d. h. minimal,}$$

   ist die Schale mehr als halb gefüllt, dann ist

   $$J = L + S, \text{ d. h. maximal.}$$

[12] Entsprechend konstruieren wir Slater-Determinanten zu festem J statt zu festen L & S.

Diese empirischen Regeln werden durch experimentelle Beobachtungen und folgende Argumente unterstützt:

1. In vollen Schalen kompensieren sich die Drehmomente zu Null und die Grundzustandskonfiguration entspricht dem Termsymbol $^1S_0$.

2. Ist der Gesamtspin S maximal, dann ist die Spinfunktion χ_{Spin} symmetrisch, die Bahnfunktion φ_{Bahn} muss aufgrund der Pauli-Prinzips antisymmetrisch sein und die Elektronen meiden sich. Entsprechend ergibt diese Konfiguration die kleinste Coulomb-Energie.

3. Ist der Bahndrehimpuls L maximal, dann sind die Radien der Elektronenbahnen groß und die Elektronendichte ist entsprechend klein, was wiederum die Coulomb-Energie minimiert.

4. Für die Spin-Bahn Kopplung betrachten wir zunächst den Fall, dass die Schale halb oder weniger als halbgefüllt ist. Dann sind alle Spins parallel, d. h. für diesen Hilbertunterraum gilt

$$a\sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{l}_i \cdot \boldsymbol{s}_i \approx a\sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{l}_i \cdot \frac{\boldsymbol{S}}{N} \approx \frac{a}{N}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S} \tag{3.59}$$

   so dass $A \approx a/N > 0$ und $J = |L - S|$ die Energie minimiert ($2S = N =$ Anzahl Elektronen in der Schale). Für mehr als halbgefüllte Schalen können wir die folgende Überlegung anwenden: Wir addieren den Beitrag der fehlenden (nicht besetzten) Spins, so dass sich formal eine vollständig gefüllte Schale ergibt, und subtrahieren diesen Beitrag anschließend wieder. Da die gefüllte Schale eine verschwindende Spin-Bahn Kopplung hat (Spin-Singulett) bleibt nur subtrahierte Term $-a\sum_i \boldsymbol{l}_i \cdot \boldsymbol{s}_i$ übrig. Nun können die Spins und Drehimpulse als „Loch"-Spin und -Drehimpuls aufgefasst werden mit $\boldsymbol{S} = -\sum_i \boldsymbol{s}_i$ und $\boldsymbol{L} = -\sum_i \boldsymbol{l}_i$. Da diese wiederum ausgerichtet sind, erhalten wir $A \approx -a/N < 0$ mit (2S = N = Anzahl fehlender Elektronen in der Schale). Damit wird natürlich $J = L + S$ der Gesamtdrehimpuls minimaler Energie.

Diese Argumente basieren auf der Betrachtungsweise für leichte Atome. Die hundschen Regeln gelten aber für alle Atome. Wir wenden sie hier für zwei Beispiele an:

Stickstoff (N) mit der der Elektronenkonfiguration $1s^2\,2s^2\,2p^3$ ($Z = 7$): Dies ist eine halbgefüllte p-Schale. (2) der maximale Spin ist $S = 3/2$ und (3) der maximale mögliche Drehimpuls ist $L = 0$ ($= 1 + 0 - 1$). Daraus ergibt sich mit der Spin-Bahn-Kopplung (4) $J = |L - S| = 3/2$. Die resultierende Konfiguration ist $^4S_{3/2}$.

Promethium (Pm) mit der Elektronenkonfiguration $[\text{Xe}]\,6s^2\,4f^5$ ($Z = 61$): Dies ist eine weniger als halbgefüllte Schale. (2) der maximale Spin ist $S = 5 \times 1/2 = 5/2$

und (3) der maximal mögliche Drehimpuls ist $L = 5$ $(= 3 + 2 + 1 + 0 - 1)$. (4) die Spin-Bahn-Kopplung ergibt $J = |L - S| = 5/2$. Die Konfiguration ist daher ${}^6H_{5/2}$.

3.6 Zeeman-Aufspaltung im Magnetfeld

Wir betrachten Atome im schwachen ($< 10^5$ Gauß) Magnetfeld $\boldsymbol{H} = (0, 0, H_z)$; den durch das Magnetfeld erzeugte Term (mit der Elementarladung $e > 0$; es ist $H_Z = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{H}$, $\boldsymbol{\mu}_L = -(e/2mc)\boldsymbol{L}$, $\boldsymbol{\mu}_S = -g_e(e/2mc)\boldsymbol{S}, g_e = 2$)

$$H_Z = \frac{e}{2mc}(\boldsymbol{L} + 2\boldsymbol{S}) \cdot \boldsymbol{H} = \frac{e}{2mc}(\boldsymbol{J} + \boldsymbol{S}) \cdot \boldsymbol{H} \tag{3.60}$$

behandeln wir in Störungstheorie. Die in der Feinstruktur verbliebene $(2J + 1)$-fache Entartung wird durch das Magnetfeld aufgehoben. Der Term proportional zu $\boldsymbol{J}$ in (3.60) gibt den Beitrag $e\hbar M H_z/2mc$ mit M der magnetischen Quantenzahl zu J_z. Es verbleibt die Berechnung von $\langle S_z\rangle = \langle K\,L\,S\,J\,M|S_z|K\,L\,S\,J\,M\rangle$. Es zeigt sich, dass $\langle S_z\rangle \propto \langle J_z\rangle = M$ ist. Das Resultat folgt direkt aus dem Wigner-Eckart Theorem (welches wir hier aber nicht einführen wollen). Für einen alternativen Beweis, verwenden wir, dass $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ mit $\boldsymbol{J}$ vertauscht, so dass die Zustände $|K\,L\,S\,J\,M\rangle$ Eigenzustände von $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ sind [das Resultat folgt unmittelbar aus $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{L}^2 - \boldsymbol{S}^2)$]. Beachte außerdem die folgende Beziehung

$$[\boldsymbol{S}, \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}] = \boldsymbol{S}(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}) - (\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S})\boldsymbol{S} \overset{13}{=} \boldsymbol{L}\times(\boldsymbol{S}\times\boldsymbol{S}) = i\hbar\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{S}, \tag{3.61}$$

wobei wir verwendet haben, dass $\boldsymbol{S}\times\boldsymbol{S} = i\hbar\boldsymbol{S}$ (Drehimpulsalgebra) und $[\boldsymbol{L}, \boldsymbol{S}] = 0$. Durch das Vektorprodukt mit $\boldsymbol{J}$ (von rechts) erhalten wir

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{S}\times\boldsymbol{J})(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}) - (\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S})(\boldsymbol{S}\times\boldsymbol{J}) = i\hbar(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{S})\times\boldsymbol{J} &\overset{14}{=} i\hbar[\overbrace{\boldsymbol{S}(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{J})}^{+\boldsymbol{S}(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J})} - \overbrace{\boldsymbol{L}(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J})}^{+\boldsymbol{S}(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J})}] \\ &= i\hbar[\boldsymbol{S}\boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{J}(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J})].\end{aligned} \tag{3.62}$$

Da $|K\,L\,S\,J\,M\rangle$ ein Eigenzustand von $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ ist, muss der Erwarungswert von (3.61) (und damit auch von (3.62)) verschwinden. Es folgt, dass

$$\underbrace{\langle\boldsymbol{S}\boldsymbol{J}^2\rangle}_{=\hbar^2 J(J+1)\langle\boldsymbol{S}\rangle} = \langle\boldsymbol{J}(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J})\rangle. \tag{3.63}$$

Mit $\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}^2 + \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{J}^2 + \boldsymbol{S}^2 - \boldsymbol{L}^2)$ erhalten wir die gewünschte Beziehung

$$\langle S_z\rangle = \langle J_z\rangle\frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}\,. \tag{3.64}$$

[13] Auf Operatoren gilt die Graßmann-Identität $\boldsymbol{a}\times(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c}) = \boldsymbol{b}(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c}) - (\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})\boldsymbol{c}$, falls $[a_j, b_k] = 0$.

[14] Hier verwenden wir die Graßmann-Identität in der Form $(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\times\boldsymbol{c} = \boldsymbol{b}(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c}) - \boldsymbol{a}(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{c})$, falls $[a_j, b_k] = 0$.

Für die Zeeman-Aufspaltung ergibt sich

$$\langle H_Z \rangle = g \frac{e\hbar}{2mc} M H_z = g\mu_B M H_z \tag{3.65}$$

mit dem gyromagnetischen Faktor g [auch Landé-g-Faktor]

$$g = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}. \tag{3.66}$$

Das elementare Moment des Atoms ist

$$g\,\mu_B = g\frac{e\hbar}{2mc}. \tag{3.67}$$

Für $S = 0$ ist $L = J$ und $g = 1$; umgekehrt ist für $L = 0$ der Gesamtimpuls durch den Spin gegeben, $J = S$ und $g = 2$, was dem g-Faktor des Elektronenspins entspricht. Beachte, dass auch $g < 1$ möglich ist; z. B. hat Promethium $g = 2/7$.[15] Das LSJ-Multiplett spaltet in $2J + 1$ Unterniveaus auf mit

$$\Delta E_Z = \mu_B g\, H_z, \tag{3.68}$$

Da der g-Faktor von den Quantenzahlen LSJ abhängt können sich im Spektrum komplizierte Linienaufspaltungen ergeben. Man unterscheidet zwischen normalem und anormalem Zeeman-Effekt, wobei der anomale Zeeman-Effekt der Normalfall ist. Beim normalen Zeeman-Effekt tritt der Spezialfall ein, dass für beide involvierten Niveaus $S = 0$ und deshalb $g = 1$ ist, also spaltet eine optische Linie dreifach auf und man findet ein „Zeeman-Triplett“. Beim anomalen Zeeman-Effekt sind die g-Faktoren der beiden Niveaus verschieden. Entsprechend resultieren kompliziertere Linienaufspaltungen. In Abbildung 3.9 sind die beiden Fälle für den Na D_1 Übergang [$^2S_{1/2}$ ($g = 2$) – $^2P_{1/2}$ ($g = 2/3$)], anomaler Zeeman-Effekt, und für den Cd Übergang $^1P_1$ ($g = 1$) – $^1D_2$ ($g = 1$), normaler Zeeman-Effekt, gezeigt.

Für starke Magnetfelder ($> 10^5$ Gauß) starten wir direkt vom LS-Multiplett da $H_Z > H_{\rm SO}$. Die Spin-Bahn Kopplung $H_{\rm SO}$ wird dann am Schluss als Störterm einbezogen. Mit der Basis $|KLSM_LM_S\rangle$ im LS-Multiplett erhalten wir sofort die Zeeman Aufspaltung

$$\langle H_Z \rangle = \frac{e\hbar}{2mc}(M_L + 2M_S)H_z. \tag{3.69}$$

Der Störterm $H_{\rm SO}$ generiert die Korrektur

$$\langle H_{\rm SO} \rangle = AM_LM_S, \tag{3.70}$$

und es resultiert die Aufspaltung

$$\langle H_Z + H_{\rm SO} \rangle \approx \mu_B(M_L + 2M_S)H_z \pm |A|M_LM_S, \tag{3.71}$$

[15] Es sind auch negative g Faktoren möglich (z. B. im Termschema $^6F_{1/2}$). Allerdings entspricht das keinem Grundzustand eines neutralen Atoms nach den hundschen Regeln.

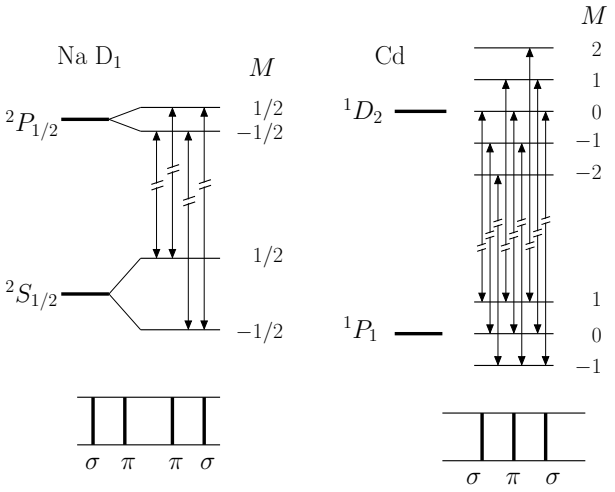


Abbildung 3.9: Anomaler und normaler Zeeman Effekt für den Na D_1 Übergang [$^2S_{1/2}$ ($g = 2$) – $^2P_{1/2}$ ($g = 2/3$)] und für den Cd [$^1P_1$ ($g = 1$) – $^1D_2$ ($g = 1$)] Übergang. Die π und σ Übergänge gehören zu den Auswahlregeln $\Delta m = 0$ und $\Delta m = \pm 1$.

wobei das obere (untere) Vorzeichen für $\leq$ ($>$) halb-gefüllte Schalen gilt. Dies ist der Paschen-Back Effekt für das Aufspalten der Niveaus im starken Magnetfeld; die Mischung der Drehimpulse $\boldsymbol{L}$ und $\boldsymbol{S}$ durch die Spin-Bahn Kopplung $H_{\rm SO}$ wird durch das starke Magnetfeld unterdrückt und beide Drehimpulse verhalten sich klassisch[16] (bis auf den $g = 2$ Faktor des Spins). Beide, normaler und anomaler Zeeman-Effekt gehen bei hohen Magnetfeldern in den Paschen-Back Effekt über. Umgekehrt resultiert der nichttriviale anomale Zeeman-Effekt bei schwachen Feldern aus der Mischung von $\boldsymbol{S}$ und $\boldsymbol{L}$ zu $\boldsymbol{J}$ durch $H_{\rm SO}$.

[16] Die Drehimpulse $\boldsymbol{L}$ und $\boldsymbol{S}$ präzessieren unabhängig voneinander im Feld.

Kapitel 4

Zweite Quantisierung

Die zweite Quantisierung ist ein neuer Formalismus der uns eine elegante und kompakte Formulierung von Vielteilchenproblemen liefert. Die zweite Quantisierung hat nichts damit zu tun, dass man ein „zweites Mal quantisiert“;[1] alle Quantenmechanik steckt bereits in der Theorie, die wir kennen, welche aus Wellenfunktionen, Schrödingergleichungen (für die Dynamik) und Symmetrisierungsbedingungen für Bosonen und Fermionen besteht. In der zweiten Quantisierung geht man allerdings von der Produktwellenfunktionsbasis in eine Besetzungsbasis über: Es wird nicht mehr festgelegt, welches Teilchen sich in welchem Zustand befindet, sondern nur noch wieviele Teilchen sich in einem bestimmten Einteilchenzustand befinden. Damit nimmt man einen Großteil der Ununterscheidbarkeit der Teilchen bereits durch die Basiswahl mit. Den Rest insbesondere die Statistik werden dann durch durch Vertauschungsrelationen der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausgedrückt.

Wie der Name schon sagt bewirken die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren die Erzeugung und Vernichtung von Teilchen. Die Theorie kann daher nicht im Hilbertraum mit einer festgelegten Teilchenzahl formuliert werden, sondern man muss in den sogenannten Fockraum gehen, der schon von der großkanonischen Beschreibung der statistischen Physik bekannt ist. Formal werden daher Prozesse möglich, welche die Teilchenzahl nicht erhalten. Der Formalismus der zweiten Quantisierung führt zu einer starken Vereinfachung, bedeutet letztlich allerdings nur eine Umformulierung des Viel-Teilchen-Problems und stellt mitnichten bereits ein fertiges Lösungskonzept dar. Ein Beispiel einer zweiten Quantisierung kennen wir bereits: Das Spektrum des harmonischen Oszillators haben wir auf zwei alternativen Wegen gefunden,

[1] Der Name ist daher etwas irreführend.

a) Konventioneller Weg → Erste Quant.

$$
\begin{aligned}
&H = p^2/2m + f\,q^2/2,\\
&\big[p, q\big] = -i\hbar;\\
&H\psi(q) = E\psi(q),\\
&E_n = \hbar\omega(n + \tfrac{1}{2}),\\
&\omega = \sqrt{f/m},\\
&\Psi_n(q) = N_n\, H_n(q) e^{-m\omega q^2/2\hbar}.
\end{aligned}
$$

b) Eleganter Weg → Operatortechnik → Zweite Quant.

$$
\begin{aligned}
&H = \hbar\omega(a^\dagger a + 1/2)\\
&\big[a, a^\dagger\big] = 1;\\
&\text{Vakuum } |0\rangle,\ a|0\rangle = 0,\\
&\text{Zustände, } |n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle,\\
&E_n = \hbar\omega(n + \tfrac{1}{2}),\\
&\Psi_n(q) = \langle q|n\rangle.
\end{aligned}
$$

Anstelle der Wellenfunktion Ψ_n haben wir die Auf- und Absteigeoperatoren $a^\dagger$ und a eingeführt und die ganze Theorie durch letztere ausgedrückt. Die „Quanten“, welche dabei durch $a^\dagger$ und a erzeugt und vernichtet werden, spielen dieselbe Rolle wie „Teilchen“.[2]

Wir werden im Folgenden zuerst die Besetzungszahldarstellung und dann den Formalismus der zweiten Quantisierung sowohl für Bosonen als auch für Fermionen einführen.

4.1 Darstellung des Problems in erster Quantisierung

In diesem Abschnitt wollen wir die Resultate von Kapitel 2 nochmals kurz zusammenfassen. Der Hamiltonoperator ist gegeben durch

$$H = \sum_{i=1}^{N} h_i + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{N} v_{ij}\,. \tag{4.1}$$

Dabei ist h_i ein Einteilchen Operator (QM) und v_{ij} beschreibt die Wechselwirkung der Teilchen i und j. Auf Grund der Ununterscheidbarkeit der Teilchen muss der Hamiltonoperator symmetrisch unter Vertauschung der Teilchen sein, siehe (2.18).

Sei $\{|\varphi_\alpha\rangle\}$ ein vONS. Dann spannen die Produktzustände $|\varphi_{\alpha_1}, \ldots, \varphi_{\alpha_N}\rangle = |\varphi_{\alpha_1}\rangle \otimes \cdots \otimes |\varphi_{\alpha_N}\rangle$ den Hilbertraum $\mathcal{H}^{\otimes N}$ der unterscheidbaren Teilchen auf. Den Hilbertraum für ununterscheidbaren Teilchen $\mathcal{H}_{\mathcal{S},\mathcal{A}}$ erhält man durch Projektion auf den jeweiligen Unterraum. Kompakt schreiben wir die Projektoren als (vgl. (2.26))

$$\mathcal{P}_\pm = \frac{1}{N!}\sum_{\pi\in S_N} \zeta^\pi \pi \tag{4.2}$$

[2] Im Allgemeinen ist die Teilchenzahl in der nichtrelativistischen Quantenmechanik erhalten. Hier kann die Teilchenzahl n jedoch durch $a^\dagger$ und a verändert werden; daher sind den Anregungen entsprechenden „Teilchen“ im Fall des harmonischen Oszillators nicht erhalten.

mit $\pi|\varphi_{\alpha_1},\dots,\varphi_{\alpha_N}\rangle = |\varphi_{\alpha_{\pi(1)}},\dots,\varphi_{\alpha_{\pi(N)}}\rangle$, d. h. π wirkt durch Vertauschung der Wellenfunktionen.[3] Für Bosonen gilt $\zeta = +1$, so dass die Zustände symmetrisiert werden, und für Fermionen gilt $\zeta = -1$, was zu anti-symmetrischen Zuständen führt.

Basiszustände in $\mathcal{H}_{\mathcal{S},\mathcal{A}}$ definieren wir dann durch

$$|\varphi_{\alpha_1},\dots,\varphi_{\alpha_N}\} = \sqrt{N!}\,\mathcal{P}_\pm|\varphi_{\alpha_1},\dots,\varphi_{\alpha_N}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\pi\in S_N}\zeta^\pi|\varphi_{\alpha_{\pi(1)}},\dots,\varphi_{\alpha_{\pi(N)}}\rangle \quad (4.3)$$

Wegen der (Anti-)Symmetrisierung gilt

$$|\dots,\varphi_{\alpha_k},\dots,\varphi_{\alpha_l},\dots\} = \zeta\,|\dots,\varphi_{\alpha_l},\dots,\varphi_{\alpha_k},\dots\} \quad (4.4)$$

für beliebige k und l. Diese Zustände sind für Bosonen nicht normiert. Wir werden den Normierungsfaktor im nächsten Abschnitt bestimmen. Für die Beweise und Herleitungen in diesem Kapitel ist es allerdings vorteilhaft ab und an mit den unnormierten (aber symmetrisierten!) Zuständen $|\cdot\}$ zu arbeiten.

4.2 Besetzungszahldarstellung und Fockraum

Analog zum Beispiel des harmonischen Oszillators wollen wir die Besetzungszahlbasis einführen. Dazu legen wir zuerst eine Reihenfolge der (orthonormierten) Einteilchenzustände fest mit $\varphi_1,\varphi_2,\dots$.[4] Ein Zustand in $\mathcal{H}_{\mathcal{S},\mathcal{A}}$ ist auf Grund der Symmetrie vollständig beschrieben durch die Angabe, wie viele Teilchen sich in den Zuständen φ_j befinden. Als Beispiel betrachten wir den $N = 10$-Teilchen Zustand[5]

$$|\underbrace{\varphi_1,\varphi_1,\varphi_1,\varphi_1,\varphi_1,\varphi_1}_{\text{6-mal}},\underbrace{\varphi_2,\varphi_2,\varphi_2,\varphi_2}_{\text{4-mal}}\}\,. \quad (4.5)$$

Dieser Zustand ist durch die Angabe n_j, wie viele Teilchen sich in den Zuständen φ_j befinden, bestimmt. Im Beispiel gilt $n_1 = 6$ und $n_2 = 4$.

Im Allgemeinen definieren wir die Besetzungszahldarstellung durch

$$|n_1,n_2,\dots\rangle = \mathcal{N}|\overbrace{\varphi_1,\dots,\varphi_1}^{n_1\text{-mal}},\overbrace{\varphi_2,\dots,\varphi_2}^{n_2\text{-mal}},\dots\} \quad (4.6)$$

mit $\sum_j n_j = N$. Beachte die Reihenfolge der Zustände auf der rechten Seite: die Zustände φ_j werden nach dem Index j geordnet. Das Pauliprinzip für Fermionen verlangt $n_j = 0,1$ während für Bosonen alle Besetzungszahlen $n_j = 0,1,\dots$ erlaubt

[3] Das entspricht einer Vertauschung der Positionen x mit der inversen Permutation π^{-1}.

[4] Wir benötigen eine diskrete und geordnete Basis, d. h. die Basisfunktionen φ_j des vONS können durch natürliche Zahlen numeriert werden. Ein typisches Beispiel sind die ebenen Wellen e^{ikx} mit $k \in (2\pi/L)\mathbb{Z}$. Wobei man am Schluss die Länge L des Systems nach unendlich gehen lässt, mit dem „üblichen“ Kontinuumslimes $\sum_k \mapsto (L/2\pi)\int dk$.

[5] Wir verwenden die (Anti-)Symmetrie um die Teilchen nach den Zuständen φ_j zu ordnen.

sind. Um den korrekten Normierungsfaktor $\mathcal{N}$ zu bestimmen, berechnen wir den Überlapp zwischen zwei Zuständen unter Nutzung der Projektor Eigenschaft $\mathcal{P}_\pm^2 = \mathcal{P}_\pm$

$$\begin{aligned}\{\varphi_{i_1}, \dots, \varphi_{i_N} | \varphi_{j_1}, \dots, \varphi_{j_N}\} &= N! \langle \varphi_{i_1}, \dots, \varphi_{i_N} | \mathcal{P}_\pm | \varphi_{j_1}, \dots, \varphi_{j_N} \rangle \\ &= \sum_{\pi \in S_N} \zeta^\pi \langle \varphi_{i_1} | \varphi_{j_{\pi(1)}} \rangle \dots \langle \varphi_{i_N} | \varphi_{j_{\pi(N)}} \rangle. \end{aligned} \tag{4.7}$$

Aufgrund der Orthonormalität von $|\varphi_j\rangle$ sind die einzigen nicht verschwindenden Terme in der Summe diejenigen, für die $(i_1, \dots, i_N)$ eine Permutation von $(j_1, \dots, j_N)$ ist. Davon gibt es $\prod_j n_j!$ (man kann die n_j-Zustände φ_j mit festem j jeweils beliebig vertauschen) und somit folgt

$$\mathcal{N} = \frac{1}{\sqrt{\prod_j n_j!}} \tag{4.8}$$

Beachte, dass für Fermionen $\mathcal{N} = 1$, unabhängig vom Zustand.

Damit kann jeder Zustand in $\mathcal{H}_{\mathcal{S},\mathcal{A}}$ geschrieben werden als

$$|\Psi\rangle = \sum_{\substack{n_1, n_2, \dots \\ \sum_i n_i = N}} c_{n_1, n_2, \dots} |n_1, n_2, \dots\rangle. \tag{4.9}$$

mit

$$\langle n_1', n_2', \dots | n_1, n_2, \dots \rangle = \delta_{n_1', n_1} \delta_{n_2', n_2} \cdots, \tag{4.10}$$

Um, analog zum harmonischen Oszillator, mit Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren arbeiten zu können, müssen wir uns von der Forderung einer festen Teilchenzahl N lösen und den Fockraum

$$\mathcal{F} = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}^{\otimes N}; \tag{4.11}$$

einführen. Der entsprechende (anti-)symmetrische Unterraum $\mathcal{F}_{\mathcal{S},\mathcal{A}}$ ist dann der korrekte Hilbertraum zur Beschreibung von Bosonen (Fermionen) in einer großkanonischen Beschreibung ohne feste Teilchenzahl. Zustände mit unterschiedlichen Teilchenzahlen sind per Konstruktion orthogonal zueinander. Die obige direkte Summe enthält den 1-dimensionalen Raum $\mathcal{H}^{\otimes 0}$ (zu $N = 0$), der nur aus dem Vakuumzustand $|0\rangle$ ohne Teilchen besteht. Die Besetzungszahlzustände spannen den Fockraum $\mathcal{F}_{\mathcal{S},\mathcal{A}}$ auf, mit der Vollständigkeitsrelation

$$\sum_{n_1, n_2, \dots} |n_1, n_2, \dots\rangle\langle n_1, n_2, \dots| = I_{\mathcal{F}_{\mathcal{S},\mathcal{A}}}. \tag{4.12}$$

4.3 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Alle Zustände im Fockraum können durch die Einführung von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren auf den Vakuumszustand zurückgeführt werden. Zu jedem

Einteilchenzustand φ_j definieren wir den Erzeugungsoperator $a_j^\dagger \colon \mathcal{H}^{\otimes N} \to \mathcal{H}^{\otimes(N+1)}$ durch seine Wirkung

$$a_j^\dagger \, |\psi_1, \dots, \psi_N\} = |\varphi_j, \psi_1, \dots, \psi_N\}. \tag{4.13}$$

auf einen (anti-)symmetrischen Produktzustand $|\psi_1, \dots, \psi_N\} = \sqrt{N!}\mathcal{P}_\pm |\psi_1, \dots, \psi_N\rangle$. Der Operator fügt ein Teilchen „im ersten Eintrag“ hinzu, wobei der Zustand dabei (anti-)symmetrisiert bleibt.

Die Wirkung von $a_j^\dagger$ in der Besetzungszahldarstellung ist damit gegeben durch

$$a_j^\dagger |n_1, \dots, n_j, \dots\rangle = \zeta^{S_j} \, \sqrt{n_j + 1} \, |n_1, \dots, n_j + 1, \dots\rangle, \qquad S_j = \sum_{i=1}^{j-1} n_i \,. \tag{4.14}$$

Der Vorfaktor $\sqrt{n_j + 1} = \sqrt{(n_j + 1)!/n_j!}$ ergibt sich aus der Normierung (4.8) der Besetungszahlzustände. Der Vorzeichenfaktor ζ^{S_j} entsteht, da der hinzugefügte Zustand φ_j am Anfang von $|\dots\}$ steht und an die richtige Position in der Besetzungszahldarstellung gebracht werden muss. Dafür muss er mit den n_1 Wellenfunktionen φ_1, den n_2 Wellenfunktionen φ_2, … und den n_{j-1} Wellenfunktionen φ_{j-1} vertauscht werden, vgl. (4.4).

Es folgt aus Gleichung (4.14), dass jeder Zustand im Fockraum durch wiederholte Anwendung von Erzeugungsoperatoren auf den Vakuumszustand $|0\rangle$ generiert werden kann[6]

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \frac{(a_1^\dagger)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \frac{(a_2^\dagger)^{n_2}}{\sqrt{n_2!}} \dots \, |0\rangle \,. \tag{4.15}$$

Gleichung (4.15) ist eine starke Aussage: Man kann den komplizieren (anti-)symmetrisierten Vielteilchenzustand (links) durch sukzessive Anwendung der linearen Erzeugungsoperatoren (rechts) auf einen einzigen Referenzzustand erzeugen (siehe Übung).

Es könnte sich nun herausstellen, dass Nebenbedingungen (insbesondere, dass $n_j = 0, 1$ für Fermionen) zu komplizierten Beziehungen zwischen den verschiedenen $a_j^\dagger$ führen. Wir werden nun zeigen, dass dies nicht der Fall ist. Betrachte die Wirkung von zwei Erzeugungsoperatoren $a_i^\dagger$ und $a_j^\dagger$ mit $i \neq j$ auf einen beliebigen Produktzustand

$$\begin{aligned} a_i^\dagger a_j^\dagger |\psi_1, \psi_2, \dots\} &= |\varphi_i, \varphi_j, \psi_1, \psi_2, \dots\} = \zeta |\varphi_j, \varphi_i, \psi_1, \psi_2, \dots\} \\ &= \zeta a_j^\dagger a_i^\dagger |\psi_1, \psi_2, \dots\} \,. \end{aligned}$$

Damit folgt $(i \neq j)$

$$\begin{aligned} [a_i^\dagger, a_j^\dagger]_+ &= [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = a_i^\dagger a_j^\dagger - a_j^\dagger a_i^\dagger = 0, \qquad \text{(Bosonen)}, \\ [a_i^\dagger, a_j^\dagger]_- &= \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = a_i^\dagger a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i^\dagger = 0, \qquad \text{(Fermionen)}. \end{aligned} \tag{4.16}$$

[6] Die Reihenfolge der Operatoren ist für Fermionen wichtig! In der hier angegebenen Form entstehen keine Vorzeichen, da wir zuerst den hintersten Zustand mit Teilchen „auffüllen“.

Damit verbleibt nur noch die Frage nach $i = j$. Für Bosonen ($\zeta = 1$) gilt natürlich $[a_j^\dagger, a_j^\dagger] = 0$ (gleiche Operatoren kommutieren). Bei Fermionen kommt das Pauliprinzip zum Tragen, welches es verbietet einen Zustand mehr als einmal zu besetzen. Dies wird durch die Operatoridentität $(a_j^\dagger)^2 = 0$ (Nilpotenz), woraus $\{a_j^\dagger, a_j^\dagger\} = 0$ folgt. Insgesamt erfüllen die Erzeugungsoperatoren damit die Algebra

$$[a_i^\dagger, a_j^\dagger]_\zeta = 0. \tag{4.17}$$

Als nächstes wenden wir uns dem adjungierten Operator $a_j = (a_j^\dagger)^\dagger$ zu. Die allgemeinen Matrixelemente von (4.14) haben die Form

$$\langle n_1, \dots, n_j, \dots | a_j^\dagger | n_1', \dots, n_j', \dots \rangle = \zeta^{S_j} \sqrt{n_j' + 1}\, \delta_{n_1, n_1'} \cdots \delta_{n_j, n_j'+1} \cdots . \tag{4.18}$$

Eine komplexe Konjugation obiger Gleichung führt auf die Beziehung

$$\langle n_1', \dots, n_j', \dots | a_j | n_1, \dots, n_j, \dots \rangle = \zeta^{S_j} \sqrt{n_j}\, \delta_{n_1', n_1} \cdots \delta_{n_j', n_j - 1} \cdots . \tag{4.19}$$

Damit gilt für den adjungierten Operator a_i

$$a_j | n_1, \dots, n_j, \dots \rangle = \zeta^{S_j} \sqrt{n_j}\, | n_1, \dots, n_j - 1, \dots \rangle. \tag{4.20}$$

Da a_i die Teilchenzahl erniedrigt, wird er Vernichtungsoperator genannt. Adjungieren von (4.17) liefert sofort $[a_i, a_j]_\zeta = 0$. Aus (4.20) erhält man die Beziehung[7]

$$a_j |0\rangle = 0, \tag{4.21}$$

welche den Vakuumszustand (eindeutig) bestimmt.

Um die Algebra abzuschließen, brauchen wir noch die (Anti-)Kommutationsrelationen zwischen a_i and $a_j^\dagger$. Dafür betrachten wir die Wirkung von a_i und $a_j^\dagger$ auf einen beliebigen Zustand in der Besetzungszahldarstellung. Für $i < j$ gilt

$$\begin{aligned} a_i a_j^\dagger | \dots, n_i, \dots, n_j, \dots \rangle =& a_i \zeta^{S_j} \sqrt{n_j + 1}\, | \dots, n_i, \dots, n_j + 1, \dots \rangle \\ =& \zeta^{S_j + S_i} \sqrt{(n_j + 1) n_i}\, | \dots, n_i - 1, \dots, n_j + 1, \dots \rangle \end{aligned}$$

und analog

$$\begin{aligned} a_j^\dagger a_i | \dots, n_i, \dots, n_j, \dots \rangle =& a_j^\dagger \zeta^{S_i} \sqrt{n_i}\, | \dots, n_i - 1, \dots, n_j, \dots \rangle \\ =& \zeta^{(S_j - 1) + S_i} \sqrt{(n_j + 1) n_i}\, | \dots, n_i - 1, \dots, n_j + 1, \dots \rangle. \end{aligned}$$

Kombiniert man diese beiden Gleichungen erhält man $(a_i a_j^\dagger - \zeta a_j^\dagger a_i) | n_1, n_2, \dots \rangle = 0$ und damit $[a_i, a_j^\dagger]_\zeta = 0$ für $i < j$. Der Beweis dieser Beziehung für $i > j$ folgt analog.

[7] Es ist wichtig den Basiszustand $|0\rangle$ im Hilbertraum ohne Teilchen (Vakuum) nicht mit der Zahl 0 zu verwechseln.

Als Letztes betrachten wir den Fall $i = j$: Für Bosonen haben wir

$$a_j a_j^\dagger |\dots, n_j, \dots\rangle = (n_j + 1)|\dots, n_j, \dots\rangle$$

während

$$a_j^\dagger a_j |\dots, n_j, \dots\rangle = n_j |\dots, n_j, \dots\rangle.$$

Aus der Differenz der beiden Gleichungen folgt $(a_j a_j^\dagger - a_j^\dagger a_j)|n_1, n_2, \dots\rangle = |n_1, n_2, \dots\rangle$ und damit $[a_j, a_j^\dagger] = 1$. Für Fermionen muss man beachten, dass $n_j = 0, 1$. Damit gilt $a_j a_j^\dagger |\dots, n_j, \dots\rangle = (1 - n_j)|\dots, n_j, \dots\rangle$, $a_j^\dagger a_j |\dots, n_j, \dots\rangle = n_j |\dots, n_j, \dots\rangle$, woraus $\{a_i^\dagger, a_i\} = 1$ folgt.

Zusammenfassend erfüllen die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren die kanonischen Vertauschungsrelationen

Bosonen:	Fermionen:
$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij},$	$\{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij},$
$[a_i, a_j] = 0,$	$\{a_i, a_j\} = 0,$
$[a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0,$	$\{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0,$

(4.22)

welche jeweils eine abgeschlossene Algebra bilden. Beachtet man dass die volle Komplexität des Fock Raumes durch wiederholtes Anwenden von $a_j^\dagger$ generiert wird, ist die Einfachheit der Vertauschungsrelationen erstaunlich.

4.4 Basiswechsel

Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren nehmen direkt Bezug auf eine Basis. Deshalb ist es wichtig zu verstehen, wie sich der Formalismus unter einem Basiswechsel verhält. Seien die Einteilchenzustände $\{|\varphi_i\rangle\}$ und $\{|\psi_j\rangle\}$ zwei vONS. Ein Wechsel zwischen den beiden Basissystemen wird in der QM durch die unitäre Basistransformation

$$\begin{aligned} |\varphi_i\rangle &= \sum_j \langle\psi_j|\varphi_i\rangle\, |\psi_j\rangle, \\ |\psi_j\rangle &= \sum_i \langle\varphi_i|\psi_j\rangle\, |\varphi_i\rangle \end{aligned} \tag{4.23}$$

beschrieben. In der Sprache der zweiten Quantisierung entspricht dieser Basiswechsel einer Transformation der Vernichtungsoperatoren a_i (zu φ_i) auf b_j (zu ψ_j). Aus der Beziehung $|\varphi_i\rangle = a_i^\dagger|0\rangle$ erhalten wir

$$a_i^\dagger|0\rangle = |\varphi_i\rangle \overset{(4.23)}{=} \sum_j \langle\psi_j|\varphi_i\rangle\, |\psi_j\rangle = \sum_j \langle\psi_j|\varphi_i\rangle\, b_j^\dagger\, |0\rangle. \tag{4.24}$$

Ein Koeffizientenvergleich führt dann auf die Transformationsregeln

$$\begin{aligned} a_i^\dagger &= \sum_j \langle \psi_j | \varphi_i \rangle b_j^\dagger, & b_j^\dagger &= \sum_i \langle \varphi_i | \psi_j \rangle a_i^\dagger, \\ a_i &= \sum_j \langle \varphi_i | \psi_j \rangle b_j, & b_j &= \sum_i \langle \psi_j | \varphi_i \rangle a_i. \end{aligned} \tag{4.25}$$

Die Vertauschungsrelationen der neuen Operatoren $b_j, b_j^\dagger$ folgen direkt aus denen von a_i, $a_i^\dagger$. Insbesondere gilt

$$[b_i, b_j]_\zeta \overset{(4.25)}{=} \sum_{k,k'} \langle \psi_i | \varphi_k \rangle \langle \psi_j | \varphi_{k'} \rangle \underbrace{[a_k, a_{k'}]_\zeta}_{=0} = 0$$

Weiterhin gilt mit der Vollständigkeit von $\{|\varphi_k\rangle\}$

$$\begin{aligned} [b_i, b_j^\dagger]_\zeta &\overset{(4.25)}{=} \sum_{k,k'} \langle \psi_i | \varphi_k \rangle \langle \varphi_{k'} | \psi_j \rangle \overbrace{[a_k, a_{k'}^\dagger]_\zeta}^{=\delta_{kk'}} \\ &= \sum_k \langle \psi_i | \varphi_k \rangle \langle \varphi_k | \psi_j \rangle = \langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij} \,. \end{aligned} \tag{4.26}$$

Damit erfüllen auch $b_j, b_j^\dagger$ die kanonischen Vertauschungsrelationen.

Als Anwendungsbeispiel der Basis Transformationen betrachten wir Fermionen auf dem Gitter. Die Operatoren $c_i^\dagger$, c_i erzeugen, bzw. vernichten ein Fermion auf dem Platz i. Andererseits erzeugen/vernichten die Operatoren $c_{\boldsymbol{k}}^\dagger$, und $c_{\boldsymbol{k}}$ ebene Wellen mit Wellenvektor $\boldsymbol{k}$. Dann ist

$$\begin{aligned} c_{\boldsymbol{k}}^\dagger &= \sum_i \langle i | \boldsymbol{k} \rangle \, c_i^\dagger = \sum_i \frac{e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_i}}{\sqrt{\Omega}} \, c_i^\dagger, \\ c_i^\dagger &= \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_i}}{\sqrt{\Omega}} \, c_{\boldsymbol{k}}^\dagger. \end{aligned} \tag{4.27}$$

Als nächstes interessiert uns der Zweiteilchenzustand $|\boldsymbol{kq}\rangle$, insbesondere seine Darstellung in der Ortsbasis auf dem Gitter, welche gegeben ist durch die Matrixelemente $\langle ij | \boldsymbol{kq} \rangle$. Dazu benutzen wir die Definitionen

$$|ij\rangle = c_i^\dagger c_j^\dagger \, |0\rangle, \qquad |\boldsymbol{kq}\rangle = c_{\boldsymbol{k}}^\dagger c_{\boldsymbol{q}}^\dagger |0\rangle, \tag{4.28}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle ij | \boldsymbol{kq} \rangle &= \langle 0 | c_j c_i c_{\boldsymbol{k}}^\dagger c_{\boldsymbol{q}}^\dagger | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{\Omega} \sum_{lm} \langle 0 | c_j c_i e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_l} c_l^\dagger e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_m} c_m^\dagger | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{\Omega} \sum_{lm} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_l} e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_m} \langle 0 | c_j c_i c_l^\dagger c_m^\dagger | 0 \rangle. \end{aligned} \tag{4.29}$$

Die Berechnung der Matrixelemente $\langle 0|c_j c_i c_l^\dagger c_m^\dagger|0\rangle$ zeigt auf, wie im zweitquantisierten Formalismus gerechnet wird: Man benutzt die Vertauschungsrelationen (4.22) und die Definition des Vakuums (4.21),

$$\begin{aligned}
\langle 0|c_j c_i c_l^\dagger c_m^\dagger|0\rangle &= \langle 0|c_j(\{c_i, c_l^\dagger\} - c_l^\dagger c_i)c_m^\dagger|0\rangle \\
&= \langle 0|c_j(\delta_{il} - c_l^\dagger c_i)c_m^\dagger|0\rangle \\
&= \delta_{il}\underbrace{\langle 0|c_j c_m^\dagger|0\rangle}_{\langle 0|\underbrace{\{c_j, c_m^\dagger\}}_{\delta_{jm}} - c_m^\dagger \underbrace{c_j|0\rangle}_{0}} - \langle 0|c_j c_l^\dagger \underbrace{c_i c_m^\dagger}_{\underbrace{\{c_i, c_m^\dagger\}}_{\delta_{im}} - c_m^\dagger c_i}|0\rangle \\
&= \delta_{il}\delta_{jm} - \langle 0|c_j c_l^\dagger(\delta_{im} - c_m^\dagger \underbrace{c_i)|0\rangle}_{0} \\
&= \delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\langle 0|\underbrace{\{c_j, c_l^\dagger\}}_{\delta_{jl}} - c_l^\dagger \underbrace{c_j|0\rangle}_{0} \\
&= \delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jl}.
\end{aligned} \tag{4.30}$$

Wir setzen das Resultat in (4.29) ein und erhalten das Zweiteilchen-Matrixelement,

$$\begin{aligned}
\langle ij|\boldsymbol{kq}\rangle &= \frac{1}{\Omega}\sum_{lm}(\delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jl})e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_l}e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_m} \\
&= \frac{1}{\Omega}\begin{vmatrix} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_i} & e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_j} \\ e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_i} & e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_j} \end{vmatrix}.
\end{aligned} \tag{4.31}$$

Also ist $\langle ij|\boldsymbol{kq}\rangle$ gerade die Slaterdeterminante zur Ebenewellen-Produktfunktion $\varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}_i)\,\varphi_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{r}_j)$. Entsprechend ist $\langle ij|\boldsymbol{kq}\rangle$ bereits korrekt antisymmetrisiert.

4.5 Operatoren in zweiter Quantisierung

In der Quantenmechanik braucht man neben den Zuständen auch Operatoren. Auch die Operatoren können kompakt im Formalismus der zweiten Quantisierung dargestellt werden. Als Einstieg führen wir eine alternative Darstellung des Vernichtungsoperators a_j (zu φ_j) ein, welche Analog zu (4.13) ist.

Zu jedem Einteilchenzustand φ_j definieren wir den Erzeugungsoperator $a_j\colon \mathcal{H}^{\otimes N} \to \mathcal{H}^{\otimes(N-1)}$ durch seine Wirkung

$$a_j|\psi_1, \ldots, \psi_N\} = \sum_{i=1}^{N} \zeta^{i-1}\langle\varphi_j|\psi_i\rangle\ |\psi_1, \ldots, \psi_{i-1}, \psi_{i+1}, \ldots, \psi_N\}. \tag{4.32}$$

auf einen beliebigen (anti-)symmetrischen Produktzustand. Hier bezeichnet $|\psi_1, \ldots, \psi_{i-1}, \psi_{i+1}, \ldots, \psi_N\}$ den Zustand in $\mathcal{H}^{\otimes(N-1)}$, welcher durch das Auslassen den i-ten Zustandes erhalten wird.

Nun zeigen wir, dass das so definierte a_j mit (4.20) übereinstimmt. Wegen der Linearität müssen wir dies nur für die Zustände $|n_1, \dots, n_j, \dots\rangle$ zeigen. Es gilt (mit $\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}$ und mit der Definition (4.32))

$$a_j|\dots, \overbrace{\varphi_j, \dots, \varphi_j}^{n_j\text{-mal}}, \dots\} = \zeta^{S_j}\, n_j|\dots, \overbrace{\varphi_j, \dots, \varphi_j}^{(n_j-1)\text{-mal}}, \dots\}\,,$$

wobei wir ausgenutzt haben, dass n_j Terme denselben Beitrag liefern.[8] Damit erhalten wir aus (4.32) die Wirkung auf die Besetzungszahlzustände

$$\begin{aligned} a_j|n_1, \dots, n_j, \dots\rangle &= \frac{1}{\sqrt{\prod_i n_i!}}\, a_j|\dots, \overbrace{\varphi_j, \dots, \varphi_j}^{n_j\text{-mal}}, \dots\} \\ &= \zeta^{S_j} \frac{1}{\sqrt{\prod_i n_i!}}\, n_j|\dots, \overbrace{\varphi_j, \dots, \varphi_j}^{(n_j-1)\text{-mal}}, \dots\} \\ &= \zeta^{S_j} \sqrt{n_j}\, |n_1, \dots, n_j - 1, \dots\rangle, \end{aligned} \tag{4.33}$$

was mit (4.20) übereinstimmt.

4.5.1 Einteilchenoperatoren

Sei $b = \sum_{\alpha,\beta} b_{\alpha\beta}|\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\beta|$ ein allgemeiner Operator auf $\mathcal{H}$ mit den Matrixelementen $b_{\alpha\beta} = \langle\varphi_\alpha|b|\varphi_\beta\rangle$.[9] Dann ist der zugehörige Einteilchenoperator B auf dem Fockraum $\mathcal{F}$ definiert als

$$B = \bigoplus_{N=0}^{\infty} B_N = 0 \oplus B_1 \oplus B_2 \oplus \dots \tag{4.34}$$

mit

$$B_1 = b, \qquad B_2 = b_1 + b_2 = b \otimes I + I \otimes b, \qquad B_N = \sum_{i=1}^{N} b_i \tag{4.35}$$

vgl. (2.4). Dieser Operator wird in der zweiten Quantisierung durch

$$B = \sum_{\alpha,\beta} b_{\alpha\beta}\, a_\alpha^\dagger a_\beta = \sum_{\alpha,\beta} \langle\varphi_\alpha|b|\varphi_\beta\rangle\, a_\alpha^\dagger a_\beta \tag{4.36}$$

ausgedrückt.

Zum Beweis zeigen wir die Darstellung $B = a_\alpha^\dagger a_\beta$ für den Operator $b = |\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\beta|$. Mit der Linearität von (4.36) in b folgt damit der allgemeine Zusammenhang. Der

[8] Bei Bosonen verschwindet der Faktor ζ^k. Bei Fermionen gilt $n_j \in \{0, 1\}$.

[9] In diesem Abschnitt verwenden wir griechische Indizes α, β für die Summen über die Basiszustände, um diese von i, der Summe über die Teilchen, zu unterscheiden.

Einteilchenoperator B wirkt auf einen allgemeinen Produktzustand $|\psi_1,\dots,\psi_N\}$ im N-Teilchen Unterraum durch[10]

$$B|\psi_1,\dots,\psi_N\} = \sqrt{N!}\mathcal{P}_\pm B_N|\psi_1,\dots,\psi_N\rangle = \sqrt{N!}\mathcal{P}_\pm \sum_{i=1}^{N}\Big(|\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\beta|\Big)_i|\psi_1,\dots,\psi_N\rangle$$
$$= \sum_{i=1}^{N}\langle\varphi_\beta|\psi_i\rangle\,|\psi_1,\dots,\psi_{i-1},\varphi_\alpha,\psi_{i+1},\dots,\psi_N\}\,. \tag{4.37}$$

Dieses Resultat ist äquivalent zu dem Ausdruck

$$a^\dagger_\alpha a_\beta|\psi_1,\dots,\psi_N\} \overset{(4.32)}{=} \sum_{i=1}^{N}\zeta^{i-1}\langle\varphi_\beta|\psi_i\rangle\, a^\dagger_\alpha|\psi_1,\dots,\psi_{i-1},\psi_{i+1},\dots,\psi_N\}$$
$$\overset{(4.13)}{=} \sum_{i=1}^{N}\zeta^{i-1}\langle\varphi_\beta|\psi_i\rangle\,|\varphi_\alpha,\psi_1,\dots,\psi_{i-1},\psi_{i+1},\dots,\psi_N\}$$
$$\overset{(4.4)}{=} \sum_{i=1}^{N}\langle\varphi_\beta|\psi_i\rangle\,|\psi_1,\dots,\psi_{i-1},\varphi_\alpha,\psi_{i+1},\dots,\psi_N\} \tag{4.38}$$

in zweiter Quantisierung für beliebiges N, was den Zusammenhang (4.36) auf dem gesamten Fockraum zeigt.

Ein wichtiger Einteilchenoperator ist die Teilchenzahl. Dies entspricht dem Operator $b = I$ mit $N = B = \sum_\alpha a^\dagger_\alpha a_\alpha$. Der Operator N wirkt im Fockraum indem es einfach N zurückgibt, d. h.

$$N = 0 \oplus 1 \oplus 2 \oplus 3 \oplus \cdots\,. \tag{4.39}$$

Falls ein Hamiltonoperator ein Einteilchenoperator ist, d. h. $H = \sum_i h_i$ nennt man ihn quadratisch. Alle Einteilchenprobleme, welche in der QM behandelt wurden, fallen in diese Kategorie. In der Vielteilchentheorie nennt quadratische Hamiltonoperatoren lösbar, da man mit der (vollständigen) Lösung des Einteilchenproblems

$$h|\psi_\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha|\psi_\alpha\rangle \tag{4.40}$$

sofort alle Vielteilchenеigenzustände bestimmen kann. Definiert man die Erzeuger- und Vernichtungsoperatoren b_α bezüglich der Energieeigenbasis (siehe Abschnitt 4.4), erhält man

$$H = \sum_\alpha \varepsilon_\alpha b^\dagger_\alpha b_\alpha\,. \tag{4.41}$$

Die Vielteicheneigenzustände mit $H|\boldsymbol{n}\rangle = E_{\boldsymbol{n}}|\boldsymbol{n}\rangle$ sind einfach Besetzungszahlzustände $|\boldsymbol{n}\rangle = |n_1, n_2, \dots\rangle$ zu den Einteilcheneigenzuständen $|\varphi_\alpha\rangle$. Die Energie der Vielteilchenzustände ist gegeben durch

$$E_{\boldsymbol{n}} = \sum_\alpha n_\alpha \varepsilon_\alpha. \tag{4.42}$$

[10] Man beachte, dass der Operator B_N mit $\mathcal{P}_\pm$ vertauscht, da er auf jeden Zustand gleich wirkt.

Die Statistik der Teilchen taucht nur über die Besetzungszahlen $n_\alpha = 0, 1, \ldots$ für Bosonen und $n_\alpha = 0, 1$ für Fermionen auf.

Vielteilchenhamiltonoperatoren sind allerdings meistens gegeben durch eine Summe eines Einteilchen und eines Zweiteilchenanteils. Dann genügt die Lösung des Einteilchenproblems nicht, um das komplette Vielteilchenproblem zu lösen. Vielmehr benutzt man die Einteilchenlösung meistens als Basis, um das Vielteilchenproblem störungstheoretisch mit dem Zweiteilchenoperator als Störoperator zu behandeln. Eine exakte Lösung des Vielteilchenproblems ist dann meist nicht möglich und der Rechenaufwand z. B. auf dem Computer wächst mit der Teilchenzahl N sogar exponentiell.

4.5.2 Zweiteilchenoperatoren

Die Matrixelemente eines allgemeinen Zweiteilchenoperators $B = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} b_{ij}$ sind gegeben durch

$$b_{\alpha_1\alpha_2,\beta_1\beta_2} = \langle \varphi_{\alpha_1}\varphi_{\alpha_2}|b|\varphi_{\beta_1}\varphi_{\beta_2}\rangle \,. \tag{4.43}$$

Seine Fockdarstellung lautet

$$B = \frac{1}{2}\sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2\\ \beta_1,\beta_2}} \langle \varphi_{\alpha_1}\varphi_{\alpha_2}|b|\varphi_{\beta_1}\varphi_{\beta_2}\rangle \, a^\dagger_{\alpha_1} a^\dagger_{\alpha_2} a_{\beta_2} a_{\beta_1} \,. \tag{4.44}$$

Wir beweisen den Zusammenhang für einen Produktoperator $b = d \otimes d$ eines Einteilchenoperators d. Der allgemeine Fall folgt wiederum durch Linearität in b. Wir bemerken, dass $B = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{N}(d\otimes d)_{ij} = \frac{1}{2}\sum_{i,j}(d\otimes d)_{ij} - \frac{1}{2}\sum_i (d^2)_i$. Weiterhin gilt

$$\sum_{i,j}(d\otimes d)_{ij} = \left(\sum_i d_i\right)\otimes\left(\sum_j d_j\right) = \left(\sum_i d_i\right)^2 . \tag{4.45}$$

Aus (4.36) kennen wir schon die Darstellung der Einteilchenoperatoren

$$\sum_i d_i = \sum_{\alpha,\beta} d_{\alpha\beta} a^\dagger_\alpha a_\beta, \quad \text{und} \quad \sum_i (d^2)_i = \sum_{\alpha,\beta}(d^2)_{\alpha\beta} a^\dagger_\alpha a_\beta \tag{4.46}$$

Insgesamt gilt

$$\begin{aligned} B &= \frac{1}{2}\left(\sum_{\alpha,\beta} d_{\alpha\beta} a^\dagger_\alpha a_\beta\right) - \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta}(d^2)_{\alpha\beta} a^\dagger_\alpha a_\beta \\ &= \frac{1}{2}\sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2\\ \beta_1,\beta_2}} d_{\alpha_1\beta_1} d_{\alpha_2\beta_2} a^\dagger_{\alpha_1} a_{\beta_1} a^\dagger_{\alpha_2} a_{\beta_2} - \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta}(d^2)_{\alpha\beta} a^\dagger_\alpha a_\beta \\ &= \frac{1}{2}\sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2\\ \beta_1,\beta_2}} d_{\alpha_1\beta_1} d_{\alpha_2\beta_2}\, a^\dagger_{\alpha_1} a^\dagger_{\alpha_2} a_{\beta_2} a_{\beta_1} \,, \end{aligned} \tag{4.47}$$

wobei wir

$$a^\dagger_{\alpha_1}\overbrace{a_{\beta_1}a^\dagger_{\alpha_2}}^{=\zeta a^\dagger_{\alpha_2}a_{\beta_1}+\delta_{\alpha_2,\beta_1}}a_{\beta_2} = \zeta a^\dagger_{\alpha_1}a^\dagger_{\alpha_2}a_{\beta_1}a_{\beta_2} + \delta_{\alpha_2,\beta_1}a^\dagger_{\alpha_1}a_{\beta_2} = a^\dagger_{\alpha_1}a^\dagger_{\alpha_2}a_{\beta_2}a_{\beta_1} + \delta_{\alpha_2,\beta_1}a^\dagger_{\alpha_1}a_{\beta_2} \quad (4.48)$$

verwendet haben. Das Resultat folgt mit mit $b_{\alpha_1\alpha_2,\beta_1\beta_2} = d_{\alpha_1\beta_1}d_{\alpha_2\beta_2}$. Man beachte hierbei insbesondere die umgekehrte Reihenfolge der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Die Teilchen werden zuerst „herausgenommen“ und dann in umgekehrter Reihenfolge wieder eingefüllt.

Die hier dargestellte Herleitung lässt sich unkompliziert auf den Fall eines ν-Teilchen Operators erweitern. Dieser hat im Allgemeinen die Form

$$B = \frac{1}{\nu!}\sum_{\substack{\alpha_1,\ldots,\alpha_\nu\\ \beta_1,\ldots,\beta_\nu}} \langle\varphi_{\alpha_1},\ldots,\varphi_{\alpha_\nu}|b|\varphi_{\beta_1},\ldots,\varphi_{\beta_\nu}\rangle\, a^\dagger_{\alpha_1}\ldots a^\dagger_{\alpha_\nu}a_{\beta_\nu}\ldots a_{\beta_1}. \quad (4.49)$$

4.6 Feldoperatoren

Durch eine Basistransformation auf die Ortsbasis $\{|\boldsymbol{r}s\rangle\}$ erhalten wir die Feldoperatoren, $\Psi_s(\boldsymbol{r})$ (s bezeichnet die Spinquantenzahl). Die Feldoperatoren sind praktisch, da sie unabhängig vom System sind und somit eine einheitliche Beschreibung ermöglichen. Sei $\{\varphi_\alpha\}$ ein beliebiges vONS im Einteilchen-Hilbertraum. Die Vollständigkeit liefert die Entwicklung

$$|\boldsymbol{r}s\rangle = \sum_\alpha |\varphi_\alpha\rangle \underbrace{\langle\varphi_\alpha|\boldsymbol{r}s\rangle}_{\varphi^*_{\alpha,s}(\boldsymbol{r})}. \quad (4.50)$$

Es ist $|\varphi_\alpha\rangle = a^\dagger_\alpha|0\rangle$ und wir definieren analog $|\boldsymbol{r}s\rangle = \Psi^\dagger_s(\boldsymbol{r})|0\rangle$, d. h. der Feldoperator $\Psi^\dagger_s(\boldsymbol{r})$ erzeugt ein Teilchen mit Spin s am Ort $\boldsymbol{r}$. Die Relation (4.50) lässt sich dann schreiben als

$$\Psi^\dagger_s(\boldsymbol{r})|0\rangle = \sum_\alpha \varphi^*_{\alpha,s}(\boldsymbol{r})\, a^\dagger_\alpha|0\rangle \quad (4.51)$$

und wir erhalten die Transformation auf die Feldoperatoren (vgl. (4.25))

$$\Psi^\dagger_s(\boldsymbol{r}) = \sum_\alpha \varphi^*_{\alpha,s}(\boldsymbol{r})\, a^\dagger_\alpha, \qquad \Psi_s(\boldsymbol{r}) = \sum_\alpha \varphi_{\alpha,s}(\boldsymbol{r})\, a_\alpha. \quad (4.52)$$

Die Notation für die sogenannten Feldoperatoren $\Psi^\dagger_s(\boldsymbol{r})$, $\Psi_s(\boldsymbol{r})$ ist dabei historisch bedingt und soll an die Wellenfunktion $\psi_s(\boldsymbol{r})$ erinnern.

Die Vertauschungsrelationen der Feldoperatoren folgen der Vollständigkeit und aus den kanonischen Relation der a_α und $a_\alpha^\dagger$ Operatoren. Der einzige nichttriviale Fall ist

$$[\Psi_s(\boldsymbol{r}), \Psi_{s'}^\dagger(\boldsymbol{r}')]_\zeta = \sum_{\alpha,\alpha'} \varphi_{\alpha,s}(\boldsymbol{r})\varphi^*_{\alpha',s'}(\boldsymbol{r}') \overbrace{[a_\alpha, a_{\alpha'}^\dagger]_\zeta}^{\delta_{\alpha,\alpha'}} = \sum_\alpha \langle \boldsymbol{r}, s|\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha|\boldsymbol{r}', s'\rangle$$
$$= \delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\delta_{ss'} \tag{4.53}$$

Für Bosonen ergibt sich damit

$$[\Psi_s(\boldsymbol{r}), \Psi_{s'}(\boldsymbol{r}')] = 0,$$
$$[\Psi_s^\dagger(\boldsymbol{r}), \Psi_{s'}^\dagger(\boldsymbol{r}')] = 0,$$
$$[\Psi_s(\boldsymbol{r}), \Psi_{s'}^\dagger(\boldsymbol{r}')] = \delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\delta_{ss'}.$$

Für Fermionen ergibt sich

$$\{\Psi_s(\boldsymbol{r}), \Psi_{s'}(\boldsymbol{r}')\} = 0, \tag{4.54}$$
$$\{\Psi_s^\dagger(\boldsymbol{r}), \Psi_{s'}^\dagger(\boldsymbol{r}')\} = 0,$$
$$\{\Psi_s(\boldsymbol{r}), \Psi_{s'}^\dagger(\boldsymbol{r}')\} = \delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\delta_{ss'}.$$

4.6.1 Die Vielteilchen-Ortsbasis

Im Folgendem unterdrücken wir den Spin Index s um die Notation einfach zu halten. Wir definieren die Zustände der Vielteilchen-Ortsbasis durch

$$|\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots, \boldsymbol{r}_N\} = \Psi^\dagger(\boldsymbol{r}_1)\Psi^\dagger(\boldsymbol{r}_2)\ldots\Psi^\dagger(\boldsymbol{r}_N)|0\rangle \tag{4.55}$$

Per Konstruktion sind die Zustände (anti-)symmetrisch beim Austausch von zwei Teilchen. $\Psi^\dagger(\boldsymbol{r})$ fügt ein Teilchen bei $\boldsymbol{r}$ hinzu, während $\Psi(\boldsymbol{r})$ ein Teilchen bei $\boldsymbol{r}$ vernichtet. Auf einen (anti-)symmetrischen Orts-Zustand ist die Wirkung der Feldoperatoren daher

$$\Psi^\dagger(\boldsymbol{r})|\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N\} = |\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N\} \tag{4.56}$$
$$\Psi(\boldsymbol{r})\,|\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N\} = \Psi(\boldsymbol{r})\Psi^\dagger(\boldsymbol{r}_1)\ldots\Psi^\dagger(\boldsymbol{r}_N)|0\rangle \tag{4.57}$$
$$= \sum_{i=1}^N \zeta^{i-1}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)|\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_{i-1}, \boldsymbol{r}_{i+1}, \ldots, \boldsymbol{r}_N\}.$$

Die Äquivalenz in der letzten Zeile folgt, indem man $\Psi(\boldsymbol{r})$ durch alle $\Psi^\dagger(\boldsymbol{r}_i)$ hindurch permutiert. Die physikalische Interpretation ist, dass das Teilchen bei $\boldsymbol{r}$ nur dann entfernt werden, wenn eine der N Koordinaten $\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N$ gleich $\boldsymbol{r}$ ist.

Den Überlapp zweier Zuständen in der Vielteilchen-Ortsbasis bestimmt man analog zu Gleichung (4.7) zu

$$\{\boldsymbol{r}'_1, \ldots, \boldsymbol{r}'_{N'}|\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N\} = \delta_{NN'} \sum_{\pi\in S_n} \zeta^\pi \delta(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}'_{\pi(1)})$$
$$\times \delta(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}'_{\pi(2)})\cdots\delta(\boldsymbol{r}_N - \boldsymbol{r}'_{\pi(N)}). \tag{4.58}$$

Die Identität auf dem Fock Raum lässt sich auch in der Vielteilchen-Ortsbasis schreiben. Dazu startet man mit Identität auf dem Hilbertraum der unterscheidbaren Teilchen und wenden den (anti-)symmetrisierer als Operator Transformation an

$$\begin{aligned} I_{\mathcal{F}} &= \sum_N \int d^3r_1 \cdots d^3r_N \, \mathcal{P}_\pm |\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N\rangle\langle \boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N| \mathcal{P}_\pm \\ &= \sum_N \frac{1}{N!} \int d^3r_1 \cdots d^3r_N |\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N\}\{\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N| \end{aligned} \tag{4.59}$$

Mit dieser Darstellung der Identität lassen sich wie üblich beliebige Zustände in der Vielteilchen-Ortsbasis entwickeln:

$$|\Phi\rangle = \sum_N \frac{1}{N!} \int d^3r_1 \cdots d^3r_N \, \varphi(\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N) |\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N\} \tag{4.60}$$

$|\Phi\rangle$ hat die korrekte Symmetrie für beliebige Wellenfunktionen $\varphi(\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N)$, auch solche die nicht (anti-)symmetrisiert sind. Das sieht man an einfachsten indem man Gleichung (4.60) für φ mit festem N betrachtet

$$\begin{aligned} \{\boldsymbol{r}'_1, \ldots, \boldsymbol{r}'_N|\Phi\rangle &\overset{(4.58)}{=} \frac{1}{N!} \int d^3r_1 \cdots d^3r_N \, \varphi(\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N)\{\boldsymbol{r}'_1, \ldots, \boldsymbol{r}'_N|\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N\} \\ &= \frac{1}{N!} \sum_\pi \zeta^\pi \varphi(\boldsymbol{r}'_{\pi(1)}, \ldots, \boldsymbol{r}'_{\pi(N)}) = \varphi(\boldsymbol{r}'_1, \ldots, \boldsymbol{r}'_N), \end{aligned}$$

Hierbei gilt die letzte Gleichung, falls φ bereits (anti-)symmetrisiert ist. Wenn φ auch noch normiert ist, also $\int d^3r_1 \cdots d^3r_N \, |\varphi(\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_N)|^2 = 1$, dann ist auch $|\Phi\rangle$ normiert, $\langle\Phi|\Phi\rangle = 1$.

4.6.2 Operatoren ausgedrückt durch Feldoperatoren

Wie bereits erwähnt eignen sich die Feldoperatoren besonders gut zur Herleitung der Darstellung diverser Operatoren in zweiter Quantisierung. Dies wollen wir in diesem Abschnitt anhand einer Reihe von wichtigen Beispielen demonstrieren. Dafür beginnen wir mit den Einteilchenoperatoren.

4.6.3 Einteilchenoperatoren

Die Darstellung eines Einteilchenoperators B in den Feldoperatoren erhalten wir aus Gleichung (4.25) indem wir die Operatoren a_α mit (4.52) durch die Feldoperatoren ausdrücken. Startend von einem Einteilchenoperator $b = \iint d^3r' d^3r \, B(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}) |\boldsymbol{r}'\rangle\langle \boldsymbol{r}|$ in der Ortsbasis, erhalten wir im allgemeinen Ausdruck des Einteilchenoperators

$$\begin{aligned} B &= \sum_{\alpha,\beta} \langle\varphi_\alpha|b|\varphi_\beta\rangle \, a^\dagger_\alpha a_\beta = \sum_{\alpha,\beta} \iint d^3r' d^3r \, \varphi^*_\alpha(\boldsymbol{r}') B(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}) \varphi_\beta(\boldsymbol{r}) a^\dagger_\alpha a_\beta \\ &= \iint d^3r' d^3r \, \Psi^\dagger(\boldsymbol{r}') B(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}) \Psi(\boldsymbol{r}). \end{aligned} \tag{4.61}$$

Interessant ist der Vergleich dieser zweitquantisierten Form mit der erstquantisierten Form des Erwartungswertes im Zustand $\varphi(\boldsymbol{r})$,

$$\langle b\rangle_\varphi = \iint d^3r' d^3r\, \varphi^*(\boldsymbol{r}')B(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})\varphi(\boldsymbol{r}). \tag{4.62}$$

Wenn man im Ausdruck von $\langle b\rangle_\varphi$ die Wellenfunktion $\varphi(\boldsymbol{r})$ durch den Feldoperator $\Psi(\boldsymbol{r})$ ersetzt, erhält man den Operator in zweitquantisierter Form! Diese formale Ähnlichkeit ist der Grund warum der Formalismus mit Erzeuger- und Vernichteroperatoren „zweite Quantisierung“ genannt wird; Einteilchenwellenfunktionen sind scheinbar Operatoren geworden welche Teilchen erzeugen und vernichten. Dies ist aber nur ein formaler Zusammenhang. Wir haben den zweitquantisierten Formalismus aus der erstquantisierten Vielteilchenquantenmechanik ohne zusätzliche Annahmen hergeleitet. Der formale Zusammenhang ist daher vielmehr ein Ausdruck der „Natürlichkeit“ der zweiten Quantisierung.

Beispiel Dichteoperator: Der Erwartungswert des Einteilchen Dichteoperators

$$\begin{aligned}\langle\rho(\boldsymbol{r})\rangle_\varphi &= \int d^3r'\, \varphi^*(\boldsymbol{r}')\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi(\boldsymbol{r}') \\ &= \varphi^*(\boldsymbol{r})\varphi(\boldsymbol{r}),\end{aligned} \tag{4.63}$$

wird nach umschreiben in zweitquantisierter Form zum Dichteoperator des Vielteilchensystems

$$\rho(\boldsymbol{r}) = \Psi^\dagger(\boldsymbol{r})\Psi(\boldsymbol{r}). \tag{4.64}$$

Der Teilchenzahloperator, welchen man in erstquantisierter Form durch Integration über die Dichte $\rho(\boldsymbol{r})$ erhält, hat in zweiter Quantisierung die Form

$$N = \int d^3r\, \Psi^\dagger(\boldsymbol{r})\Psi(\boldsymbol{r}). \tag{4.65}$$

Für Translations invariante Systeme ist es oftmals sinnvoll mit Größen im Impulsraum zu arbeiten. Dafür definieren wir die Fourier Transformation der Dichte als $\rho(\boldsymbol{q}) = \int d^3r\, e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\rho(\boldsymbol{r})$ und nutzen die Darstellung $\Psi(\boldsymbol{r}) = \Omega^{-1/2}\sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}c_{\boldsymbol{k}}$. Damit erhalten wir

$$\begin{aligned}\rho(\boldsymbol{q}) &= \int d^3r\, e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\rho(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\frac{1}{\Omega}\int d^3r\, e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}}c^\dagger_{\boldsymbol{k}}\,c_{\boldsymbol{k}'} \\ &= \sum_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{\boldsymbol{k}}c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}.\end{aligned} \tag{4.66}$$

Beispiel Stromdichteoperator: Der Ausdruck für die Stromdichte in erster Quantisierung

$$\langle \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})\rangle = \frac{\hbar}{2mi}\left[\varphi^*(\boldsymbol{r})\boldsymbol{\nabla}\varphi(\boldsymbol{r}) - \varphi(\boldsymbol{r})\boldsymbol{\nabla}\varphi^*(\boldsymbol{r})\right] \tag{4.67}$$

wird im Fockraum zum Stromdichteoperator des Vielteilchensystems

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) = \frac{\hbar}{2mi}\left[\Psi^\dagger(\boldsymbol{r})\boldsymbol{\nabla}\Psi(\boldsymbol{r}) - \big(\boldsymbol{\nabla}\Psi^\dagger(\boldsymbol{r})\big)\Psi(\boldsymbol{r})\right]. \tag{4.68}$$

Beachten Sie die Reihenfolge der Operatoren: Es muss zuerst $\Psi(\boldsymbol{r})$ ein Teilchen aus dem Zustand $|\Phi\rangle$ „entnehmen“, dann wirkt der Operator an diesem Ort, und schließlich wird das Teilchen durch $\Psi^\dagger(\boldsymbol{r})$ wieder dem System beigefügt.

Die Fourierdarstellung des Stromdichteoperators bestimmt man vollkommen analog zu der des Dichteoperators mit dem Resultat

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{q}) \;= \frac{\hbar}{2m}\sum_{\boldsymbol{k}}(2\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q})\, c^\dagger_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}. \tag{4.69}$$

Beispiel kinetische Energie: Der Erwartungswert der kinetischen Energie in erster Quantisierung

$$\langle T\rangle_\varphi = \int d^3r\, \varphi^*(\boldsymbol{r})\frac{-\hbar^2\nabla^2}{2m}\varphi(\boldsymbol{r}) = \frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r\, \boldsymbol{\nabla}\varphi^*(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}\varphi(\boldsymbol{r}),$$

führt in der zweiten Quantisierung auf den Operator der kinetischen Energie

$$T = \frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r\, \boldsymbol{\nabla}\Psi^\dagger(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}\Psi(\boldsymbol{r}). \tag{4.70}$$

Im Impulsraum erhält man das Resultat

$$T = \sum_{\boldsymbol{k}}\frac{\hbar^2k^2}{2m}c^\dagger_{\boldsymbol{k}}c_{\boldsymbol{k}} \tag{4.71}$$

Beispiel Spindichte: Die Spindichte eines Spin-1/2 Teilchen in erster Quantisierung

$$\langle \boldsymbol{s}(\boldsymbol{r})\rangle_\varphi = \frac{\hbar}{2}\sum_{s,s'}\varphi^*_s(\boldsymbol{r})\boldsymbol{\sigma}_{ss'}\varphi_{s'}(\boldsymbol{r}) \tag{4.72}$$

definiert den Vielteilchen-Spindichteoperator

$$\boldsymbol{s}(\boldsymbol{r}) = \frac{\hbar}{2}\sum_{ss'}\Psi^\dagger_s(\boldsymbol{r})\,\boldsymbol{\sigma}_{ss'}\,\Psi_{s'}(\boldsymbol{r}). \tag{4.73}$$

Zweiteilchen-Operator

Die Wechselwirkung $V(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ ist ein Zweiteilchenoperator. In zweiter Quantisierung hat es die Form

$$\begin{aligned} H_{\text{ww}} &= \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta}\langle\varphi_{\alpha_1}\varphi_{\alpha_2}|V(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)|\varphi_{\beta_1}\varphi_{\beta_2}\rangle a^\dagger_{\alpha_1}a^\dagger_{\alpha_2}a_{\beta_2}a_{\beta_1} \\ &= \frac{1}{2}\int d^3r\, d^3r'\, \Psi^\dagger(\boldsymbol{r})\Psi^\dagger(\boldsymbol{r}')V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\Psi(\boldsymbol{r}')\Psi(\boldsymbol{r}). \end{aligned} \tag{4.74}$$

Man beachte dabei die richtige Reihenfolge $\Psi(\boldsymbol{r})^\dagger\Psi(\boldsymbol{r}')^\dagger\Psi(\boldsymbol{r}')\Psi(\boldsymbol{r})$ der Operatoren. Auch hier gilt der Zusammenhang zwischen dem Erwartungwert

$$\langle\varphi_\alpha\varphi_\beta|V(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)|\varphi_\alpha\varphi_\beta\rangle = \int d^3r d^3r'\, V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')|\varphi_\alpha(\boldsymbol{r})|^2\,|\varphi_\beta(\boldsymbol{r}')|^2 \tag{4.75}$$

und dem Operator unter der Ersetzung $\varphi \mapsto \Psi$, modulo „richtige“ Ordnung der Operatoren.

Beispiel Hamiltonoperator: Der typische Hamiltonoperator wechselwirkender Teilchen mit Spin hat die Form (mit spinunabhängiger Wechselwirkung)

$$\begin{aligned} H = &\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r \sum_s \boldsymbol{\nabla}\Psi^\dagger_s(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}\Psi_s(\boldsymbol{r}) \\ &+ \frac{1}{2}\int d^3r\, d^3r' \sum_{s,s'}\Psi^\dagger_s(\boldsymbol{r})\Psi^\dagger_{s'}(\boldsymbol{r}')V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\Psi_{s'}(\boldsymbol{r}')\Psi_s(\boldsymbol{r}). \end{aligned} \tag{4.76}$$

Für ein Elektronengas ist $s = \pm 1/2$, $m = m_e$, $V(r) = e^2/r$ und $\Psi^\dagger_s(\boldsymbol{r})$, $\Psi_s(\boldsymbol{r})$ sind fermionische Feldoperatoren. Im Impulsraum hat der Hamiltoniperator die Form

$$H = \sum_{\boldsymbol{k}s}\frac{\hbar^2k^2}{2m}\,c^\dagger_{\boldsymbol{k}s}c_{\boldsymbol{k}s} + \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\boldsymbol{q}}\sum_{s's} V_{\boldsymbol{q}}\,c^\dagger_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}s}c^\dagger_{\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{q}s'}c_{\boldsymbol{k}'s'}c_{\boldsymbol{k}s}. \tag{4.77}$$

wobei $V_{\boldsymbol{q}} = 4\pi e^2/q^2$ die Fourier Transformation des Coulomb Potentials ist. Wie im erstquantisierten Bild erzeugt der Hamiltonoperator die Dynamik der Zustände, siehe später.

4.7 Korrelationen im Fermi-Gas

Wir fassen kurz die Beschreibung des Fermigases zusammen (vgl. Abschnitt 2.5.7). Auf Grund der Translationsinvarianz des Systems definieren wir Erzeugungsoperatoren

$$\langle x|c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}|0\rangle = \langle\boldsymbol{r},s|c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}|0\rangle = \varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\chi_\sigma(s) \tag{4.78}$$

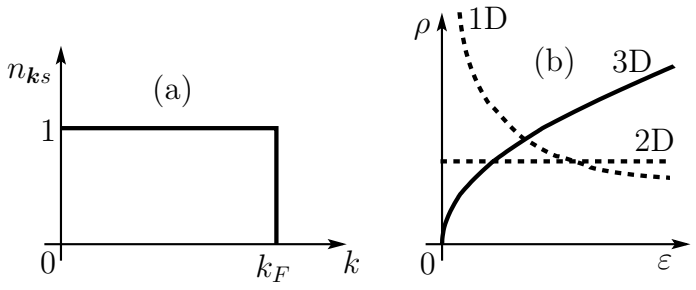


Abbildung 4.1: (a) Besetzungszahlen $n_{\boldsymbol{k}s}$ der Elektronenzustände mit Wellenvektor $\boldsymbol{k}$ und Spin s für den Fermisee. (b) Zustandsdichten $\rho(\varepsilon)$ für freie Fermionen in 3D (durchgezogene Linie) und in 2D und 1D.

zu den ebenen Wellen

$$\varphi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\chi_\sigma(s) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}}\, e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\, \delta_{\sigma s}. \tag{4.79}$$

Der Feldoperator hat dann die Form

$$\Psi_s(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\, c_{\boldsymbol{k}s}\,. \tag{4.80}$$

Der Fermisee (bei dem sind alle Zustände bis zur Fermiwellenzahl k_F gefüllt sind)

$$|\Phi_0\rangle = \prod_{\substack{k\le k_F \\ s\in\{\uparrow,\downarrow\}}} c^\dagger_{\boldsymbol{k}s}|0\rangle, \tag{4.81}$$

ist der Grundzustand zum Hamiltonoperator

$$H = \sum_{\boldsymbol{k},s} \varepsilon_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{\boldsymbol{k}s} c_{\boldsymbol{k}s} = \sum_{\boldsymbol{k},s} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} c^\dagger_{\boldsymbol{k}s} c_{\boldsymbol{k}s}. \tag{4.82}$$

bei fester Teilchendichte $n = N/\Omega$.[11] Der Fermisee ist definiert durch die Besetzungszahlen (Fermistatistik, Pauli Ausschlussprinzip, vgl. Abbildung 4.1)

$$n_{\boldsymbol{k}s} = \langle\Phi_0|c^\dagger_{\boldsymbol{k}s}c_{\boldsymbol{k}s}|\Phi_0\rangle = \begin{cases} 1, & k \le k_F, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \tag{4.83}$$

Die Parameter k_F und ε_F (Fermiwellenzahl und -energie) sind durch die Dichte n des Fermigases bestimmt mit

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}, \qquad \varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}. \tag{4.84}$$

[11] Alternative kann man auch den großkanonischen Hamiltonian $H_{\text{gk}} = H - \mu \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma}$ einführen, so dass Φ_0 mit $\epsilon_F = \mu$ der Grundzustand im ganzen Fockraum ist.

Wie schon zuvor besprochen, sind typische Werte für $k_F \simeq 1\,\text{Å}^{-1}$ (bei $n = N/\Omega \simeq 10^{23}\text{cm}^{-3}$ in Metallen) und entsprechend ist $\varepsilon_F \simeq$ eV. Die Zustandsdichte (pro Spin) $\rho(\varepsilon) = \Omega^{-1}\sum_{\boldsymbol{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\boldsymbol{k}})$ ist gegeben durch (vgl. Abbildung 4.1(b))

$$\rho(\varepsilon) = \frac{4\pi k^2}{(2\pi)^3 (d\epsilon/dk)} = \frac{m}{2\pi^2\hbar^3}\sqrt{2m\varepsilon} = \frac{3}{4}\frac{n}{\varepsilon_F}\left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F}\right)^{1/2} \tag{4.85}$$

und ihr Wert an der Fermikante ist

$$\rho_0 = \rho(\varepsilon_F) = \frac{3}{4}\frac{n}{\varepsilon_F} \quad \text{(Zustandsdichte/Spin)}, \qquad 2\rho_0 = \text{Zustandsdichte}. \tag{4.86}$$

Als Übung kann man die Zustandsdichte für das die Fermigase in einer Dimension ($\rho_{1\text{D}} \propto 1/\sqrt{\varepsilon}$) und in zwei Dimensionen ($\rho_{2\text{D}} \propto$ const.) bestimmen. Im Folgenden berechnen wir die Dichtematrix $\langle\Phi_0|\Psi_s^\dagger(\boldsymbol{r})\Psi_s(\boldsymbol{r'})|\Phi_0\rangle$ und die Paarkorrelationen $\langle\Phi_0|\Psi_s^\dagger(\boldsymbol{r})\Psi_{s'}^\dagger(\boldsymbol{r'})\Psi_{s'}(\boldsymbol{r'})\Psi_s(\boldsymbol{r})|\Phi_0\rangle$ im Fermigas.

4.7.1 Dichtematrix

Der lokale Dichteoperator für Elektronen mit Spin s ist gegeben durch $\rho_s(\boldsymbol{r}) = \Psi_s^\dagger(\boldsymbol{r})\Psi_s(\boldsymbol{r})$. Die Dichtematrix des Fermisees involviert die Verallgemeinerung auf verschiedene Positionen $\boldsymbol{r'}$ und $\boldsymbol{r'}$ (nicht-diagonaler Dichteoperator),

$$G_s(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r'}) \equiv \langle\Phi_0|\Psi_s^\dagger(\boldsymbol{r})\Psi_s(\boldsymbol{r'})|\Phi_0\rangle \tag{4.87}$$

$$= \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k'}} \frac{\exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})}{\sqrt{\Omega}}\frac{\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r'})}{\sqrt{\Omega}}\underbrace{\langle\Phi_0|c_{\boldsymbol{k}s}^\dagger c_{\boldsymbol{k'}s}|\Phi_0\rangle}_{\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k'}}n_{\boldsymbol{k}s}}. \tag{4.88}$$

Die Größe $G_s(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r'})$ ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude ein Elektron bei $\boldsymbol{r}$ aus dem System herauszunehmen und es bei $\boldsymbol{r'}$ wieder hinzuzufügen. Die Auswertung des Kronecker $\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k'}}$ Symbols und Übergang zum Kontinuum führt auf,

$$\begin{aligned} G_s(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r'}) &= \frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}} e^{-i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'})} n_{\boldsymbol{k}s} \\ &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, e^{-i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'})}\Theta(k_F - k) \\ &= \frac{1}{4\pi^2}\int_0^{k_F} dk\, k^2 \int_{-1}^{1} dz\, e^{-ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}|z} \\ &= \frac{3n}{2}\frac{\sin x - x\cos x}{x^3}\bigg|_{x=k_F|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}|} = \frac{3n}{2}\frac{j_1(k_F|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}|)}{k_F|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'}|}, \end{aligned} \tag{4.89}$$

mit der sphärischen Bessel-Funktion j_1. Das Resultat ist in Abbildung 4.2 dargestellt; die Grenzwerte $x = k_F r \to 0, \infty$ sind gegeben durch

$$\begin{aligned} &x \to 0 : (x - x^3/6 - x + x^3/2)/x^3|_{x\to 0} = 1/3 \Rightarrow G_s(0) = n/2 \\ &x \to \infty : G_s(x) \sim 3n(\cos x)/2x^2. \end{aligned} \tag{4.90}$$

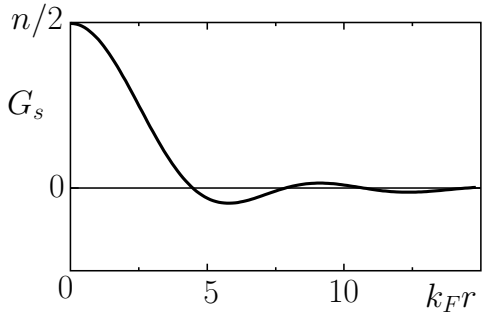


Abbildung 4.2: Dichtematrix $G_s(k_F r)$.

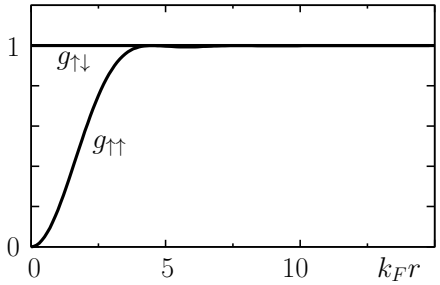


Abbildung 4.3: Paarkorrelatoren $g_{\uparrow\uparrow}(k_F r)$ (mit Austauschloch wegen des Pauliprinzips) und $g_{\uparrow\downarrow}(k_F r)$ (unkorreliert, da Spin $\uparrow$ und Spin $\downarrow$ unterscheidbar sind).

Mit $G_s(0) = n/2$ finden wir eine homogene Dichte $n = G_\uparrow(0) + G_\downarrow(0)$ der Teilchen im Fermigas.

4.8 Paar-Korrelation

Die Paar-Korrelation

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{ss'}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = \langle\Phi_0|\Psi_s^\dagger(\boldsymbol{r})\Psi_{s'}^\dagger(\boldsymbol{r}')\Psi_{s'}(\boldsymbol{r}')\Psi_s(\boldsymbol{r})|\Phi_0\rangle. \tag{4.91}$$

gibt uns die relative Wahrscheinlichkeit bei $\boldsymbol{r}', s'$ ein Elektron zu finden, wenn sich schon ein Elektron bei $\boldsymbol{r}, s$ befindet. Die Berechnung des Paarkorrelators ist eine schöne Übung im Umgang mit dem zweitquantisierten Formalismus. Wir drücken zuerst die Feldoperatoren $\Psi_s(\boldsymbol{r})$ durch die Vernichtungsoperatoren $c_{\boldsymbol{k}s}$ aus,

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{ss'}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = \frac{1}{\Omega^2}\sum_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}',\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}'} e^{-i(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{r}} e^{-i(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{q}')\cdot\boldsymbol{r}'} \langle\Phi_0|c_{\boldsymbol{p}s}^\dagger c_{\boldsymbol{q}s'}^\dagger c_{\boldsymbol{q}'s'} c_{\boldsymbol{p}'s}|\Phi_0\rangle.$$

Wir beginnen mit dem Fall $s \neq s'$: Dann muss $\boldsymbol{q}' = \boldsymbol{q}$ und $\boldsymbol{p}' = \boldsymbol{p}$ sein, da sonst der Erwartungswert $\langle\ldots\rangle = 0$ verschwindet.[12] Der Erwartungswert $\langle\ldots\rangle$ führt auf

[12] Der Erwartungswert $\langle\ldots\rangle$ verschwindet für $\boldsymbol{q}' \neq \boldsymbol{q}$ oder $\boldsymbol{p}' \neq \boldsymbol{p}$ da verschiedene Zustände in $|\Phi_0\rangle$ und in $c_{\boldsymbol{p}s}^\dagger c_{\boldsymbol{q}s'}^\dagger c_{\boldsymbol{q}'s'} c_{\boldsymbol{p}'s}|\Phi_0\rangle$ besetzt sind.

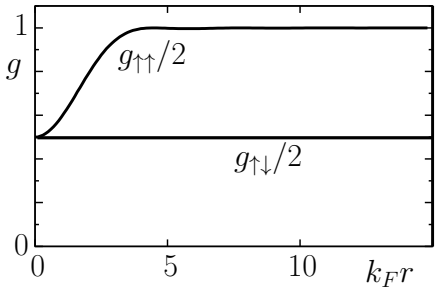


Abbildung 4.4: Paarkorrelator $g = [g_{\uparrow\uparrow} + g_{\uparrow\downarrow}]/2$ des gesamten elektronischen Systems.

$$\begin{aligned}\langle\Phi_0|c^\dagger_{\boldsymbol{p}s}c^\dagger_{\boldsymbol{q}s'}c_{\boldsymbol{q}'s'}c_{\boldsymbol{p}'s}|\Phi_0\rangle &= \delta_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}\delta_{\boldsymbol{q}\boldsymbol{q}'}\langle\Phi_0|c^\dagger_{\boldsymbol{p}s}c^\dagger_{\boldsymbol{q}s'}c_{\boldsymbol{q}s'}c_{\boldsymbol{p}s}|\Phi_0\rangle = \delta_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}\delta_{\boldsymbol{q}\boldsymbol{q}'}\langle\Phi_0|c^\dagger_{\boldsymbol{p}s}n_{\boldsymbol{q}s'}c_{\boldsymbol{p}s}|\Phi_0\rangle \\ &= \delta_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}\delta_{\boldsymbol{q}\boldsymbol{q}'}n_{\boldsymbol{p}s}n_{\boldsymbol{q}s'}, \qquad (4.92)\\ \left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{ss'}(\boldsymbol{r}) &= \frac{1}{\Omega^2}\sum_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{q}} n_{\boldsymbol{p}s}n_{\boldsymbol{q}s'} = n_s n_{s'} \overset{n_s=\frac{n}{2}}{=} \left(\frac{n}{2}\right)^2\cdot 1, \qquad (4.93)\\ \Rightarrow g_{s\neq s'}(\boldsymbol{r}) &= 1; \qquad (4.94)\end{aligned}$$

somit finden wir für $s \neq s'$ einen konstanten Wert $g_{s\neq s'}(k_F|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|) = 1$. Als Nächstes berechnen wir den Fall $s = s'$. Hier erhalten wir Beiträge für $\boldsymbol{p}' = \boldsymbol{p}$ und $\boldsymbol{q}' = \boldsymbol{q}$ oder für $\boldsymbol{p}' = \boldsymbol{q}$ und $\boldsymbol{q}' = \boldsymbol{p}$,

$$\begin{aligned}\langle\Phi_0|c^\dagger_{\boldsymbol{p}s}c^\dagger_{\boldsymbol{q}s}c_{\boldsymbol{q}'s}c_{\boldsymbol{p}'s}|\Phi_0\rangle &= \delta_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}\delta_{\boldsymbol{q}\boldsymbol{q}'}\langle\Phi_0|c^\dagger_{\boldsymbol{p}s}c^\dagger_{\boldsymbol{q}s}c_{\boldsymbol{q}s}c_{\boldsymbol{p}s}|\Phi_0\rangle + \delta_{\boldsymbol{q}\boldsymbol{p}'}\delta_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{q}'}\langle\Phi_0|c^\dagger_{\boldsymbol{p}s}c^\dagger_{\boldsymbol{q}s}\overbrace{c_{\boldsymbol{p}s}c_{\boldsymbol{q}s}}^{-c_{\boldsymbol{q}s}c_{\boldsymbol{p}s}}|\Phi_0\rangle \\ &= \left(\delta_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}\delta_{\boldsymbol{q}\boldsymbol{q}'} - \delta_{\boldsymbol{p}'\boldsymbol{q}}\delta_{\boldsymbol{q}'\boldsymbol{p}}\right) n_{\boldsymbol{p}s}n_{\boldsymbol{q}s}, \qquad (4.95)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{ss}(\boldsymbol{r}) &= \frac{1}{\Omega^2}\sum_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{q}}\left(1-e^{-i(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q})\cdot\boldsymbol{r}}\right)n_{\boldsymbol{p}s}n_{\boldsymbol{q}s} = \left(\frac{n}{2}\right)^2 - \left(\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{p}} e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}n_{\boldsymbol{p}s}\right)^2 \\ &= \left(\frac{n}{2}\right)^2 - G_s^2(\boldsymbol{r}) \qquad (4.96)\\ &\overset{x=k_F r}{=} \left(\frac{n}{2}\right)^2\left[1-\frac{9}{x^6}\left(\sin x - x\cos x\right)^2\right],\end{aligned}$$

Der Korrelator $g_{ss}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ zeigt ein Austauschloch. Zwei Fermionen mit identischem Spin meiden sich gemäß Pauli-Ausschluss Prinzip; das Austauschloch verdrängt genau ein Elektron mit Spin s aus der Umgebung eines Spin s Elektrons, da

$$\frac{n}{2}\int d^3r\left[g_{ss}(\boldsymbol{r})-1\right] = -\underbrace{\frac{2\pi n}{k_F^3}}_{2/3\pi}\underbrace{\int_0^\infty dx\, x^2\,\frac{9}{x^6}\left(\sin x - x\cos x\right)^2}_{3\pi/2} = -1 \qquad (4.97)$$

Die beiden Resultate sind in Abbildung 4.3 grafisch dargestellt. Der Paarkorrelator $g(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2}\left(g_{\uparrow\uparrow}(\boldsymbol{r}) + g_{\uparrow\downarrow}(\boldsymbol{r})\right)$ des Gesamtsystems ist in Abbildung 4.4 gezeichnet.

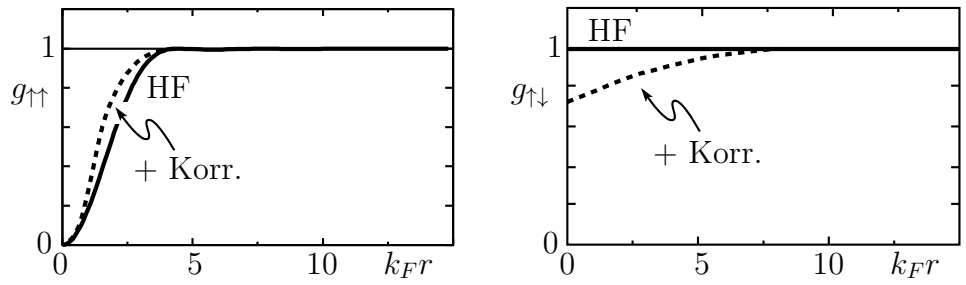


Abbildung 4.5: Korrekturen (schematisch) zu den Paarkorrelatoren $g_{\uparrow\uparrow}$ und $g_{\uparrow\downarrow}$ unter Berücksichtigung von Korrelationseffekten.

Die obigen Resultate wurden auf Hartree-Fock-Niveau berechnet: Optimale Slaterdeterminanten für das homogene Fermigas sind aus translationsinvarianten Einteilchen-Zuständen aufgebaut. Der Zustand $|\Phi_0\rangle$ ist somit gerade eine optimierte Slaterdeterminante. Nimmt man zusätzlich noch Korrelationen mit so findet man Korrekturen wie in Abbildung 4.5 schematisch dargestellt.

Man kann das Resultat auch einfach mit dem Wick-Theorem berechnen. Der Korrelator $g_{ss'}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ wird durch „Kontraktion“ der Feldoperatoren bestimmt (die Kontraktion durch entsprechende Klammern angedeutet). Für den ersten Term in (4.95)

$$\langle\Phi_0|\Psi_s^\dagger(\boldsymbol{r})\Psi_{s'}^\dagger(\boldsymbol{r}')\Psi_{s'}(\boldsymbol{r}')\Psi_s(\boldsymbol{r})|\Phi_0\rangle$$

und für den zweiten Term

$$\langle\Phi_0|\Psi_s^\dagger(\boldsymbol{r})\Psi_{s'}^\dagger(\boldsymbol{r}')\Psi_{s'}(\boldsymbol{r}')\Psi_s(\boldsymbol{r})|\Phi_0\rangle.$$

Die Kontraktionen entsprechen dabei Erwartungswerten im Grundzustand. Somit erhält man die zwei Terme[13]

$$\begin{aligned}\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{ss'}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') &= \langle\Phi_0|\Psi_s^\dagger(\boldsymbol{r})\Psi_{s'}^\dagger(\boldsymbol{r}')\Psi_{s'}(\boldsymbol{r}')\Psi_s(\boldsymbol{r})|\Phi_0\rangle \\ &= \langle\Phi_0|\Psi_s^\dagger(\boldsymbol{r})\Psi_s(\boldsymbol{r})|\Phi_0\rangle\langle\Phi_0|\Psi_{s'}^\dagger(\boldsymbol{r}')\Psi_{s'}(\boldsymbol{r}')|\Phi_0\rangle \\ &\quad - \langle\Phi_0|\Psi_s^\dagger(\boldsymbol{r})\Psi_{s'}(\boldsymbol{r}')|\Phi_0\rangle\langle\Phi_0|\Psi_{s'}^\dagger(\boldsymbol{r}')\Psi_s(\boldsymbol{r})|\Phi_0\rangle.\end{aligned} \tag{4.98}$$

Damit erhält man das Resultat direkt aus $\langle\Phi_0|\Psi_s^\dagger(\boldsymbol{r})\ \Psi_{s'}(\boldsymbol{r}')|\Phi_0\rangle = \delta_{ss'}G_s(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$. Man findet $(n/2)^2 g_{s\neq s'} = (n/2)^2 - 0$ (für $s \neq s'$) und $(n/2)^2 g_{ss} = (n/2)^2 - G_s^2$ (für $s = s'$).

Die obige Faktorisierung von $\langle\Phi_0|\Psi_s^\dagger\Psi_{s'}^\dagger\Psi_{s'}\Psi_s|\Phi_0\rangle$ ist exakt für den Grundzustand $|\Phi_0\rangle$ in Hartree-Fock-Form (d. h. für eine Slaterdeterminante). Entsprechend ist die

[13] Das Minuszeichen im 2. Term kommt von der Vertauschung der Operatoren $\Psi_{s'}^\dagger(\boldsymbol{r}')\Psi_{s'}(\boldsymbol{r}')$ damit die zwei kontrahierten Operatoren direkt nebeneinander stehen.

Faktorisierung für das nicht wechselwirkende System gültig. Berücksichtigt man die Wechselwirkung zwischen den Teilchen, so ist der Hartree-Fock-Grundzustand nur eine Näherung. Entsprechend ist der Erwartungswert $\langle\Phi|\Psi_s^\dagger\Psi_{s'}^\dagger\Psi_{s'}^\dagger\Psi_s|\Phi\rangle$ im echten Grundzustand $|\Phi\rangle$ nur näherungsweise gegeben durch

$$\langle\Phi|\Psi_s^\dagger\Psi_{s'}^\dagger\Psi_{s'}^\dagger\Psi_s|\Phi\rangle \overset{\text{in HF}}{\approx} \langle\Phi|\Psi_s^\dagger\Psi_s|\Phi\rangle\langle\Phi|\Psi_{s'}^\dagger\Psi_{s'}|\Phi\rangle - \langle\Phi|\Psi_s^\dagger\Psi_{s'}|\Phi\rangle\langle\Phi|\Psi_{s'}^\dagger\Psi_s|\Phi\rangle. \quad (4.99)$$

4.9 Bewegungsgleichung

Wie üblich in der erstquantisierten Form der Quantenmechanik können wir auch in der zweitquantisierten Form zwischen Schrödinger-, Heisenberg-, und Wechselwirkungsbild wählen. Im Heisenbergbild werden die Operatoren (und damit auch die Feldoperatoren $\Psi_s^\dagger(\boldsymbol{r})$ und $\Psi_s(\boldsymbol{r})$) zeitabhängig. Für den zeitunabhängigen Hamiltonoperator H ist das Heisenbergbild eines beliebigen Operators $A(t)$ gegeben durch

$$A_H(t) = U^\dagger A(t) U = e^{iHt/\hbar} A(t)\, e^{-iHt/\hbar} \qquad \text{(beachte } H_H(t) = H\text{)}. \quad (4.100)$$

Die Bewegungsgleichung des Operators $A_H(t)$ ist

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{dA_H(t)}{dt} &= \big[A_H(t), H\big] + i\hbar(\partial_t A)_H(t) \\ &= \big[A, H\big]_H(t) + i\hbar(\partial_t A)_H(t) \\ &\overset{\partial_t A=0}{=} \big[A, H\big]_H(t). \end{aligned} \quad (4.101)$$

Dabei gilt $(\partial_t A)_H(t) = U^\dagger \dot{A}(t) U$ und $[A, H]_H(t) = U^\dagger [A(t), H] U$.

Wir berechnen die Zeitableitung des Feldoperators $\Psi(\boldsymbol{r};t) \equiv \Psi(\boldsymbol{r})_H(t) = U^\dagger\Psi(\boldsymbol{r})U$ für einen Hamiltonoperator H der Form

$$\begin{aligned} H = &\int d^3r\, \Psi^\dagger(\boldsymbol{r})\frac{-\hbar^2\nabla^2}{2m}\Psi(\boldsymbol{r}) \\ &+ \frac{1}{2}\int d^3r\, d^3r'\, \Psi^\dagger(\boldsymbol{r})\Psi^\dagger(\boldsymbol{r}')V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\Psi(\boldsymbol{r}')\Psi(\boldsymbol{r}) \end{aligned} \quad (4.102)$$

wobei wir beim Feldoperator Ψ die Spinquantenzahlen unterdrückt haben. Aus (4.101) erhalten wir

$$i\hbar\,\frac{\partial\Psi(\boldsymbol{r};t)}{\partial t} = \Big[\Psi(\boldsymbol{r}), H\Big]_H(t), \quad (4.103)$$

$$\Big[\Psi(\boldsymbol{r}), H\Big] = \int d^3r' \Big[\Psi(\boldsymbol{r}), \Psi^\dagger(\boldsymbol{r}')\frac{-\hbar^2\nabla'^2}{2m}\Psi(\boldsymbol{r}')\Big] + \frac{1}{2}\int d^3r'\, d^3r'' V(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}'')\Big[\Psi(\boldsymbol{r}), \Psi^\dagger(\boldsymbol{r}')\Psi^\dagger(\boldsymbol{r}'')\Psi(\boldsymbol{r}'')\Psi(\boldsymbol{r}')\Big]. \quad (4.104)$$

Um die Kommutatoren $[A, BC]$ zu berechnen verwenden wir die Beziehungen

$$[A, BC] = \begin{cases} [A, B]C + B[A, C], & \text{für Bosonen,} \\ \{A, B\}C - B\{A, C\}, & \text{für Fermionen.} \end{cases} \tag{4.105}$$

Damit findet man für die Fermionen

$$[\Psi(\boldsymbol{r}), \Psi^\dagger(\boldsymbol{r}')\Psi(\boldsymbol{r}')] = \underbrace{\{\Psi(\boldsymbol{r}), \Psi^\dagger(\boldsymbol{r}')\}}_{\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\Psi(\boldsymbol{r}') - \Psi^\dagger(\boldsymbol{r}')\underbrace{\{\Psi(\boldsymbol{r}), \Psi(\boldsymbol{r}')\}}_{0}$$

$$\begin{aligned}[\Psi(\boldsymbol{r}), \Psi^\dagger(\boldsymbol{r}')\Psi^\dagger(\boldsymbol{r}'')\Psi(\boldsymbol{r}'')\Psi(\boldsymbol{r}')] &= \underbrace{\{\Psi(\boldsymbol{r}), \Psi^\dagger(\boldsymbol{r}')\}}_{\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\Psi^\dagger(\boldsymbol{r}'')\Psi(\boldsymbol{r}'')\Psi(\boldsymbol{r}') \\ &\quad - \Psi^\dagger(\boldsymbol{r}')\underbrace{\{\Psi(\boldsymbol{r}), \Psi^\dagger(\boldsymbol{r}'')\Psi(\boldsymbol{r}'')\Psi(\boldsymbol{r}')\}}_{\underbrace{\{\Psi(\boldsymbol{r}), \Psi^\dagger(\boldsymbol{r}'')\}}_{\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'')}\Psi(\boldsymbol{r}'')\Psi(\boldsymbol{r}')} \\ &= \delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\Psi^\dagger(\boldsymbol{r}'')\Psi(\boldsymbol{r}'')\Psi(\boldsymbol{r}') - \delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'')\Psi^\dagger(\boldsymbol{r}')\Psi(\boldsymbol{r}'')\Psi(\boldsymbol{r}'). \end{aligned} \tag{4.106}$$

Die Kombination von (4.104) bis (4.106) ergibt

$$\begin{aligned}[\Psi(\boldsymbol{r}), H] = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\boldsymbol{r}) + \frac{1}{2}\int d^3r' \int d^3r''\, V(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}'') \\ \times [\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\Psi^\dagger(\boldsymbol{r}'')\Psi(\boldsymbol{r}'')\Psi(\boldsymbol{r}') - \delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\Psi^\dagger(\boldsymbol{r}'')\Psi(\boldsymbol{r}')\Psi(\boldsymbol{r}'')]\end{aligned} \tag{4.107}$$

Das Vertauschen von $\Psi(\boldsymbol{r}')\Psi(\boldsymbol{r}'') = -\Psi(\boldsymbol{r}'')\Psi(\boldsymbol{r}')$ im letzten Term und Benutzung von (4.103) gibt das Endresultat

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\boldsymbol{r};t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\boldsymbol{r};t) + \left(\int d^3r'\,\Psi^\dagger(\boldsymbol{r}';t)V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\Psi(\boldsymbol{r}';t)\right)\Psi(\boldsymbol{r};t);$$

eine analoge Rechnung für Bosonen liefert dasselbe Resultat.[14] Beachten Sie, dass die Berechnung der Kommutatoren zu gleichen Zeiten $t = t'$ die Resultate

$$\begin{aligned}[\Psi(\boldsymbol{r};t), \Psi^\dagger(\boldsymbol{r}';t)]_\pm &= \delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'), \\ [\Psi(\boldsymbol{r};t), \Psi(\boldsymbol{r}';t)]_\pm &= 0, \\ [\Psi^\dagger(\boldsymbol{r};t), \Psi^\dagger(\boldsymbol{r}';t)]_\pm &= 0,\end{aligned} \tag{4.108}$$

liefert, dass aber das gleiche Problem für verschiedene Zeiten t und t' ein schwieriges Vielteilchenproblem ist

$$\left.\begin{aligned}[\Psi(\boldsymbol{r};t), \Psi^\dagger(\boldsymbol{r}';t')]_\pm \\ [\Psi(\boldsymbol{r};t), \Psi(\boldsymbol{r}';t')]_\pm \\ [\Psi^\dagger(\boldsymbol{r};t), \Psi^\dagger(\boldsymbol{r}';t')]_\pm\end{aligned}\right\} \text{„Vielteilchenproblem“}, \tag{4.109}$$

welches im Allgemeinen nicht exakt gelöst werden kann, siehe z. B. Fetter-Walecka.

[14] Der Grund dafür liegt in den Gleichungen (4.105), welche einen Kommutator zwischen dem Operator A und einem quadratischen Operator BC auf eine ähnliche Form als Funktion der „elementaren“ (Anti-)Kommutatoren führt.

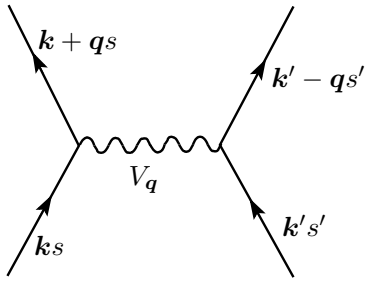


Abbildung 4.6: Wechselwirkungsvertex für den Hamiltonoperator (4.110): Die einfallenden Vektoren stehen für die Vernichtungsoperatoren $c_{\boldsymbol{k}s}$, $c_{\boldsymbol{k}'s'}$, die ausgehenden Vektoren für die Erzeuger $c^\dagger_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}s}$, $c^\dagger_{\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{q}s'}$. Das Potential $V_{\boldsymbol{q}}$ wird durch die gewellte Linie beschrieben.

Natürlich können wir auch im Impulsraum arbeiten. Der Hamiltonoperator hat die Form

$$H = \sum_{\boldsymbol{k}s} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\, c^\dagger_{\boldsymbol{k}s} c_{\boldsymbol{k}s} + \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\boldsymbol{q}s's} V_{\boldsymbol{q}}\, c^\dagger_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}s} c^\dagger_{\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{q}s'} c_{\boldsymbol{k}'s'} c_{\boldsymbol{k}s}, \tag{4.110}$$

siehe (4.77) und Abbildung 4.6. und die Bewegungsgleichung für die Operatoren $c_{\boldsymbol{k}s}(t) \equiv (c_{\boldsymbol{k}s})_H(t)$ ist (mit $V_{-\boldsymbol{q}} = V_{\boldsymbol{q}}, \varepsilon_{\boldsymbol{k}} = \hbar^2 k^2/2m$)

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dc_{\boldsymbol{k}s}(t)}{dt} &= \varepsilon_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}s}(t) + \sum_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{q}s'} V_{\boldsymbol{q}}\, c^\dagger_{\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}s'}(t)\, c_{\boldsymbol{k}'s'}(t) c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}s}(t) \\ &= \varepsilon_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}s}(t) + \sum_{\boldsymbol{q}} V_{\boldsymbol{q}}\, \rho(-\boldsymbol{q};t) c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}s}(t), \end{aligned} \tag{4.111}$$

mit dem Dichteoperator [summiert über beide Spinrichtungen, vgl. (4.66)]

$$\rho(-\boldsymbol{q}) = \sum_{\boldsymbol{k}s} c^\dagger_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}s} c_{\boldsymbol{k}s}\,. \tag{4.112}$$

Kapitel 5

Wechselwirkende Elektronensysteme

In diesem Kapitel untersuchen wir den Einfluss der Wechselwirkung auf Elektronensysteme. Wir werden sehen, wie die Wechselwirkung zwischen den Elektronen in Metallen sich in Hartree-Fock-Näherung auf die Grundzustandsenergie des Fermi Gases auswirkt und werden zudem die (dynamische) Dielekrizitätskonstante berechnen; damit kann man Abschirmung und Plasmonen in Metallen verstehen. Weiterhin werden wir den Effekt der Supraleitung einführen. Im Vordergrund steht eine Anwendung, der im letzten Kapitel eingeführten zweiten Quantisierung. Wir betrachten die Zustände nur bei $T = 0$, so dass nur der (Vielteilchen-) Grundzustand besetzt ist. Allerdings bleiben durch die Anwesenheit der intrinsischen Energieskala E_g ($E_g = \varepsilon_F$ für das Metall und $E_g = |\Delta|$ für den Supraleiter) die Resultate gültig für $T \ll E_g$.

5.1 Homogenes Elektronengas

Das homogene Elektronengas ist das einfachste Modell eines Metalls. Das System wird beschrieben durch den Hamiltonoperator wechselwirkender Elektronen, vgl. (4.76),

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r \sum_s \boldsymbol{\nabla} \Psi_s^\dagger(\boldsymbol{r}) \cdot \boldsymbol{\nabla} \Psi_s(\boldsymbol{r}) + \int d^3r \sum_s \Psi_s^\dagger(\boldsymbol{r}) V_{\text{ion}}(\boldsymbol{r}) \Psi_s(\boldsymbol{r}) \\ + \frac{1}{2} \int d^3r\, d^3r' \sum_{ss'} \Psi_s^\dagger(\boldsymbol{r}) \Psi_{s'}^\dagger(\boldsymbol{r}') V(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \Psi_{s'}(\boldsymbol{r}') \Psi_s(\boldsymbol{r}). \tag{5.1}$$

Die Elektronen wechselwirken mit der Coulomb-Wechselwirkung $V(\boldsymbol{r}) = e^2/r$ und sind eingebettet in einen Hintergrund von positiv geladenen Ionen, welche die elektrische Neutralität des Gesamtsystems garantieren und damit das Elektronsystem zusammenhalten. In Wirklichkeit bilden die Ionen ein Kristallgitter, welches zu Elektronenbändern führt. Für das homogene Elektronengas macht man die vereinfachende

Annahme, dass der positive Hintergrund homogen ausgeschmiert ist. Damit haben die Elektronen eine einfach parabolische Dispersion anstelle einer komplizierten Bandstruktur. Wie aus der Festkörpervorlesung schon bekannt, kann man die Effekte der Ionenrümpfe oft mit einer materialabhängigen effektiven Masse nährungsweise berücksichtigen. Dieses Modell wird auch Jellium Modell genannt.

5.1.1 Grundzustandsenergie

Wir berechnen die Grundzustandsenergie E_{HF} in Hartree-Fock-Näherung: Für das (homogene) Elektronengas sind die optimalen Hartree-Fock-Einteilchenwellen gerade ebene Wellen $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\chi_\sigma(s)$ und der Fermisee $|\Phi_0\rangle = \prod_{k<k_F,\sigma} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}|0\rangle$ ist der optimale Hartree-Fock-Ansatz mit der Grundzustandsenergie

$$E_{\text{HF}} = \langle\Phi_0|H|\Phi_0\rangle = \langle T\rangle_{\text{HF}} + \langle V_{\text{ion}}\rangle_{\text{HF}} + \langle V\rangle_{\text{HF}}. \tag{5.2}$$

Dabei ist die mittlere kinetischen Energie, siehe (4.83),

$$\begin{aligned}\langle T\rangle_{\text{HF}} &= \langle\Phi_0|\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\frac{\hbar^2k^2}{2m}c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}c_{\boldsymbol{k}\sigma}|\Phi_0\rangle \\ &= \underbrace{2}_{\text{Spin}}\Omega\int_0^{k_F}\frac{4\pi k^2dk}{(2\pi)^3}\frac{\hbar^2k^2}{2m} \\ &= \frac{\Omega}{\pi^2}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{5}k_F^5 = \frac{\Omega}{\pi^2}\varepsilon_F\frac{k_F^3}{5} = \frac{3}{5}\varepsilon_F N,\end{aligned} \tag{5.3}$$

gerade die Energie des Fermi-Gases mit $N = n\Omega$ und $k_F^3 = 3\pi^2 n$. Für die Wechselwirkungsenergie $\langle V\rangle_{\text{HF}}$ erhalten wir

$$\begin{aligned}\langle V\rangle_{\text{HF}} &= \frac{1}{2}\int d^3r\,d^3r'\sum_{s,s'}V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\underbrace{\langle\Phi_0|\Psi^\dagger_s(\boldsymbol{r})\Psi^\dagger_{s'}(\boldsymbol{r}')\Psi_{s'}(\boldsymbol{r}')\Psi_s(\boldsymbol{r})|\Phi_0\rangle}_{(n/2)^2 g_{ss'}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')} \\ &= \frac{1}{2}\int d^3r\,d^3r'\;V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\left[\left(\frac{n}{2}\right)^2\cdot\underbrace{2}_{s\neq s'} + \left(\frac{n}{2}\right)^2(1-g_s^2)\underbrace{2}_{s=s'}\right] \\ &= \frac{n^2}{2}\Omega\int d^3r\,V(\boldsymbol{r}) - \frac{n^2}{4}\Omega\int d^3r\,V(\boldsymbol{r})g_s(\boldsymbol{r})^2,\end{aligned} \tag{5.4}$$

mit

$$g_s(\boldsymbol{r}) = \frac{2}{n}G_s(r) = \frac{3}{x^3}(\sin x - x\cos x)\Big|_{x=k_Fr}. \tag{5.5}$$

Der erste Term in (5.4) ist die Hartree-Energie; sie berücksichtigt die Abstoßung der Elektronen. Der zweite Term hat seinen Ursprung in den Symmetrieeigenschaften

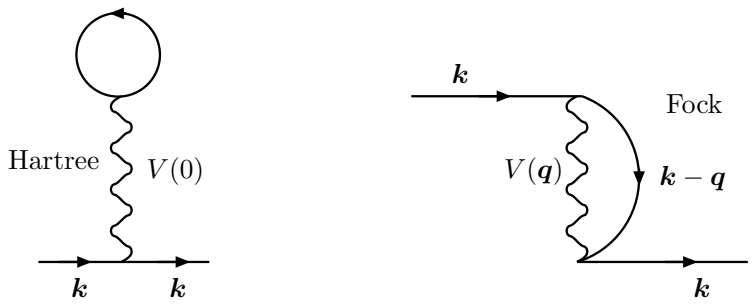


Abbildung 5.1: Feynman Diagramme für den Hartree- (links) und den Fock- (Austausch-) Term (rechts).

von $|\Phi_0\rangle$ und heißt Austausch-Energie. Die beiden Terme lassen sich durch Feynman-Diagramme visualisieren[1], siehe Abbildung 5.1.

Für die Coulomb-Wechselwirkung $V(r) = e^2/r$ ist das Wechselwirkungsintegral $\int d^3r\, V(r) = 4\pi \int dr\, r^2 e^2/r$ divergent.[2] Wir haben aber bis jetzt den positiv geladenen Hintergrund, welcher durch die Ionen erzeugt wird und die gleiche Ladungsdichte wie das Elektronengas aufweist, noch nicht berücksichtigt. Dieser liefert zusätzliche Beiträge zum Hartree-Term. Insgesamt haben wir die Hartree-Energie

$$\langle V\rangle_{\mathrm{H}} + \langle V_{\mathrm{ion}}\rangle_{\mathrm{H}} = \frac{Nn}{2}\int d^3r\,\frac{e^2}{r} + \langle V_{\mathrm{ion}}\rangle_{\mathrm{H}} = \frac{Nn}{2}\int d^3r\,\left(\frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{r} - 2\frac{e^2}{r}\right) = 0, \quad (5.6)$$

wobei der erste Term die abstoßende Elektron-Elektron Wechselwirkung, der zweite Term die (ebenfalls abstoßenden) Ion-Ion Wechselwirkung und der dritte Term die Wechselwirkung zwischen den Elektronen und den Ionen berücksichtigt. Das verschwinden des Hartree-Potentials bedeutet, dass der klassische Beitrag der Coulomb-Energie nicht zu einer metallischen Bindung (Energieabsenkung gegenübert dem Vakuum) führt. Es sind die quantenmechanischen Austauscheffekte (Fock-Term), die auf der fundamentalen Ununterscheidbarkeit der Elektronen beruhen, welche zu einer endlichen Bindungsenergie führen.

[1] Feynman Diagramme entstehen aus einer störungstheoretischen Entwicklung einer Größe (z. B. der volle Propagator (inkl. Wechselwirkung), die Energie, ...) im Wechselwirkungsterm, wobei Erwartungswerte $\langle c^\dagger c^\dagger \cdots c\rangle$ mit Hilfe des Wick-Theorems in Produkte von freien Propagatoren $\langle c^\dagger c\rangle$ zerlegt werden. Jeder freie Propagator entspricht dann einer Linie im Feynman-Diagramm, geschweifte Linien beschreiben die Wechselwirkung V, fermionische Loops (wie im Hartree-Term) tragen zusätzliche Vorzeichen, über die $\boldsymbol{k}$-Werte der inneren Linien wird integriert, usf. Hat man die Regeln zur Konstruktion von Diagrammen einmal aufgesetzt (diese Folgen jeweils aus der problem-spezifischen Entwicklung in einem kleinen Parameter) dann lässt sich für jedes Diagramm ein analytischer Ausdruck hinschreiben.

[2] Die Divergenz ist eine Konsequenz der Langreichweitigkeit der Coulomb-Wechselwirkung und führt dazu, dass das Elektronensystem inkompressibel ist; nur wenn der kompensierende (hier ionische) Hintergrund die Deformation mitmacht wird das Gesamtsystem kompressibel. Die endliche Energie der Plasmonen im Grenzfall $\boldsymbol{k} \to 0$ ist eine Konsequenz dieser Inkompressibilität. Schwingen die Ionen hingegen mit (in einer phononischen Anregung), so verschwindet die Energie der Mode für $\boldsymbol{k} \to 0$.

Der Fock-Term gibt den Beitrag

$$\langle V\rangle_{\text{HF}} = -\frac{9}{4}nN\frac{e^2}{k_F^2}4\pi \underbrace{\int_0^\infty dx\,\frac{(\sin x - x\cos x)^2}{x^5}}_{1/4}$$
$$= -\frac{3}{4\pi}Ne^2k_F \tag{5.7}$$

zur Grundzustandsenergie.

Zur Beschreibung eines Elektronengases/einer Elektronenflüssigkeit führt man üblicherweise den Seitz Radius r_s ein welcher das pro Elektron verfügbare Volumen angibt. Messen wir r_s in bohrschen Radien a_B, so erhalten wir

$$\frac{4\pi}{3}(r_s a_B)^3 = \frac{1}{n}, \qquad r_s = \frac{5{,}44}{\sqrt[3]{n_{22}}}, \tag{5.8}$$

wobei $n = n_{22}\cdot 10^{22}\,\text{cm}^{-3} = n_{22}\cdot 10\,\text{nm}^{-3}$ die Elektronendichte angibt. Für typische Metalle ist

$$n_{22} \approx \underbrace{0{,}9}_{\text{Caesium}} - \underbrace{2{,}5}_{\text{Beryllium}}\ , \tag{5.9}$$

und damit nimmt r_s Werte zwischen $r_s \approx 2-6$ an, d. h. Metalle ist weder bei hoher noch bei tiefer Dichte sondern in bei mittleren Dichten, was das Problem schwierig macht, da man keine Störungstheorie machen kann.

Für die Energie (pro Teilchen) des Elektronengases erhalten wir in der Hartree-Fock-Näherung

$$\frac{E_{\text{HF}}}{N} = \frac{3}{5}\,\varepsilon_F - \frac{3}{4\pi}e^2k_F \ \approx\ \left(\frac{2{,}21}{r_s^2} - \frac{0{,}916}{r_s}\right)\text{Ry}. \tag{5.10}$$

Beachte, dass die exakte Grundzustandsenergie $E_0/N < E_{\text{HF}}/N$ ist, da $|\Phi_0\rangle$ ein Rayleigh-Ritz Ansatz für den echten Grundzustand $|\Phi\rangle$ ist.

Das Resultat (5.10) ist korrekt für hohe Dichten und entsprechend kleinen Radien r_s. Nicht berücksichtigt in (5.10) sind die Korrelationsenergien. Sie werden durch diagrammatische Techniken berechnet und man findet für $r_s < 2{,}5$ die Entwicklung

$$\frac{E_0}{N\,\text{Ry}} \approx \underbrace{\frac{2{,}21}{r_s^2} - \frac{0{,}916}{r_s}}_{E_{\text{HF}}/N\,\text{Ry}} \underbrace{+0{,}0622\,\ln r_s - 0{,}094 + 0{,}018\,r_s\ln r_s + \cdots}_{E_{\text{korr}}/N\,\text{Ry}<0}\ . \tag{5.11}$$

Beachte, dass das Resultat (5.11) $r_s \to 0$ nicht analytisch ist.

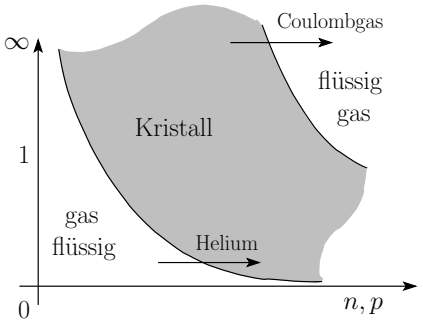


Abbildung 5.2: Phasen in einem System mit (abgeschirmter) Coulomb-Wechselwirkung; λ = Reichweite, n = Dichte, p = Druck, dimensionsloser Parameter = $n\lambda^3$. Ein derartiges Phasendiagramm mit Wiedereintritt (Reentrance) in die flüssige/gasförmige Phase kommt z. B. bei Helium vor.

Für kleine Dichten $r_s \to \infty$ erwartet man den Übergang zu einem nach Wigner benannten Kristall. Für die Korrelationsenergie erhält man für den Wigner-Kristall

$$\frac{E_{\text{korr}}}{N} \approx -\frac{0{,}88}{r_s}\text{Ry}; \tag{5.12}$$

eine Interpolation[3] liefert dann den Ausdruck

$$\frac{E_{\text{korr}}}{N} \approx -\frac{0{,}88}{r_s + 7{,}8}\text{Ry} < 0. \tag{5.13}$$

Die Abbildung 5.2 zeigt schließlich die zu erwartenden Phasen in einem System mit einer Wechselwirkung vom Typ $e^{-r/\lambda}/r$ die zwischen langer ($\lambda \to \infty$) und kurzer ($\lambda \to 0$) Reichweite interpoliert.

5.1.2 Dielektrizitätskonstante $\varepsilon(\boldsymbol{q};\omega)$

Es ist nicht möglich die Dielektrizitätskonstante des homogenen Elektronengases exakt zu bestimmen. Allerdings gibt es gute Näherungen, welche die wesentlichen Eigenschaften eines Metalles, Abschirmung und Plasmonen, beinhalten. Eine Näherung haben wir schon im Kapitel Atome als Thomas-Fermi Abschirmung kennengelernt. Obwohl die Näherung für Atome entwickelt wurde, wird an keinem Punkt der Herleitung der Dielektrizitätskonstanten

$$\varepsilon(\boldsymbol{q}) = 1 + \frac{q_{\text{TF}}^2}{q^2} \tag{5.14}$$

mit $q_{\text{TF}}^2 = 4k_F/\pi a_B = 6\pi e^2 n/\varepsilon_F$ Bezug auf das Atom genommen. Vielmehr ist das Resultat, wie schon in 3.3 bemerkt, für Metalle gültig und beschreibt deren Abschirmeffekt. Mit der Thomas-Fermi Methode ist es aber nicht möglich dynamische Effekte zu beschreiben. Dafür braucht man die RPA (random phase approximation), welche im Folgenden eingeführt wird.

[3] Die Interpolation zwischen zwei Phasen – dem Fermi-Gas und dem Wigner-Kristall – ist mit Vorsicht zu genießen.

Wir untersuchen ein System vom wechselwirkenden Elektronen in einem externes Potential $U(\boldsymbol{r};t)$, welches wie in Kap. 3.3 (teilweise) durch das Potential $V_s(\boldsymbol{r};t)$ abgeschirmt wird. Das Potential $V_s(\boldsymbol{r};t)$ wird intern durch die Elektronen im Metall erzeugt, so dass im Endeffekt das Gesamtfeld $V = U + V_s$ anliegt. Die dynamische Dielektrizitätskonstante ist dann bestimmt durch, vgl. (3.33),

$$\varepsilon(\boldsymbol{q};\omega) = \frac{U(\boldsymbol{q};\omega)}{V(\boldsymbol{q};\omega)} = 1 - \frac{V_s(\boldsymbol{q};\omega)}{V(\boldsymbol{q};\omega)}. \tag{5.15}$$

Wir wollen das Problem selbstkonsistent lösen und nehmen daher an, dass die Elektronen dem Gesamtfeld V ausgesetzt sind. Der effektive (zeitabhängige) Hamiltonoperator der Elektronen ist gegeben durch

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= \int d^3r \sum_s \left[\frac{\hbar^2}{2m} \boldsymbol{\nabla}\Psi_s^\dagger(\boldsymbol{r}) \cdot \boldsymbol{\nabla}\Psi_s(\boldsymbol{r}) + \Psi_s^\dagger(\boldsymbol{r}) V(\boldsymbol{r};t) \Psi_s(\boldsymbol{r}) \right] \\ &= \sum_{\boldsymbol{k}s} \varepsilon_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}s}^\dagger c_{\boldsymbol{k}s} + \frac{1}{\Omega} \sum_{\boldsymbol{q}} V(\boldsymbol{q};t)\rho(-\boldsymbol{q}) \end{aligned} \tag{5.16}$$

mit dem Volumen $\Omega = L^3$ und dem (fouriertransformierten) Dichteoperator $\rho(-\boldsymbol{q}) = \sum_{\boldsymbol{k}s} c_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}s}^\dagger c_{\boldsymbol{k}s}$, vgl. (4.112). Beachte, dass die Elektron-Elektron Wechselwirkung nicht direkt im Hamiltonoperator H_{eff} auftritt. Ihr Beitrag ist indirekt durch den Abschirmanteil V_s zu V berücksichtigt; d. h. wir nehmen Abschirmeffekte mit, vernachlässigen aber Korrelations- und Austauscheffekte.

Wir nehmen an, dass das externe Potential $U(\boldsymbol{r};t)$ ein klassisch oszillierendes Feld generiert. Wir wollen die quantenmechanische Antwort des Elektronensystems auf dieses klassische Potential finden. Wir werden U klein annehmen und das Problem nur in erster Ordnung in U betrachten; dies bezeichnet man als lineare Antwort. Ein mit der Frequenz ω oszillierendes Potential $U(\boldsymbol{r};t) = U(\boldsymbol{r};\omega)e^{-i\omega t}$ führt dann zu einer Antwort $\langle\rho(\boldsymbol{r};t)\rangle = \rho(\boldsymbol{r};\omega)e^{-i\omega t}$ bei der gleichen Frequenz. Weiterhin gilt das Superpositionsprinzip, so dass wir nur die Antwort auf eine einzige Frequenz berechnen müssen und das allgemeine Resultat durch einfaches Addition der verschiedenen Beiträgen zu unterschiedlichen Frequenzen folgt.

Für das homogene Elektronengas verschwindet der Erwartungswert von $\rho(\boldsymbol{q})$ (außer für $\boldsymbol{q} = 0$). Auf Grund des angelegten Potentials U wird dieser Erwartungswert endlich. Die Abschirmladung $-e\langle\rho\rangle$ erzeugt das Potential

$$V_s(\boldsymbol{q};\omega) = \frac{4\pi e^2}{q^2}\langle\rho(\boldsymbol{q};\omega)\rangle. \tag{5.17}$$

Um einen expliziten Ausdruck für das Abschirmpotential V_s zu erhalten, werden wir im Folgenden die Bewegungsgleichung der Ladungdichte,

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}\rho(-\boldsymbol{q};t) &= [\rho(-\boldsymbol{q};t), H_{\text{eff}}] \\ \Rightarrow \quad \hbar\omega\rho(-\boldsymbol{q};\omega) &= [\rho(-\boldsymbol{q};\omega), H_{\text{eff}}], \end{aligned} \tag{5.18}$$

näherungsweise lösen. Anstatt direkt die Bewegungsgleichung für ρ zu lösen, betrachten wir zuerst die Bewegungsgleichung eines Terms

$$\hbar\omega c^\dagger_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\sigma}c_{\boldsymbol{p}\sigma} = [c^\dagger_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\sigma}c_{\boldsymbol{p}\sigma}, H_{\text{eff}}]. \tag{5.19}$$

Anschließend kann das Resultat für $\rho(-\boldsymbol{q})$ durch Summation über $\boldsymbol{p}$ und σ erhalten werden. Der Kommutator auf der rechten Seite von (5.18) ist gegeben durch die Summe der zwei Terme

$$\begin{aligned}\sum_{\boldsymbol{k}s}\varepsilon_{\boldsymbol{k}}[c^\dagger_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\sigma}c_{\boldsymbol{p}\sigma}, c^\dagger_{\boldsymbol{k}s}c_{\boldsymbol{k}s}] &= (\varepsilon_{\boldsymbol{p}}-\varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}})c^\dagger_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\sigma}c_{\boldsymbol{p}\sigma}, \\ \sum_{\boldsymbol{q}'\boldsymbol{k}s}V(\boldsymbol{q}')[c^\dagger_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\sigma}c_{\boldsymbol{p}\sigma}, c^\dagger_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}'s}c_{\boldsymbol{k}s}] &= \sum_{\boldsymbol{q}'}V(\boldsymbol{q}')(c^\dagger_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\sigma}c_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}'\sigma} - c^\dagger_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}'\sigma}c_{\boldsymbol{p}\sigma}).\end{aligned} \tag{5.20}$$

Zusammenfassend erhalten wir die Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned}(\varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}-\varepsilon_{\boldsymbol{p}}+\hbar\omega)c^\dagger_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\sigma}c_{\boldsymbol{p}\sigma} &= \frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{q}'}V(\boldsymbol{q}';\omega)(c^\dagger_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\sigma}c_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}'\sigma} - c^\dagger_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}'\sigma}c_{\boldsymbol{p}\sigma}) \\ &\overset{\text{RPA}}{\approx} \frac{V(-\boldsymbol{q};\omega)}{\Omega}(c^\dagger_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\sigma}c_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\sigma} - c^\dagger_{\boldsymbol{p}\sigma}c_{\boldsymbol{p}\sigma}),\end{aligned} \tag{5.21}$$

wobei wir beim letzten Schritt die RPA durchgeführt haben indem wir nur den Term mit $\boldsymbol{q}' = -\boldsymbol{q}$ aus der Summe mitgenommen und die anderen Terme vernachlässigt haben. Diese Annahme beruht auf der Tatsache, dass Terme von der Form $c^\dagger_{\boldsymbol{k}}c_{\boldsymbol{k}'}$ mit $e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}}$ oszillieren, so dass sich deren Beitrag (nach einer Integration über ein kleines Volumenelement) weghebt, solange $\boldsymbol{k}' \neq \boldsymbol{k}$.

Die genäherte Gleichung kann nun nach $c^\dagger_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\sigma}c_{\boldsymbol{p}\sigma}$ aufgelöst werden. Summiert man das Resultat über $\boldsymbol{p}\sigma$ erhält man

$$\begin{aligned}\rho(-\boldsymbol{q};\omega) &= \frac{V(-\boldsymbol{q};\omega)}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{p}\sigma}\frac{c^\dagger_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\sigma}c_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\sigma} - c^\dagger_{\boldsymbol{p}\sigma}c_{\boldsymbol{p}\sigma}}{\varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}-\varepsilon_{\boldsymbol{p}}+\hbar\omega} \\ &\overset{(\boldsymbol{p}\mapsto\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q})}{=} \frac{V(-\boldsymbol{q};\omega)}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{p}\sigma}\frac{c^\dagger_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}\sigma}c_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}\sigma} - c^\dagger_{\boldsymbol{p}\sigma}c_{\boldsymbol{p}\sigma}}{\varepsilon_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}}-\varepsilon_{\boldsymbol{p}}-\hbar\omega}.\end{aligned} \tag{5.22}$$

Davon können wir jetzt den Erwartungswert im Grundzustand berechnen und erhalten ($\Theta(x)$ ist die Stufenfunktion)

$$\begin{aligned}\langle\rho(\boldsymbol{q};\omega)\rangle &= \frac{V(\boldsymbol{q};\omega)}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{p}\sigma}\frac{\langle n_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}\sigma}\rangle - \langle n_{\boldsymbol{p}\sigma}\rangle}{\varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}-\varepsilon_{\boldsymbol{p}}-\hbar\omega} \\ &= V(\boldsymbol{q};\omega)\underbrace{2\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{\Theta(\varepsilon_F-\varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}})-\Theta(\varepsilon_F-\varepsilon_{\boldsymbol{p}})}{\varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}-\varepsilon_{\boldsymbol{p}}-\hbar\omega-i0^+}}_{\chi(\boldsymbol{q};\omega)}\end{aligned} \tag{5.23}$$

wobei der kleine Imaginärteil im Nenner die Kausalität garantiert. Mit (5.15) und (5.17) erhält man die Beziehung

$$\varepsilon_{\text{RPA}}(\boldsymbol{q};\omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2}\chi(\boldsymbol{q};\omega). \tag{5.24}$$

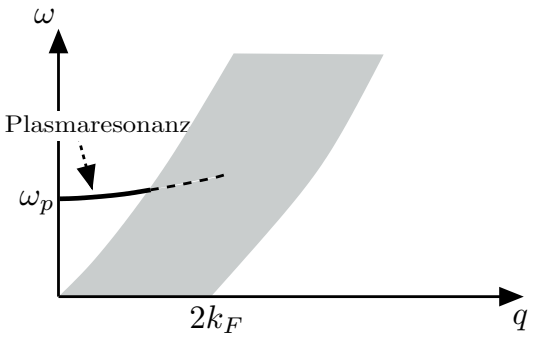


Abbildung 5.3: Anregungsspektrum des homogenen Elektrongases in der ω–q Ebene. Die grau schraffierte Fläche entspricht dem Elektron-Loch Kontinuum und die durchgezogene Linie außerhalb des Kontinuums entspricht der Plasmaresonanz mit der Dispersion bestimmt durch $\varepsilon(q;\omega) = 0$, welche gedämpft wird (Landau-Dämpfung), sobald sie in das Kontinuum eintritt.

5.1.3 Plasmaresonanz

Als erstes wollen wir die Dielektrizitätsfunktion für kleine Impulse $|\boldsymbol{q}| \ll k_F$ untersuchen. Dazu entwickeln wir

$$\Theta(\varepsilon_F - \varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}) = \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon_{\boldsymbol{p}}) - \delta(\varepsilon_{\boldsymbol{p}} - \varepsilon_F)\boldsymbol{q} \cdot \underbrace{\boldsymbol{\nabla}\varepsilon_{\boldsymbol{p}}}_{\hbar v_F \hat{\boldsymbol{p}}}$$

und erhalten

$$\begin{aligned}
\chi(\boldsymbol{q};\omega) &= -2\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{v_F\, \boldsymbol{q}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\, \delta(\varepsilon_{\boldsymbol{p}} - \varepsilon_F)}{v_F\, \boldsymbol{q}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} - \omega - i0^+} \\
&\overset{\omega \gg qv_F}{\approx} 2\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{\boldsymbol{q}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\, \delta(p - k_F)}{\hbar\omega} \left(1 + \frac{v_F \boldsymbol{q}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}}{\hbar\omega} + \cdots\right) \\
&= \frac{2}{(2\pi)^2} \int_{-1}^{1} dz \frac{k_F^2 qz}{\hbar\omega} \left(1 + \frac{v_F qz}{\omega}\right) \\
&= \frac{k_F^2 v_F q^2}{3\pi^2\hbar\omega^2} = \frac{nq^2}{m\omega^2}
\end{aligned} \tag{5.25}$$

wobei wir den Winkel θ zwischen $\boldsymbol{p}$ und $\boldsymbol{q}$ eingeführt haben mit $z = \cos\theta$. Damit wechselt die Dielektrizitätskonstante $\varepsilon_{\mathrm{RPA}}(0;\omega) = 1 - (\omega_p/\omega)^2$ bei $\omega_p = \sqrt{4\pi e^2 n/m}$

das Vorzeichen. Für $\omega < \omega_p$ ist ε negativ und das Metall reflektiert alle einfallende Strahlung perfekt. Für $\omega > \omega_p$ wird die Dielektrizitätskonstante positiv wie in einem normalen Dielektrikum und das Metall wird transparent. Die Frequenz ω_p nennt man die Plasmafrequenz und das dazugehörige Teilchen Plasmon, siehe Abbildung 5.3.[4] Die Plasmon-Frequenz ist für typische Metalle gegeben durch $\omega_p \simeq 10^{16}\,\mathrm{Hz}$ ($\hbar\omega_p \simeq 10eV$), wobei wir $n \simeq 10^{23}\,\mathrm{cm}^{-3}$ und $m \simeq 10^{-27}\,\mathrm{g}$ verwendet haben. Damit sind Metalle für sichtbares Licht opak und werden erst für Röngtenstrahlung durchsichtig.

Bei $\omega = \omega_p$ gilt $\varepsilon = 0$. Damit gibt es die Möglichkeit, dass das System intern eine Anregung mit $V, V_s, \rho \neq 0$ aufweist, ohne dass ein externes Feld angelegt ist ($U = 0$). Das ist die Plasmaschwingung, eine kollektive Anregung des Elektrongases. Die Plasmaschwingung ist allerdings nur für kleine ω, q eine wohldefinierte Anregung. Berechnet man $\chi(\boldsymbol{q}, \omega)$ im Allgemeinen findet man, dass die Plasmaschwingung überlebt, solange $\operatorname{Im}\chi = 0$. Der Imaginärteil von χ führt zur Dämpfung auf Grund von Dissipation, siehe Abbildung 5.3. Im Elektrongas entspricht das Elektron-Loch Anregungen $\hbar\omega = \varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}} - \varepsilon_{\boldsymbol{p}}$ mit Energie ω und Impuls $\boldsymbol{q}$, vgl. den Nenner von 5.23. Da $\boldsymbol{p}$ frei ist, bilden die Elektron-Loch Anregungen ein Kontinuum ohne scharfe Energie-Impuls beziehen. In der Tat füllen Elektron-Loch Anregungen den Bereich

$$0 \leq \hbar\omega \leq \hbar v_F q + \varepsilon_{\boldsymbol{q}}, \qquad (q \leq 2k_F) \tag{5.26}$$

$$-\hbar v_F q + \varepsilon_{\boldsymbol{q}} \leq \hbar\omega \leq \hbar v_F q + \varepsilon_{\boldsymbol{q}}, \qquad (q \geq 2k_F)\,. \tag{5.27}$$

5.1.4 Abschirmung

Um Abschirmungeffekte zu beschreiben müssen wir die Dielektrizitätsfunktion bei $\omega \to 0$ auswerten. Setzen wir in (5.23) $\omega = 0$ können wir die Polarisationsfunktion einfach bestimmen,

$$\begin{aligned}
\operatorname{Re}\chi(\boldsymbol{q}) &= 2\operatorname{Re}\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\frac{\Theta(\varepsilon_F - \varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}) - \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon_{\boldsymbol{p}})}{\varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}} - \varepsilon_{\boldsymbol{p}} - i0^+} \\
&= 2\operatorname{Re}\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\Theta(\varepsilon_F - \varepsilon_{\boldsymbol{p}})\left(\frac{1}{\varepsilon_{\boldsymbol{p}} - \varepsilon_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}} - i0^+} - \frac{1}{\varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}} - \varepsilon_{\boldsymbol{p}} - i0^+}\right) \\
&= -\frac{m}{\pi^2\hbar^2}\int_0^{k_F} dp\, p^2 \operatorname{Re}\int_{-1}^{1} dz \left(\frac{1}{q^2 - 2qpz + i0^+} + \frac{1}{q^2 + 2qpz - i0^+}\right) \\
&= -\frac{m}{\pi^2\hbar^2 q}\int_0^{k_F} dp\, p \log\left|\frac{q+2p}{q-2p}\right| \\
&= -\frac{m}{2\pi^2\hbar^2 q}\left(k_F^2 \log\left|\frac{2k_F+q}{2k_F-q}\right| + \int_0^{k_F} dp\,\frac{4qp^2}{4p^2-q^2}\right) \\
&= -\frac{m}{2\pi^2\hbar^2 q}\left[k_F q + (k_F^2 - \tfrac{1}{4}q^2)\log\left|\frac{2k_F+q}{2k_F-q}\right|\right],
\end{aligned} \tag{5.28}$$

[4] Beachte, dass die plancksche Konstante nicht im Ausdruck für die Plasmafrequenz auftritt, so dass diese ein rein klassischer Effekt mit einer klassischen Erklärung ist (siehe z. B. Feynman Lecture Bd. 2).

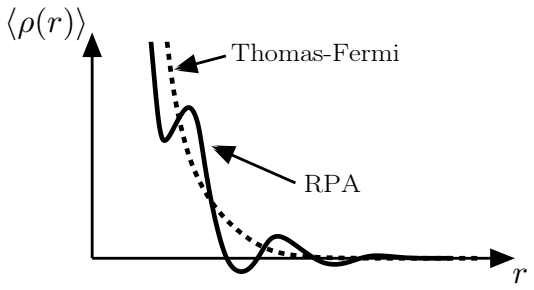


Abbildung 5.4: Friedel Oszillationen der Abschirmladung $\langle\rho\rangle \propto V_s$ als Funktion des Abstandes r von einer Punktladung am Ursprung.

wobei wir benutzt haben, dass $\varepsilon_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}} - \varepsilon_{\boldsymbol{p}} = \hbar^2(q^2 + 2\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{p})/2m$ ist. Einsetzen des Resultats in den Ausdruck für ε liefert die statische dielektrische Funktion

$$\mathrm{Re}\,\varepsilon_{\mathrm{RPA}}(\boldsymbol{q}) = 1 + \frac{q_{\mathrm{TF}}^2}{q^2}\left(\frac{1}{2} + \frac{4k_F^2 - q^2}{8k_F q}\log\left|\frac{2k_F + q}{2k_F - q}\right|\right). \tag{5.29}$$

Für $q \ll k_F$ stimmt die dielektrische Funktion genau mit dem Thomas-Fermi Resultat (5.14) überein. Allerdings hat das RPA Resultat eine divergierende erste Ableitung bei $q = \pm 2k_F$. Der Grund dafür liegt an der scharfen Fermifläche. Betrachten wir eine Punktladung am Koordinatenursprung mit $U(q) = 4\pi e^2/q^2$ dann führt dies neben der exponentiellen Abschirmung der Ladung zu Oszillationen in der Ladungsverteilung mit einem Wellenvektor $\simeq 2k_F$;

$$\langle\rho(\boldsymbol{r})\rangle = \int d^3q\,[\varepsilon_{\mathrm{RPA}}^{-1}(\boldsymbol{q}) - 1]e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} \sim \frac{\cos 2k_F r}{r^3} \tag{5.30}$$

Diese Oszillationen werden Friedel Oszillationen genannt. Wie in Abbildung 5.4 gezeigt, führen die Friedel Oszialltionen führen dazu, dass die Testladung abwechslungsweise über- und unterabgeschirmt wird.

5.2 Supraleitung

Supraleitung wurde im Jahr 1911 von Heike Kamerlingh Onnes enteckt. Er hat Quecksilber mit Helium bis auf 4 K abgekühlt und dabei festgestellt, dass der Widerstand des Quecksilbers bei den tiefsten Temperaturen sprunghaft verschwunden ist. Spätere Experimente haben festgestellt, dass ein Strom in einem Supraleiter für lange Zeiten ($\gtrsim 1$ Jahr) ohne angelegte Spannung aufrecht erhalten bleibt. Dies bestätigt, dass das Material wirklich widerstandsfrei ist. Eine weitere Eigenschaft der Supraleiter ist ihr perfekter Diamagnetismus, genannt Meißner-Ochsenfeld-Effekt. Wir werden im Abschnitt über die London-Gleichungen zeigen, dass der Meißner-Ochsenfeld-Effekt für einen Supraleiter charakteristischer ist als das verschwinden des Widerstandes. Das externe Magnetfeld kann nur in der Nähe der Oberfläche in das Material ein, tiefere

Schichten sind feldfrei. Dieses „Herausdrängen“ des Magnetfeldes ist unabhängig davon, ob die Probe bereits vor dem Einschalten des Magnetfeldes supraleitend war oder erst supraleitend gemacht wird, nachdem das Magnetfeld eingeschaltet wurde.

5.2.1 London-Gleichungen

Die Supraleitung hatte für einige Zeit keine theoretisch zufriedenstellende Erklärung. Die Brüder Fritz und Heinz London schafften es im Jahr 1935 wenigstens phänomenologische Gleichungen aufzustellen. Bis zu einer mikroskopischen Theorie dauerte es nochmals 20 Jahre. Die Frage, welche sich stellt, ist, wie man ein Material beschreibt, dass eine unendliche Leitfähigkeit aufweist. Aus der newtonschen Bewegungsgleichung $m\partial_t \boldsymbol{v} = -e\boldsymbol{E}$ eines Elektrons findet man direkt die erste London-Gleichung für die Stromdichte $\boldsymbol{j} = -ne\boldsymbol{v}$,

$$\partial_t \boldsymbol{j} = \frac{ne^2}{m}\boldsymbol{E}. \tag{5.31}$$

Diese Gleichung beschreibt einen „perfekten Leiter“, da mit $\boldsymbol{E} = 0$ nicht notwendigerweise $\boldsymbol{j} = 0$ folgt, vermag aber nicht den Meißner-Ochsenfeld Effekt vorherzusagen. Um dies zu zeigen, leiten wir daraus die Bewegungsgleichung für das Magnetfeld $\boldsymbol{H}$ her. Dazu benötigen wir die Maxwellgleichung $\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{H} = 4\pi\boldsymbol{j}/c$ (wir betrachten den stationären Fall mit $\partial_t \boldsymbol{E} = 0$). Die Rotation dieser Gleichung führt auf (wir benutzen $\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{H} = 0$ und $\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{E} = -\partial_t \boldsymbol{H}$)

$$\nabla^2 \partial_t \boldsymbol{H} = -\overbrace{\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\nabla}\times}^{\boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{\nabla}\cdot)-\nabla^2} \partial_t \boldsymbol{H} = -\frac{4\pi}{c}\boldsymbol{\nabla} \times \partial_t \boldsymbol{j} \overset{(5.31)}{=} \frac{1}{\lambda_L^2}\partial_t \boldsymbol{H} \tag{5.32}$$

mit der London-Eindringtiefe

$$\lambda_L = \sqrt{\frac{mc^2}{4\pi ne^2}}. \tag{5.33}$$

Die Gleichung (5.32) zeigt nur, dass ein Magnetfeld in einem perfekten Leiter zeitlich konstant ist; die Magnetfeldlinien sind eingefroren. Dies ist allerdings nicht im Einklang mit den Experimenten von Meißner und Ochsenfeld. Deshalb verlangt die zweite London-Gleichung

$$\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{j} = \frac{ne^2}{mc}\boldsymbol{H} \tag{5.34}$$

das verschwindend der Integrationskonstanten in (5.32). Damit wird (5.32) zu

$$\nabla^2 \boldsymbol{H} = \frac{4\pi}{c}\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{j} = \frac{1}{\lambda_L^2}\boldsymbol{H} \tag{5.35}$$

und (alle) Magnetfelder werden auf der Längenskala λ_L komplett abgeschirmt; sucht man nämlich nach einer homogenen Lösung $\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{H}_0$ so findet man sofort $\boldsymbol{H}_0 = 0$. Die gewöhnliche Form der Maxwellgleichung erhält man mit $\lambda_L \to \infty$ ($n \to 0$). Physikalisch bedeutet (5.35), dass das magnetische Feld (das Photon) durch die

Kopplung an das supraleitende Kondensat eine „Masse“ erhält. Dies nennt man Anderson-Higgs Mechanismus und ist analog zum Effekt, dass in der elektroschwachen Theorie die W- und Z-Eichbosonen durch die Kopplung an das Higgs-Boson eine Masse erhalten.

Mit Hilfe des Vektorpotentials $\boldsymbol{A}$ in der London-Eichung ($\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{A} = 0$) kann man die beiden Londongleichungen in einer einzigen Gleichung zusammenfassen,

$$\boldsymbol{j} = -\frac{ne^2}{mc}\boldsymbol{A} = -\frac{c}{4\pi\lambda_L^2}\boldsymbol{A}, \tag{5.36}$$

woraus sich die erste und zweite London-Gleichung durch anwenden von ∂_t bzw. $\boldsymbol{\nabla} \times$ herleiten lassen. Die London-Eichung garantiert, dass die Kontinuitätsgleichung $\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{j} = 0$ gilt. Beachte, dass die Teilchendichte n in den London-Gleichungen sich nur auf die Dichte der supraleitenden Teilchen n_s bezieht, welche im Allgemeinen kleiner als die Elektronendichte ist, und somit $\boldsymbol{j}$ die dazugehörigen Stromdichte des Suprastroms $\boldsymbol{j}_s$ bezeichnet, welcher sich im Allgemeinen von der totalen Stromdichte unterscheidet.

5.2.2 BCS Theorie

Die mikroskopische Theorie der Supraleiter wurde im Jahre 1957 von Bardeen, Cooper und Schrieffer (BCS) entwickelt. Sie beruht auf einer Entdeckung von Leon Cooper, dass ein beliebig schwaches anziehendes Potential zweier Elektronen and der Fermikante, zu einem gebundenen Zustand derselben führt. Der Paarungsmechanismus ist wichtig, da ein suprafluider Zustand typisch für Bosonen ist, da Bosonen bei tiefen Temperaturen in eine makroskopisch besetzten Grundzustandswellenfunktion kondensieren. Fermionen hingegen bilden einen Fermisee aus. Damit sich Fermionen superflüssig (bosonisch) verhalten, müssen sie sich daher zuerst paaren, um danach zu kondensieren.

Das Problem ist nun, warum sich Elektronen überhaupt anziehen, da ihre (Coulomb-) Wechselwirkung bekanntlicherweise abstoßend ist. Einen Teil der Antwort haben wir im letzten Abschnitt entwickelt: die Abstoßung der Elektronen bei hoher Dichte ist gar nicht so stark, da die Wechselwirkung auf der Längenskala q_{TF}^{-1} abgeschirmt ist. Einen Hinweis zur Lösung des Problems lieferte der Isotopeneffekt: schon Anfangs der 50er Jahre wurde bei Quecksilber festgestellt, dass die Sprungtemperatur T_c bei der Supraleitung einsetzt vom Isotop abhängt ($T_c \propto M_{\mathrm{Ion}}^{-1/2}$). Dadurch erkennt man, dass die Supraleitung nicht alleine ein elektronisches Problem ist sondern dass man den Effekt von Phononen (Gitterschwingungen) berücksichtigen muss. Eine (ungerechtfertigt) vereinfachte Rechnung führt auf eine effektive Elektron-Elektron Wechselwirkung $V_{\mathrm{eff}} = 4\pi e^2/q^2\varepsilon(q;\omega)$ mit

$$\frac{1}{\varepsilon(q;\omega)} \approx \frac{q^2}{q^2 + q_{\mathrm{TF}}^2}\left(1 + \frac{\omega_q^2}{\omega^2 - \omega_q^2}\right), \tag{5.37}$$

wobei der ersten Term die Polarization der Elektronen und der zweiten Term diejenige der positiv geladenen Ionen mit Dispersion $\omega_q = sq$ berücksichtigt; s ist die Schallgeschwindigkeit im Metall. Beachte, dass die Zeitskala der Antwort der Elektronen durch die kurze Zeit ω_p^{-1} gegeben ist. Wir dürfen daher die Wechselwirkung für die untersuchten Streuprozesse von Elektronen nahe bei der Fermifläche als instantan betrachten, weshalb wir den statischen Ausdruck für den elektronischen Anteil von ε verwendet haben. Die Antwort der (schweren) Ionen hingegen passiert auf der langsameren Zeitskala ω_D^{-1} (ω_D ist die Debye-Frequenz der Phononen) und ist viel langsamer, so dass der ionische Anteil dynamisch berücksichtigt werden muss. Der Effekt der Phononenpolarisation führt dazu, dass das Potential für $|\omega| < \omega_q \simeq \omega_D$ anziehend wirkt.

Obwohl wir den Effekt der Phononen nur durch einen zusätzlichen Term in $\varepsilon(\boldsymbol{q};\omega)$ mitnehmen, ist das Problem immer noch zu schwer, um es exakt zu lösen. Weil wir Supraleitung beschreiben wollen, ist die Idee, nur den Teil der Wechselwirkung zu beschreiben, welcher zur Paarung von Elektronen führt. Den Effekt der übrigen Wechselwirkung kann man danach im Prinzip in Störungstheorie berücksichtigen. Wir werden sehen, dass die Paarungwechselwirkung zu einer Energielücke führt; dadurch werden Effekte der übrigen Wechselwirkung unterdrückt. Wir betrachten nun den reduzierten (Paarung-) Hamiltonoperator[5]

$$H_{\text{paar}} = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \underbrace{(\varepsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu)}_{\xi_{\boldsymbol{k}}} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma} + \sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{l}} V_{\text{eff}}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{l}) c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} c_{-\boldsymbol{l}\downarrow} c_{\boldsymbol{l}\uparrow}; \tag{5.38}$$

der Paarungshamiltonoperator beschreibt nur die Streuung von Cooper-Paaren $|\boldsymbol{k}\uparrow, -\boldsymbol{k}\downarrow\rangle = c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}|0\rangle$, welcher zur Paarung der Elektronen führt.[6]

Wir erwarten, dass der BCS-Paarungshamiltonoperator (5.38) zu einer phasenkoherenten Superposition von Cooper-Paaren $|\boldsymbol{k}\uparrow, -\boldsymbol{k}\downarrow\rangle$ führt. Wenn die Cooper-Paare kondensieren, erhält der Operator $c_{-\boldsymbol{k}\downarrow} c_{\boldsymbol{k}\uparrow}$ einen endlichen Erwartungswert $b_{\boldsymbol{k}}$ (kohärenter Zustand). Wegen der makroskopischen Besetzung des Zustandes, erwarten wir, dass Fluktuationen klein sind. Dies motiviert den Molekularfeldansatz

$$c_{-\boldsymbol{k}\downarrow} c_{\boldsymbol{k}\uparrow} = b_{\boldsymbol{k}} + \underbrace{(c_{-\boldsymbol{k}\downarrow} c_{\boldsymbol{k}\uparrow} - b_{\boldsymbol{k}})}_{\ll b_{\boldsymbol{k}}}; \tag{5.39}$$

durch einsetzen in (5.38) und vernachlässigen von Termen quadratisch in den Fluk-

[5] Das chemische Potential μ ist bei $T = 0$ gleich ε_F und wird durch die (mittlere) Elektronenzahl festgelegt.

[6] Im einfachsten Fall den wir hier betrachten ist ein Cooper-Paar ein gebundener Zustand zweier Elektronen als Singulett mit Gesamtimpuls 0. Man nennt dies s-Wellen-Paarung. Andere Paarungszustände sind vorstellbar. Z. B. können die Elektronen sich als Triplett paaren (p-Welle) oder das Elektronenpaar kann einen endlichen Gesamtimpuls aufweisen (Larkin-Ovchinnikov-Fulde-Ferrell im Magnetfeld). Für die allermeisten Materialien wird allerdings der s-Wellenpaarungskanal mit verschwindenem Gesamtimpuls bevorzugt.

tuationen erhalten wir den BCS-Modellhamiltonoperator

$$H_{\mathrm{BCS}} = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \xi_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma} + \sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{l}} V_{\mathrm{eff}}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{l})(c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} b_{\boldsymbol{l}} + b^*_{\boldsymbol{k}} c_{-\boldsymbol{l}\downarrow} c_{\boldsymbol{l}\uparrow} - b^*_{\boldsymbol{k}} b_{\boldsymbol{l}}) \tag{5.40}$$

mit der Selbstkonsistenzgleichung $b_{\boldsymbol{k}} = \langle c_{-\boldsymbol{k}\downarrow} c_{\boldsymbol{k}\uparrow}\rangle$, welcher exakt gelöst werden kann. Beachte, dass wegen des Molekularfeldansatzes der Hamiltonoperator die Teilchenzahl nicht mehr erhält. Für große Teilchenzahlen ist dies nicht weiter tragisch. Das chemische Potential μ legt dann einfach die mittlere Teilchenzahl fest und die relativen Fluktuationen verschwinden wie $N^{-1/2}$, ähnlich wie im großkanonischen Ensemble.[7]

Als erster Schritt für die Lösung von (5.40) führen wir die Energielücke (Gap) ein

$$\Delta_{\boldsymbol{k}} = -\sum_{\boldsymbol{l}} V_{\mathrm{eff}}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{l}) b_{\boldsymbol{l}} = -\sum_{\boldsymbol{l}} V_{\mathrm{eff}}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{l}) \langle c_{-\boldsymbol{l}\downarrow} c_{\boldsymbol{l}\uparrow}\rangle \tag{5.41}$$

mit dem sich der BCS-Hamiltonian schreiben lässt als

$$H_{\mathrm{BCS}} = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \xi_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma} - \sum_{\boldsymbol{k}} \left(\Delta_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} + \Delta^*_{\boldsymbol{k}} c_{-\boldsymbol{k}\downarrow} c_{\boldsymbol{k}\uparrow} - b^*_{\boldsymbol{k}} \Delta_{\boldsymbol{k}} \right). \tag{5.42}$$

Zudem wollen wir neue fermionische Operatoren $\beta_{\boldsymbol{k}\sigma}$ definieren, welche den Hamiltonoperator diagonalisieren. Eine Transformation auf neue fermionische Operatoren wird durch die Bogoliubov-Valatin Transformation (siehe Abschnitt 5.2.3)

$$c_{\boldsymbol{k}\uparrow} = u^*_{\boldsymbol{k}} \beta_{\boldsymbol{k}\uparrow} + v_{\boldsymbol{k}} \beta^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}, \qquad c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} = -v^*_{\boldsymbol{k}} \beta_{\boldsymbol{k}\uparrow} + u_{\boldsymbol{k}} \beta^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}, \tag{5.43}$$

geleistet, mit der (Unitaritäts-) Bedingung $|u_{\boldsymbol{k}}|^2 + |v_{\boldsymbol{k}}|^2 = 1$. Die Wahl[8]

$$|v_{\boldsymbol{k}}|^2 = 1 - |u_{\boldsymbol{k}}|^2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\xi_{\boldsymbol{k}}}{E_{\boldsymbol{k}}}\right), \; 2u^*_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} = \frac{\Delta_{\boldsymbol{k}}}{E_{\boldsymbol{k}}}, \; E_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{\xi^2_{\boldsymbol{k}} + |\Delta_{\boldsymbol{k}}|^2}, \tag{5.44}$$

führt nach Einsetzen in (5.40) und einfachen Umformungen auf die diagonalisierte Form (siehe folgenden Abschnitt)

$$H_{\mathrm{BCS}} = \sum_{\boldsymbol{k}} (\xi_{\boldsymbol{k}} - E_{\boldsymbol{k}} + b^*_{\boldsymbol{k}} \Delta_{\boldsymbol{k}}) + \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} E_{\boldsymbol{k}} \beta^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} \beta_{\boldsymbol{k}\sigma}. \tag{5.45}$$

Der erste Term gibt die Grundzustandsenergie and und der zweite Term beschreibt die Anregungen als Erzeugung von Bogoliubov Quasiteilchen mit der Anregungsenergie $E_{\boldsymbol{k}} \geq 0$. Für $|\Delta_{\boldsymbol{k}}| > 0$ weisen die Quasiteilchen anders als im Metall eine Energielücke auf.

Im Folgenden werden wir zuerst zeigen, dass (5.43) und (5.44) auch wirklich auf die Diagonalform (5.45) führen. Danach werden wir die selbstkonsistente Energielücke $\Delta_{\boldsymbol{k}}$ bestimmen.

[7] Da man dem Supraleiter eine quantenmechanische Phase φ zuordnen möchte, ist die Unschärfe in der Teilchenzahl N sogar unerlässlich, da Phase und Teilchenzahl konjugierte Variablen sind und daher die heisenbergsche Unschärferelation $\Delta N \, \Delta\varphi \geq 1$ erfüllten.

[8] Die Phasen von $u_{\boldsymbol{k}}$, $v_{\boldsymbol{k}}$ und $\Delta_{\boldsymbol{k}}$ sind verknüpft, da $\Delta^*_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} > 0$ ist. O. b. d. A. können wir $u_{\boldsymbol{k}} > 0$ wählen und erhalten dann dass $v_{\boldsymbol{k}}$ und $\Delta_{\boldsymbol{k}}$ dieselbe Phase haben.

5.2.3 Exkurs: Allgemeine quadratische Hamiltonoperatoren

Quadratische Hamiltonoperatoren, welche die Teilchenzahl nicht notwendigerweise erhalten, habe im allgemeinen die Form

$$H = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(h_{ij}c_i^\dagger c_j + \tfrac{1}{2}\Delta_{ij}c_i^\dagger c_j^\dagger + \tfrac{1}{2}\Delta_{ij}^* c_j c_i) = \boldsymbol{c}^\dagger h \boldsymbol{c} + \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{c}^\dagger \Delta \boldsymbol{c}^\dagger + \boldsymbol{c}\Delta^\dagger \boldsymbol{c}) \tag{5.46}$$

mit n der Anzahl fermionischer Moden, $h = h^\dagger$ und $\Delta = -\Delta^T$.[9] Man kann diesen Hamiltonoperator mit einer Bogoliubov-Valatin-Transformation diagonalisieren. Dazu schreibt man den Hamiltonoperator als quadratische Form

$$H = \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix}\boldsymbol{c}^\dagger & \boldsymbol{c}\end{pmatrix}\underbrace{\begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^T\end{pmatrix}}_{H_{\mathrm{BdG}}}\begin{pmatrix}\boldsymbol{c} \\ \boldsymbol{c}^\dagger\end{pmatrix} + \tfrac{1}{2}\operatorname{tr} h; \tag{5.47}$$

somit wird jeder quadratische zweitquantisierte Hamiltonoperator H auf eine hermitesche $2n \times 2n$ Matrix H_{BdG} abgebildet. Den erstquantisierten Hamiltonoperator (Matrix) H_{BdG} bezeichnet man „Bogoliubov-de Gennes-Hamiltonoperator“.

Der Bogoliubov-de Gennes-Hamiltonoperator H_{BdG} hat doppelt so viele Freiheitsgrade (nämlich $2n$) wie das ursprüngliche fermionische System. Die zusätzlichen Freiheitsgrade stammen daher, dass $\boldsymbol{c}$ sowohl rechts als auch links von H_{BdG} in der quadratischen Form (5.47) auftritt und man daher die Freiheit hat, wo man den Term $\boldsymbol{c}^\dagger h \boldsymbol{c}$ in der BdG Matrix einträgt. In (5.47) haben wir die „symmetrische“ Variante gewählt und daher hat der Bogoliubov-de Gennes-Hamiltonoperator die („Teilchen-Loch“) Symmetrie $\{H_{\mathrm{BdG}}, C\} = 0$ mit $C = \tau_x K$; hier bezeichnet K den Operator der komplexen Konjugation und τ_x wirkt auf die Blockform in (5.47). Beachte, dass C keine Symmetrie im konventionellen Sinne ist, da sie nicht mit dem Hamiltonoperator vertauscht. Zudem ist die Symmetrie bei einem Bogoliubov-de Gennes-Hamiltonoperator durch Konstruktion immer vorhanden (und kann daher nicht gebrochen werden).

Die Aufgabe ist, den zweitquantisierten Hamiltonoperator H auf die Form $H = \sum_j \varepsilon_j \beta_j^\dagger \beta_j$ mit fermionischen Operatoren β_j zu bringen; der quadratische Hamiltonoperator ist dann gelöst, da alle Vielteilcheneigenzustände Besetzungszahlzustände zu $n_j = \beta_j^\dagger \beta_j$ sind. Wir werden sehen, dass man zudem fordern kann, dass die Einteilchenenergien $\varepsilon_j \geq 0$ sind, so dass der Grundzustand dem Vakuum (bezüglich der β Operatoren) entspricht und ε_j gerade die (Einteilchen-) Anregungsenergien sind. Diese Aufgabe kann durch eine sogenannte Bogoliubov Transformation (von $\boldsymbol{c}$ auf $\boldsymbol{\beta}$)

$$T\begin{pmatrix}\boldsymbol{\beta} \\ \boldsymbol{\beta}^\dagger\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\boldsymbol{c} \\ \boldsymbol{c}^\dagger\end{pmatrix} \tag{5.48}$$

[9] Auf den ersten Blick sieht es so aus, als ob Gleichung (5.46) keine Einschränkung auf Δ verlangt. Dies ist richtig, da aber der symmetrische Anteil $\Delta_S = (\Delta + \Delta^T)/2$ wegen der fermionischen Vertauschungsrelation keinen Beitrag liefert, $\sum_{ij}(\Delta_S)_{ij}c_i c_j = -\sum_{ij}(\Delta_S)_{ij}c_j c_i = -\sum_{ij}(\Delta_S)_{ij}c_i c_j \Rightarrow \sum_{ij}(\Delta_S)_{ij}c_i c_j = 0$, darf man o. B. d. A. Δ antisymmetrisch wählen, $\Delta = (\Delta - \Delta^T)/2$.

gelöst werden mit $T \in \mathrm{Gl}(2n, \mathbb{C})$. Die Invarianz des quadratischen Hamiltonoperators H unter einer solchen Transformation, verlangt, dass

$$H'_{\mathrm{BdG}} = T^\dagger H_{\mathrm{BdG}} T \tag{5.49}$$

wobei H'_{BdG} der Bogoliubov-de Gennes-Hamiltonian in der Basis β ist. Daher möchten wir, dass H'_{BdG} eine Diagonalmatrix ist.

Beachte, dass anders bei dem „normalen“ Basiswechsel aus Abschnitt 4.4 hier Erzeuger und Vernichter gemischt werden. Dies ist analog zu klassischen Mechanik: im Lagrange-Formalismus sind allgemeine Basistransformationen erlaubt, während im Hamilton-Formalismus zusätzlich Orts- und Impulskoordinaten gemischt werden dürfen. Auf den ersten Blick führt dies zu mehr Freiheitgraden, doch sind nur kanonische Transformationen, welche die Poissonklammer invariant lassen, erlaubt. Hier nun übernimmt die kanonische Vertauschungsrelationen $\{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij}$ und $\{c_i, c_j\} = 0$ die Rolle der Poissonklammer. In der Tat möchten wir, dass die Operatoren β_i, welche den Hamiltonoperator diagonalisieren, auch wirklich fermionische Operatoren sind, damit sie den gewöhnlichen fermionischen Fock-Raum erzeugen.

Wir fordern daher die Invarianz von[10]

$$\left\{ \begin{pmatrix} \boldsymbol{c} \\ \boldsymbol{c}^\dagger \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \boldsymbol{c} \\ \boldsymbol{c}^\dagger \end{pmatrix}^\dagger \right\} = I_{2n} \tag{5.50}$$

unter der Transformation (5.49). Indem wir die Transformation (5.49) einsetzen und verwenden, dass der Antikommutator bilinear ist, und verlangen, dass der Antikommutator invariant bleibt, erhalten wir die Nebenbedingung

$$I_{2n} = \left\{ T \begin{pmatrix} \boldsymbol{\beta} \\ \boldsymbol{\beta}^\dagger \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \boldsymbol{\beta} \\ \boldsymbol{\beta}^\dagger \end{pmatrix}^\dagger T^\dagger \right\} = T \underbrace{\left\{ \begin{pmatrix} \boldsymbol{\beta} \\ \boldsymbol{\beta}^\dagger \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \boldsymbol{\beta} \\ \boldsymbol{\beta}^\dagger \end{pmatrix}^\dagger \right\}}_{I_{2n}} T^\dagger = T T^\dagger; \tag{5.51}$$

d. h. T ist unitär.

Diagonalisierung einer hermiteschen Matrix H_{BdG} mit einer unitären Transformation T wird durch das gewöhnliche Eigenwertproblem

$$H_{\mathrm{BdG}} \boldsymbol{t}_j = \varepsilon_j \boldsymbol{t}_j \tag{5.52}$$

gelöst, wobei $\boldsymbol{t}_j$ die Spalten von T sind. Die Teilchen-Loch Symmetrie C garantiert, dass mit es zu jedem Eigenvektor $\boldsymbol{t}_+$ zum Eigenwert $\varepsilon \geq 0$ einen zusätzlichen Eigenvektor $\boldsymbol{t}_- = C\boldsymbol{t}_+$ zum Eigenwert $-\varepsilon \leq 0$ gibt; denn

$$\underbrace{H_{\mathrm{BdG}}}_{-C^{-1} H_{\mathrm{BdG}} C} \boldsymbol{t}_+ = \varepsilon \boldsymbol{t}_+ \qquad \Rightarrow \qquad H_{\mathrm{BdG}} \boldsymbol{t}_- = -\varepsilon \boldsymbol{t}_-. \tag{5.53}$$

[10] Wir fassen den Antikommutator von zwei Vektoren $\boldsymbol{v}$ und $\boldsymbol{v}$ auf als Matrix auf mit Matrixelementen $(\{\boldsymbol{v}, \boldsymbol{w}\})_{ij} = \{v_i, w_j\}$. Der Antikommutator in (5.50) ist eine quadratische Form, welche die Rolle der Metrik auf dem Raum der Erzeuger und Vernichter spielt.

Ordnet man nun die Eigenwerte so, dass zuerst die positiven Eigenwerte und dann die negativen Eigenwerte auf der Diagonalen von H'_{BdG} auftreten, garantiert die Teilchen-Loch Symmetrie, dass $\boldsymbol{\beta}^\dagger$ in der Transformation (5.49) gerade die adjungierten Operatoren zu $\boldsymbol{\beta}$ sind. Zusammenfassend erhalten wir

$$\begin{aligned} H &= \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix}\boldsymbol{\beta}^\dagger & \boldsymbol{\beta}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varepsilon_1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & \varepsilon_n & & & \\ & & & -\varepsilon_1 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & -\varepsilon_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{\beta} \\ \boldsymbol{\beta}^\dagger\end{pmatrix} + \tfrac{1}{2}\operatorname{tr} h \\ &= \sum_{j=1}^{n}\varepsilon_j\beta_j^\dagger\beta_j + \tfrac{1}{2}\Big(\operatorname{tr} h - \sum_{j=1}^{n}\varepsilon_j\Big). \end{aligned} \tag{5.54}$$

Betrachten wir als Beispiel den Modell-Hamiltonoperator (5.42), dann kann dieser in der Bogoliubov-de Gennes-Form

$$H = \sum_{\boldsymbol{k}}\left[\begin{pmatrix}c_{\boldsymbol{k}\uparrow}^\dagger & c_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\end{pmatrix} H_{\boldsymbol{k}}\begin{pmatrix}c_{\boldsymbol{k}\uparrow} \\ c_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^\dagger\end{pmatrix} + \xi_{\boldsymbol{k}} + b_{\boldsymbol{k}}^*\Delta_{\boldsymbol{k}}\right] \tag{5.55}$$

geschrieben werden mit

$$H_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix}\xi_{\boldsymbol{k}} & -\Delta_{\boldsymbol{k}} \\ -\Delta_{\boldsymbol{k}}^* & -\xi_{\boldsymbol{k}}\end{pmatrix}. \tag{5.56}$$

Wir sehen, dass aufgrund der Translationssymmetrie sich das Problem auf die Diagonalisierung des 2×2 Bogoliubov-de Gennes-Hamiltonoperator $H_{\boldsymbol{k}}$ reduziert. Die zwei Eigenzustände des Hamiltonoperators sind gegeben durch

$$H_{\boldsymbol{k}}\begin{pmatrix}u_{\boldsymbol{k}}^* \\ -v_{\boldsymbol{k}}^*\end{pmatrix} = E_{\boldsymbol{k}}\begin{pmatrix}u_{\boldsymbol{k}}^* \\ -v_{\boldsymbol{k}}^*\end{pmatrix}, \qquad H_{\boldsymbol{k}}\begin{pmatrix}v_{\boldsymbol{k}} \\ u_{\boldsymbol{k}}\end{pmatrix} = -E_{\boldsymbol{k}}\begin{pmatrix}v_{\boldsymbol{k}} \\ u_{\boldsymbol{k}}\end{pmatrix} \tag{5.57}$$

mit $u_{\boldsymbol{k}}$ und $v_{\boldsymbol{k}}$ wie in (5.44).[11] Die Transformation auf die Basis $\beta_{\boldsymbol{k}\uparrow}, \beta_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^\dagger$ liefert das Resultat (5.45),

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\boldsymbol{k}}[E_{\boldsymbol{k}}(\beta_{\boldsymbol{k}\uparrow}^\dagger\beta_{\boldsymbol{k}\uparrow} - \beta_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\beta_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^\dagger) + \xi_{\boldsymbol{k}} + b_{\boldsymbol{k}}^*\Delta_{\boldsymbol{k}}] \\ &= \underbrace{\sum_{\boldsymbol{k}}(\xi_{\boldsymbol{k}} - E_{\boldsymbol{k}} + b_{\boldsymbol{k}}^*\Delta_{\boldsymbol{k}})}_{E_g} + \sum_{\boldsymbol{k}\sigma}E_{\boldsymbol{k}}\beta_{\boldsymbol{k}\sigma}^\dagger\beta_{\boldsymbol{k}\sigma}, \end{aligned} \tag{5.58}$$

mit der Grundzustandsenergie E_g und den Anregungsenergien $E_{\boldsymbol{k}}$.

[11] Wir haben damit $T_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix}u_{\boldsymbol{k}}^* & v_{\boldsymbol{k}} \\ -v_{\boldsymbol{k}}^* & u_{\boldsymbol{k}}\end{pmatrix}$. Die Unitärität von T ist garantiert durch (5.44).

5.2.4 Selbstkonsistenzgleichung

Wir müssen im nächsten Schritt die Selbstkonsistenzgleichung (5.41) lösen, um zu sehen, ob für einen Supraleiter sich auch wirklich $|\Delta_{\boldsymbol{k}}| > 0$ wird. Die triviale Lösung der Selbstkonsistenzgleichung mit $\Delta_{\boldsymbol{k}} = 0$, so dass $v_{\boldsymbol{k}} = 1$ für $\xi_{\boldsymbol{k}} < 0$ und $v_{\boldsymbol{k}} = 0$ für $\xi_{\boldsymbol{k}} > 0$, beschreibt den Fermisee im normalleitenden Zustand. Die Selbstkonsistenzgleichung ist gegeben durch

$$\begin{aligned}\Delta_{\boldsymbol{k}} &= -\sum_{\boldsymbol{l}} V_{\text{eff}}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{l})\langle c_{-\boldsymbol{l}\downarrow} c_{\boldsymbol{l}\uparrow}\rangle \overset{(5.43)}{=} -\sum_{\boldsymbol{l}} V_{\text{eff}}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{l}) u_{\boldsymbol{l}}^* v_{\boldsymbol{l}} \\ &\overset{(5.44)}{=} -\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{l}} V_{\text{eff}}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{l})\frac{\Delta_{\boldsymbol{l}}}{E_{\boldsymbol{l}}},\end{aligned} \tag{5.59}$$

wobei wir für die Berechnung Erwartungswert des Paarungsterms im Grundzustand $\langle c_{-\boldsymbol{l}\downarrow} c_{\boldsymbol{l}\uparrow}\rangle$ benutzt haben, dass der Grundzustand $|0\rangle$ das Vakuum für die Operatoren $\beta_{\boldsymbol{k}}$ darstellt mit $\beta_{\boldsymbol{k}}|0\rangle = 0$.

Zur Beschreibung der Supraleitung brauchen wir eine anziehende Wechselwirkung. Wie wir zuvor schon gesehen haben, wird das effektive Elektron-Elektron Potential V_{eff} anziehend für Energieüberträge mit $|\xi_{\boldsymbol{k}} - \xi_{\boldsymbol{l}}| < \hbar\omega_D$. Um die Selbstkonsistenzgleichung lösen zu können, machen wir die stärkere Annahme, dass V_{eff} anziehend ist, falls $|\xi_{\boldsymbol{k}}|$ und $|\xi_{\boldsymbol{l}}|$ beide kleiner als $\hbar\omega_D$ sind. Zudem ersetzen wir die Wechselwirkung in diesem Bereich durch eine Konstante, d. h. $V_{\text{eff}}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{l}) = -g\,\Theta(\hbar\omega_D - |\xi_{\boldsymbol{k}}|)\,\Theta(\hbar\omega_D - |\xi_{\boldsymbol{l}}|)/\Omega$, $g > 0$.[12] Es ist einfach zu sehen, dass für dieses Model die Selbstkonsistenzgleichung durch $\Delta_{\boldsymbol{k}} = \Delta\,\Theta(\hbar\omega_D - |\xi_{\boldsymbol{k}}|)$ gelöst wird. Setzen wir die Ansätze für $\Delta_{\boldsymbol{k}}$ und V_{eff} in die Selbstkonsistenzgleichung ein und kürzen den gemeinsamen Faktor $\Delta \neq 0$, erhalten wir[13]

$$\begin{aligned}1 &= \frac{g}{2\Omega}\sum_{\substack{\boldsymbol{k}\\ |\xi_{\boldsymbol{k}}|<\hbar\omega_D}} \frac{1}{E_{\boldsymbol{k}}} = \frac{g}{2}\overbrace{\int_{|\xi|<\hbar\omega_D} d\xi \frac{\rho(\xi)}{\sqrt{|\Delta|^2+\xi^2}}}^{\approx\rho_0\int_{|\xi|<\hbar\omega_D} d\xi(\xi^2+|\Delta|^2)^{-1/2}} \\ &\approx g\rho_0\ \text{arsinh}(\hbar\omega_D/|\Delta|);\end{aligned} \tag{5.60}$$

hier bezeichnet $\rho_0 = \rho(0)$ die Zustandsdichte an der Fermikante, welche wir als konstant über den kleinen Integrationsbereich $\simeq \omega_D \ll \varepsilon_F$ angenommen haben. Auflösen nach $|\Delta|$ liefert das Schlussresultat

$$|\Delta| = \frac{\hbar\omega_D}{\sinh(1/\rho_0 g)} \approx 2\hbar\omega_D e^{-1/\rho_0 g} \tag{5.61}$$

[12] Diese Annahmen basieren auf der Arbeit von BCS: wir erwarten, dass die Lösung der Selbstkonsistenzgleichung nicht von der konkreten Form des Potentials abhängt, sondern nur von der typischen Stärke $-g$ und der Abschneideenergie $\hbar\omega_D$.

[13] Die Zustandsdichte ist definiert als $\rho(\xi) = \sum_{\boldsymbol{k}} \delta(\xi - \xi_{\boldsymbol{k}})$. Wir erhalten daher für eine allgemeine Funktion $f(x)$, dass $\sum_{\boldsymbol{k}} f(\xi_{\boldsymbol{k}}) = \int d\xi\, \rho(\xi) f(\xi)$.

wobei wir im letzten Schritt verwendet haben, dass das System typischerweise schwach gekoppelt ist mit $\rho_0 g \simeq 0{,}3$. Gleichung (5.61) bestätigt das Resultat von Cooper, dass jedes beliebig schwache anziehende Potential Elektronen paart und damit eine endliche Energielücke erzeugt.

5.2.5 Kondensationsenergie

Der Eintritt in die supraleitende Phase kommt einher mit einer Absenkung der Grundzustandsenergie, welche man in Analogie zum Gas-Flüssig-Übergang Kondensationsenergie nennt. Mit dem Ausdruck für E_g aus (5.58) und $\sum_{\boldsymbol{k}} b_{\boldsymbol{k}} = |\Delta|\Omega/g$ erhält man die Kondensationsenergiedichte

$$\begin{aligned} u_{\text{kond}} &= \frac{1}{\Omega}[E_g(\Delta) - E_g(\Delta = 0)] \qquad\qquad \rho_0 \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi \, \frac{|\Delta|^2}{\sqrt{|\Delta|^2+\xi^2}} \\ &= \frac{1}{\Omega} \sum_{|\boldsymbol{k}|\geq k_F} (\xi_{\boldsymbol{k}} - E_{\boldsymbol{k}}) + \frac{1}{\Omega} \sum_{|\boldsymbol{k}|\leq k_F} (\overbrace{-\xi_{\boldsymbol{k}}}^{|\xi_{\boldsymbol{k}}|} - E_{\boldsymbol{k}}) + \overbrace{\frac{|\Delta|^2}{g}} \\ &\approx 2\rho_0 \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi \left(\xi - \sqrt{|\Delta|^2+\xi^2} + \frac{|\Delta|^2}{2\sqrt{|\Delta|^2+\xi^2}} \right) \\ &= \rho_0 \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi \, \frac{2\xi\sqrt{|\Delta|^2+\xi^2} - 2\xi^2 - 1}{\sqrt{|\Delta|^2+\xi^2}} \\ &= \rho_0 \xi \left(\xi - \sqrt{|\Delta|^2+\xi^2} \right) \Big|_{\xi=0}^{\hbar\omega_D} \\ &\overset{\hbar\omega_D \gg |\Delta|}{\approx} -\tfrac{1}{2}\rho_0 |\Delta|^2. \end{aligned} \tag{5.62}$$

5.2.6 Zustandsdichte

Wir haben die gesehen, dass die fermionischen Quasiteilchen $\beta^\dagger_{\boldsymbol{k}}$, welche welche die Anregungen über dem supraleitenden Grundzustand beschreiben, in einem eins zu eins Zusammenhang mit den Elektronenanregungen $c^\dagger_{\boldsymbol{k}}$ im Metall stehen. Diese Erkenntnis erlaubt es und die Zustandsdichte der Bogoliubov Quasiteilchen $\rho_s(E)$ mit der Zustandsdichte ρ_0 im Normalzustand in Zusammenhang zu bringen, $\rho_s(E) = \sum_{\boldsymbol{k}} \delta(E - E_{\boldsymbol{k}}) = (d\xi/dE) \sum_{\boldsymbol{k}} \delta(\xi - \xi_{\boldsymbol{k}}) = (d\xi/dE)\rho_0$. Dies führt auf das einfache Resultat (die Quasiteilchenanregungen genügen dem Spektrum $E = \sqrt{|\Delta|^2+\xi^2}$)

$$\frac{\rho_s(E)}{\rho_0} = \frac{d\xi}{dE} = \begin{cases} \frac{E}{\sqrt{E^2-|\Delta|^2}} & E > |\Delta|, \\ 0 & E < |\Delta|, \end{cases} \tag{5.63}$$

mit einer divergierenden Zustandsdichte oberhalb der Energielücke. Beachte, dass aufgrund des obengenannten Zusammenhangs zwischen den Anregungen im supraleitenden und normalleitenden Zustand die integrierte Zustandsdichte gleich ist. Beim

Eintritt in den supraleitenden Zustand werden einfach die Zustände mit Energie unterhalb der Energielücke über die Energielücke transferiert, was zu der Divergenz führt.

5.2.7 Herleitung der London-Gleichungen

Mit der BCS Gleichung und ihrer Lösung haben wir gesehen, dass eine anziehende Elektron-Elektron Potential zu einer Energielücke führt und sich damit die Gesamtenergie des Systems um die Kondensationsenergie absenkt. Es ist soweit aber nicht klar, dass es sich bei dem neuen Zustand mit $|\Delta| > 0$, um einen supraleitenden Zustand handelt. Wir habe schon gesehen, dass die London-Gleichungen eine phänomenologischen Beschreibung (Meißner-Ochsenfeld Effekt, perfekte Leitfähigkeit) eines Supraleiters liefern. Wir werden daher jetzt zeigen, dass die Antwort der Quasiteilchen in BCS auf ein externes Magnetfeld, genau auf die London-Gleichung führt, und damit der Zustand auch wirklich ein Supraleiter ist.

Wir beschreiben das konstante Magnetfeld $\boldsymbol{H}$ durch ein Vektorpotential $\boldsymbol{A}$ mit $\boldsymbol{H} = \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A}$. Wir wählen dabei die London-Eichung $\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{A} = 0$. Das magnetische Feld verschiebt den kanonischen Impuls, so dass der kinetische Term die Form $(\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A}/c)^2/2m$ annimmt, dabei vernachlässigen wir Effekte auf Grund des Zeeman Terms. In erster Ordnung in $\boldsymbol{A}$ führt dies auf den Störterm[14]

$$\begin{aligned} H_A &= \frac{e}{mc} \int d^3r \sum_\sigma \Psi_\sigma^\dagger(\boldsymbol{r}) \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{p} \Psi_\sigma(\boldsymbol{r}) = \frac{e\hbar}{mc} \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{k}\, c_{\boldsymbol{k}\sigma}^\dagger c_{\boldsymbol{k}\sigma} \\ &= \frac{e\hbar}{mc} \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{k}\, \beta_{\boldsymbol{k}\sigma}^\dagger \beta_{\boldsymbol{k}\sigma}. \end{aligned} \tag{5.64}$$

Im nächsten Schritt wollen wir die Stromdichte $\boldsymbol{j} = -ne\boldsymbol{v} = \langle \boldsymbol{j}_p \rangle + \langle \boldsymbol{j}_A \rangle$ berechnen. Die beiden Terme $\boldsymbol{j}_p$ und $\boldsymbol{j}_A$ bezeichnen dabei den paramagnetischen und diamagnetischen Stromdichteoperator entsprechend dem Ausdruck $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{p}/m + e\boldsymbol{A}/mc$ für die Geschwindigkeit der Teilchen. Der diamagnetische Strom gibt das einfache Resultat

$$\langle \boldsymbol{j}_A \rangle = -\frac{e^2 \boldsymbol{A}}{mc} \frac{1}{\Omega} \underbrace{\left\langle \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma}^\dagger c_{\boldsymbol{k}\sigma} \right\rangle}_{N} = -\frac{ne^2}{mc} \boldsymbol{A}, \tag{5.65}$$

was genau der London-Gleichung entspricht solange wir n als supraleitende Teilchendichte n_s interpretieren. Allerdings ist in Gleichung (5.65) n immer die Gesamtteilchendichte.

[14] Wir verwenden, dass $c_{\boldsymbol{k}\uparrow}^\dagger c_{\boldsymbol{k}\uparrow} - c_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^\dagger c_{-\boldsymbol{k}\downarrow} = (u_{\boldsymbol{k}} \beta_{\boldsymbol{k}\uparrow}^\dagger + v_{\boldsymbol{k}}^* \beta_{-\boldsymbol{k}\downarrow})(u_{\boldsymbol{k}}^* \beta_{\boldsymbol{k}\uparrow} + v_{\boldsymbol{k}} \beta_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^\dagger) - (-v_{\boldsymbol{k}}^* \beta_{\boldsymbol{k}\uparrow} + u_{\boldsymbol{k}} \beta_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^\dagger)(-v_{\boldsymbol{k}} \beta_{\boldsymbol{k}\uparrow}^\dagger + u_{\boldsymbol{k}}^* \beta_{-\boldsymbol{k}\downarrow}) = \beta_{\boldsymbol{k}\uparrow}^\dagger \beta_{\boldsymbol{k}\uparrow} - \beta_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^\dagger \beta_{-\boldsymbol{k}\downarrow}$.

Um den Gesamtstrom $\boldsymbol{j}$ zu erhalten müssen wir noch den paramagnetischen Anteil zur Stromdichte $\langle \boldsymbol{j}_p \rangle$ bestimmen mit dem Stromoperator

$$\boldsymbol{j}_p = -\frac{e\hbar}{m}\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \boldsymbol{k} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma} = -\frac{e\hbar}{m}\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \boldsymbol{k}\, \beta^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}\beta_{\boldsymbol{k}\sigma}. \tag{5.66}$$

Der Störterm H_A verändert die Energie der Teilchen mit Impuls $\boldsymbol{k}$ um $e\hbar \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{k}/mc$. Bei $T = 0$ sind alle Zustände mit negativer Energie besetzt und wir erhalten

$$\begin{aligned}\langle \beta^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}\beta_{\boldsymbol{k}\uparrow}\rangle - \langle \beta^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\beta_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\rangle &= \Theta(-E_{\boldsymbol{k}} - e\hbar\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{k}/mc) - \Theta(-E_{\boldsymbol{k}} + e\hbar\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{k}/mc)\\ &= -\frac{2e\hbar\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{k}}{mc}\delta(E_{\boldsymbol{k}})\end{aligned} \tag{5.67}$$

bis zur ersten Ordnung in $\boldsymbol{A}$. Einsetzen dieses Resultat in Gleichung (5.64) liefert

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{j}_p\rangle &= \frac{2e^2\hbar^2}{m^2c}\overbrace{\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\delta(E_{\boldsymbol{k}})}^{\rho_s(0)\langle\cdot\rangle_{S^2}}\overbrace{(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{k})}^{\propto\cos\theta}\overbrace{\boldsymbol{k}}^{\propto\cos\theta}\\ &= \frac{2e^2\hbar^2}{m^2c}\rho_s(0)k_F^2\underbrace{\langle\cos^2\theta\rangle_{S^2}}_{1/3}\boldsymbol{A} = \frac{ne^2}{mc}\underbrace{\frac{4\varepsilon_F\rho_s(0)}{3n}}_{\rho_s(0)/\rho_0}\boldsymbol{A}\end{aligned} \tag{5.68}$$

wobei θ der Winkel zwischen $\boldsymbol{k}$ und $\boldsymbol{A}$ ist und $\langle\cdot\rangle_{S^2}$ den Mittelwert über die Einheitskugel darstellt. Die Summe der paramagnetischen und diamagnetischen Terme liefert das Endresultat

$$\boldsymbol{j} = -\frac{n_s e^2}{mc}\boldsymbol{A} \tag{5.69}$$

mit der superflüssigen Dichte

$$n_s = n[1-\rho_s(0)/\rho_0] = \begin{cases} n & |\Delta| > 0,\\ 0 & \Delta = 0.\end{cases} \tag{5.70}$$

Für endliche Temperaturen führt der Schwanz der Fermi-Dirac Verteilung dazu, dass $n_s = n(1-e^{-|\Delta|/k_BT})$ solange $|\Delta| \gg k_BT$. Der Phasenübergang befindet sich genau an dem Punkt mit $n_s = 0$.

Beachte, dass es im Normalzustand überhaupt keinen Meißner-Ochsenfeld Effekt gibt, da sich der paramagnetische und der diamagnetische Strom genau aufheben. Der Ursprung der paramagnetischen Antwort im Normalleiter liegt an der Tatsache, dass ein Vektorpotential $\boldsymbol{A}$ dazu führt, dass sich die Fermikugel im Impulsraum verschiebt, was zu einem nichtverschwindenden $\langle\boldsymbol{p}\rangle$ führt. Für den Supraleiter sind die Teilchen im Zustand mit $\langle\boldsymbol{p}\rangle = 0$ kondensiert. An der Fermifläche sind zudem keine Quasiteilchen vorhanden, welche auf ein angelegtes Magnetfeld reagieren könnten, so dass die reine diamagnetische Antwort, welche immer vorhanden ist, übrigbleibt.

Kapitel 6

Relativistische Teilchen: Dirac Gleichung

Die Quantenmechanik, wie wir sie bisher behandelt haben, basiert auf der nicht-relativistischen Mechanik und kann mit Hilfe des Korrespondenzprinzips motiviert werden. Damit waren wir in der Lage, einen wichtigen Teil der Quantenphysik erfolgreich zu erklären. Interessante und fundamental neue Gesichtspunkte eröffnen sich, wenn wir die Spezielle Relativitätstheorie in unsere Formulierung der Quantenmechanik miteinbeziehen. Die relativistische Erweiterung der Quantenmechanik ist die Grundlage der Hochenergiephysik.

6.1 Klein-Gordon Gleichung

Die nicht-relativistische Mechanik und Quantenmechanik sind invariant unter Galilei-Transformationen zwischen Inertialsystemen,

$$\boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{x}' = \boldsymbol{x} - \boldsymbol{v}t \qquad \text{und} \qquad t \mapsto t' = t, \tag{6.1}$$

wobei $\boldsymbol{v}$ die Relativgeschwindigkeit ist. Energie und Impuls sind durch die Beziehung $E = p^2/2m$ verknüpft, so dass die Galilei-Transformation auf

$$\boldsymbol{p} \mapsto \boldsymbol{p}' = \boldsymbol{p} - m\boldsymbol{v} \qquad \text{und} \qquad E \mapsto E' = E - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{v} + \tfrac{1}{2}mv^2 = \frac{p'^2}{2m} \tag{6.2}$$

führt, d.h. die Energie ist forminvariant unter Galilei-Transformationen. Das Korrespondenzprinzip besagt, dass

$$E \mapsto i\hbar\partial_t \qquad \text{und} \qquad \boldsymbol{p} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}. \tag{6.3}$$

Die Galilei-invariante Beziehung zwischen Impuls und Energie ergibt die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi, \tag{6.4}$$

welche bis jetzt unsere Grundgleichung war.

Die relativistischen Mechanik ist nicht mehr Galilei- sondern Lorentz-invariant. Eine Lorentz-Transformation von $(t, \boldsymbol{x})$ nach $(t', \boldsymbol{x}')$ lässt die Länge[1] $x_\mu x^\mu = c^2t^2 - x^2 = x'_\mu x'^\mu$ des Vierervektors $x^\mu = (ct, \boldsymbol{x})$ invariant. Der kovariante Vektor x_μ erhält man aus dem kovarianten Vektor x^μ und der Lorentz-Metrik

$$(g_{\mu\nu}) = (g^{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}. \tag{6.5}$$

Auch Energie und Impuls werden in der speziellen Relativitätstheorie zu einem Vierervektor zusammengefasst $p^\mu = (E/c, \boldsymbol{p})$, mit der erhaltenen Länge

$$p_\mu p^\mu = p'_\mu p'^\mu = m^2c^2. \tag{6.6}$$

Dies ist die invariante Energie-Impuls-Beziehung, welche wir verwenden können, um mit dem Korrespondenzprinzip die relativistische Quantenmechanik herzuleiten. Zuerst ersetzen wir p^μ durch einen Differentialoperator

$$p_\mu = i\hbar\partial_\mu. \tag{6.7}$$

Der erste Versuch ergibt den Hamiltonoperator $H = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$, mit der Wellengleichung

$$i\hbar\partial_t\psi = mc^2(1 - \lambda_C^2\nabla)^{1/2}\psi \tag{6.8}$$

mit der Comptonwellenlänge $\lambda_C = \hbar/mc = \alpha a_B \approx 3.8\times10^{-11}$ cm. Dieser Ansatz wirft jedoch schwerwiegende Probleme auf. Zunächst werden Raum und Zeit verschieden behandelt, und beide treten nicht offensichtlich als kovarianter Vierer-Vektor auf. Ein weiteres Problem stellt die Wurzel dar, da wir in der Ableitung $\boldsymbol{\nabla}$ bis zur unendlichen Ordnung entwickeln müssen. Dies bedeutet, dass die Gleichung eine nicht-lokale Theorie beschreibt. Damit wird die Kausalität verletzt, da die rechte Seite der Gleichung den Punkt $\boldsymbol{x}$ durch die Ableitung mit Punkten (instantan) verknüpft, die sich außerhalb des kausalen Lichtkegels befinden. Aus diesen Gründen muss der obige Ansatz verworfen werden. Das Problem der Kovarianz und Nichtlokalität wird auf einen Schlag gelöst, wenn wir vom Quadrat der Energie ausgehen, d.h. $H^2 = m^2c^4 + p^2c^2$ mit der Klein-Gordon-Gleichung

$$-\hbar\partial_t^2\psi = (-\hbar^2c^2\nabla^2 + m^2c^4)\psi \quad \mapsto \quad (\partial_\mu\partial^\mu + \lambda_C^{-2})\psi = 0. \tag{6.9}$$

Eine weiterführende Analyse der Klein-Gordon-Gleichung zeigt, dass obwohl Kausalität garantiert ist, die Gleichung trotzdem noch „Probleme“ aufweist, da der Hamiltonoperator nicht positiv definit ist und es auch keine positiv definite Erhaltungsgrösse (Teilchendichte) gibt. Dies ist allerdings nicht wirklich ein Problem,

[1] Wir benutzten in diesem Kapitel die einsteinsche Summenkonvention, welche besagt, dass über doppelt vorkommende Indizes summiert wird.

da man diesen Sachverhalt so interpretieren, dass die Dichte einer Ladungsdichte $e\rho$ entspricht, und daher Teilchen positiver und negativer Energie unterschiedliche Ladung haben. Damit gilt die Kontinuitätsgleichung für die Ladungs-, aber nicht für die Teilchendichte. Die Klein-Gordon-Gleichung führt einen neuen Aspekt in die Quantenmechanik ein, der sich zuerst einmal durch den Zusammenbruch der Einteilchentheorie manifestiert. In quantenmechanischen Prozessen kann die Teilchenzahl sich verändern, während die Gesamtladung erhalten bleibt. Da kündigt sich das Konzept an, dass für jedes Teilchen ein entsprechendes Antiteilchen existiert, das die Ladung und die Energie mit umgekehrtem Vorzeichen besitzt. Tatsächlich eignet sich die Klein-Gordon-Gleichung dafür, bosonische Teilchen, wie etwa die π-Mesonen, zu beschreiben, bei denen Teilchen und Antiteilchen äquivalent sind.

6.2 Dirac Gleichung

Die einfachste relativistische Gleichung die wir bis jetzt konstruiert haben, die Klein-Gordon Gleichung, hat folgende Eigenschaften: sie ist

- skalar,
- kovariant,
- 2^{ter} Ordnung in der Zeit,
- und hat eine nicht positiv definite Norm, womit der Hamilton H nicht hermitesch ist.

Im folgenden schrauben wir unsere Ambitionen höher und versuchen eine Theorie zu konstruieren basierend auf einem Hamiltonoperator mit folgenden Eigenschaften: der Hamiltonoperator

- darf tensoriell sein,[2]
- soll kovariant sein,
- soll 1^{te} Ordnung in der Zeit sein,
- soll auf eine positiv definite Norm führen so dass wir einen hermiteschen Hamiltonoperator H erhalten.

Der allgemeinste Ansatz für einen Hamiltonoperator mit diesen Eigenschaften (linear in ∂_t und kovariant impliziert Linearität im Raum, d. h. in $\boldsymbol{\nabla}$) hat die Form

$$i\hbar\partial_t\Psi \;=\; H\Psi = \left(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + \beta mc^2\right)\Psi, \tag{6.10}$$

[2]Die Einschränkung auf eine eine skalare Theorie produziert kein Resultat.

mit Ψ ein (Dirac) Spinor mit n Komponenten, $\boldsymbol{\alpha}$, β sind $n \times n$ Matrizen, hermitesch und dimensionslos; der Impuls ist wie üblich definiert, $\boldsymbol{p} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}/\hbar$. Unsere Aufgabe ist es, n, $\boldsymbol{\alpha}$ und β so zu finden, dass (6.10) die übliche relativistische Dispersion

$$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4 \tag{6.11}$$

reproduziert. Dazu quadrieren wir die Gleichung gemäß

$$\begin{aligned} E^2\Psi \mapsto -\hbar^2\partial_t^2\Psi &= i\hbar\partial_t \left(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + \beta mc^2\right)\Psi \\ &= \left(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + \beta mc^2\right) i\hbar\partial_t\Psi \\ &= \left(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + \beta mc^2\right)^2\Psi \\ &\stackrel{!}{=} \left(p^2c^2 + m^2c^4\right)\Psi. \end{aligned} \tag{6.12}$$

Demnach muss gelten

$$\begin{aligned} \left(c\alpha_i p^i + \beta mc^2\right)\left(c\alpha_j p^j + \beta mc^2\right) &= \underbrace{c^2\alpha_i^2 (p^i)^2}_{c^2p^2} \\ &+ \underbrace{\beta^2 m^2c^4}_{m^2c^4} + \underbrace{\left(\alpha_i\beta + \beta\alpha_i\right)p^i mc^3}_{0} + \underbrace{\frac{1}{2}\left(\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i\right)_{i\neq j} p^i p^j c^2}_{0} \end{aligned} \tag{6.13}$$

Damit erhalten wir die Bedingungen

$$\alpha_i^2 = I_n, \qquad \beta^2 = I_n, \tag{6.14}$$

$$\{\alpha_i, \beta\} = 0, \qquad \{\alpha_i, \alpha_j\}_{i\neq j} = 0, \tag{6.15}$$

wobei $\{\cdot,\cdot\}$ wie üblich den Antikommutator bezeichnet. Wir brauchen also vier hermitesche, antikommutierende Matrizen deren Quadrate I_n ergeben. Es stellt sich heraus, dass diese Bedingungen nur erfüllt werden können falls $n \geq 4$ ist. Zum Beweis bemerkt man, dass

1. Der Anti-Komutator $\{\alpha_i, \beta\} = 0$ impliziert, dass $\beta\alpha_i\beta = -\alpha_i$ und damit ist $\operatorname{tr}\alpha_i = -\operatorname{tr}[\beta\alpha_i\beta] = -\operatorname{tr}[\beta^2\alpha_i] = -\operatorname{tr}\alpha_i$ und damit ist $\operatorname{tr}\alpha_i = 0$. Ebenso folgt aus $\alpha_i\beta\alpha_i = -\beta$, dass $\operatorname{tr}\beta = 0$, also sind alle vier Matrizen α_i, β spurlos.

2. Die vier Matrizen α_i und β haben Eigenwerte ± 1, denn α_i, β sollen hermitesch sein, also auch diagonalisierbar; da $\alpha_i^2 = \beta^2 = I_n$ müssen die Quadrate der Eigenwerte gleich 1 sein.

3. Es muss n gerade sein, $n = 2m$, mit $m \in \mathbb{N}$, denn mit $\operatorname{tr}\alpha_i = 0, \operatorname{tr}\beta = 0$ müssen die Eigenwerte 1 und -1 paarweise auftreten.

4. Schließlich muss $n > 2$ sein, denn eine hermitesche Matrix hat eine reelle Hauptdiagonale und komplex konjugierte Elemente symmetrisch zur Hauptdiagonalen,

also finden wir folgende Anzahl Freiheitsgrade

$$\underbrace{n}_{\text{reelle HD}} + \underbrace{2}_{\text{komplex}} \cdot \underbrace{(n^2-n)}_{\text{nichtdiag.}} \underbrace{/\ 2}_{\text{symm.}} = n^2; \tag{6.16}$$

zusätzlich ist $\mathrm{tr} = 0$ und es bleiben $n^2 - 1$ Freiheitsgrade. Für $n = 2$ können wir drei unabhängige hermitesche Matrizen finden, z. B. die Paulimatrizen σ_i,

$$\left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right] = [\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3] \ = \ \boldsymbol{\sigma}. \tag{6.17}$$

mit $\sigma_i^2 = I_2$ und den Vertauschungsregeln $\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 0$.

Für $n = 4$ finden wir 15 unabhängige Matrizen mit Spur 0; davon wählen wir die Matrizen,

$$\begin{aligned}
\beta &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix}; \\
\alpha_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{pmatrix}; \\
\alpha_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{pmatrix}; \\
\alpha_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_3 \\ \sigma_3 & 0 \end{pmatrix};
\end{aligned} \tag{6.18}$$

mit den verlangten Eigenschaften $\beta^2 = \alpha_i^2 = I_4$ und $\{\alpha_i, \alpha_j\} = 0$, $\{\alpha_i, \beta\} = 0$.

Damit erhalten wir die Dirac-Gleichung in der Form

$$i\hbar\partial_t\Psi = \left(-i\hbar c\alpha_i\partial_{x_i} + \beta mc^2\right)\Psi, \tag{6.19}$$

mit dem Dirac 4^{er} Spinor

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_i \\ \vdots \\ \Psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi \\ \eta \end{pmatrix}, \tag{6.20}$$

und den 2^{er} Spinoren χ und η.

Die kovariante Form der Dirac-Gleichung erhalten wir indem wir (6.19) mit β multiplizieren und die Dirac Matrizen

$$\begin{aligned}\gamma^\mu &= \left(\beta, \beta\alpha^i\right), \\ \gamma^0 &= \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix}, \\ \gamma^i &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix},\end{aligned} \tag{6.21}$$

definieren; die Dirac Matrizen sind durch folgende Antikommutatoren charakterisiert[3],

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} I_n, \tag{6.22}$$

mit $g^{\mu\nu}$ dem metrischen Tensor. Aus (6.19) wird dann (wir setzen wiederum $\hbar = c = 1$ für kovariante Formeln; es ist $\partial_\mu = \partial_{x^\mu}$)

$$\left(i\gamma^\mu \partial_\mu - m\right)\, \Psi(x) = 0. \tag{6.23}$$

Wir verwenden die einsteinsche Summenkonvention und führen die Notation des „slash“ Operators ein, $\not{a} = \gamma^\mu a_\mu$; damit vereinfacht sich (6.23) nochmals zu

$$\left(i\not{\partial}_x - m\right)\, \Psi(x) = 0. \tag{6.24}$$

(6.24) ist kovariant wenn Ψ unter Lorentztransformationen so transformiert, dass im neuen System die identische Gleichung vorliegt. Diese Bedingung definiert das Verhalten von $\Psi \in \mathcal{H}$ (dem Hilbertraum der Zustände) unter Lorentztransformationen und definiert damit eine 4-dimensionale Darstellung der Lorentzgruppe in $\mathcal{H}$: Zu $\Lambda \in \mathcal{L}$ eine Lorentztransformation existiert eine Darstellungsmatrix $S(\Lambda)$, so dass

$$\begin{aligned}\Psi'(x') &= S(\Lambda)\Psi(x), \\ x' &= \Lambda x,\end{aligned} \tag{6.25}$$

die Wellenfunktion im neuen (gestrichenen) Koordinatensystem ist. Die Kovarianz verlangt dann, dass

$$\left(i\gamma^\mu \partial'_\mu - m\right) \Psi'(x') = 0 \tag{6.26}$$

erfüllt ist. (6.26) legt die Darstellung $S(\Lambda)$ der Lorentzgruppe fest: Mit

$$\begin{aligned}x'^\mu &= \Lambda^\mu{}_\nu\, x^\nu \\ \partial'_\mu &= \left(\Lambda^{-1}\right)^\nu{}_\mu\, \partial_\nu\end{aligned} \tag{6.27}$$

[3]Ein Set γ^ν von Dirac Matrizen ist konsistent, wenn (6.19) erfüllt ist.

und

$$S^{-1}(\Lambda)\left(i\gamma^{\mu}\left(\Lambda^{-1}\right)^{\nu}{}_{\mu}\partial_{\nu}-m\right\}S(\Lambda)\Psi(x)\stackrel{!}{=}\left(i\gamma^{\mu}\partial_{\mu}-m\right)\Psi=0.$$

muss $S(\Lambda)$ folgende Bedingungen erfüllen,

$$\begin{aligned}\left(\Lambda^{-1}\right)^{\nu}{}_{\mu}S^{-1}(\Lambda)\gamma^{\mu}S(\Lambda)&=\gamma^{\nu},\\ \Rightarrow\quad S^{-1}(\Lambda)\gamma^{\mu}S(\Lambda)&=\Lambda^{\mu}{}_{\nu}\gamma^{\nu}.\end{aligned}\tag{6.28}$$

Mit Hilfe von (6.28) können wir die Darstellung $S(\Lambda)$ bestimmen. Wir geben hier das Endresultat ohne Beweis an. Eine infinitesimale Lorentz-Transformation ist charakterisiert durch $\epsilon^{\mu}{}_{\nu}$ mit $\Lambda^{\mu}{}_{\nu}=\delta^{\mu}{}_{\nu}+\epsilon^{\mu}{}_{\nu}$. Multiplizieren wir diese Beziehung mit $g^{\mu\lambda}$ erhalten wir

$$\Lambda^{\mu\lambda}=g^{\mu\lambda}+\epsilon^{\mu\lambda}.\tag{6.29}$$

Eine Lorentz Transformation ist dadurch charakterisiert, dass sie die Metrik invariant lässt, d. h. $g_{\mu\nu}=\Lambda^{\sigma}{}_{\mu}g_{\sigma\tau}\Lambda^{\tau}{}_{\nu}$ oder in Matrixschreibweise $g=\Lambda^{T}g\Lambda$. Dies führt auf die folgende Bedingung für die infinitesimale Transformation,

$$g_{\mu\nu}=g_{\mu\nu}+\epsilon^{\sigma}{}_{\mu}g_{\sigma\nu}+g_{\mu\tau}\epsilon^{\tau}{}_{\nu}+O(\epsilon^{2})\quad\Rightarrow\quad 0=\epsilon^{\sigma}{}_{\mu}g_{\sigma\nu}+g_{\mu\tau}\epsilon^{\tau}{}_{\nu}.\tag{6.30}$$

Das heben der Indizes μ und ν führt auf die Beziehung $0=\epsilon^{\nu\mu}+\epsilon^{\mu\nu}$, d.h. ϵ ist ein antisymmetrischer Tensor in μ und ν. Die Lorentz-Transformation, welche Λ entspricht, ist gegeben durch

$$S(\epsilon^{\mu\nu})=I_{n}-\frac{i}{4}\sigma_{\mu\nu}\epsilon^{\mu\nu}\tag{6.31}$$

mit

$$\sigma_{\mu\nu}=\frac{i}{2}(\gamma_{\mu}\gamma_{\nu}-\gamma_{\nu}\gamma_{\mu})=\frac{i}{2}[\gamma_{\mu},\gamma_{\nu}].\tag{6.32}$$

Einsetzen in (6.28) liefert[4]

$$S^{-1}(\epsilon^{\nu\lambda})\gamma^{\mu}S(\epsilon^{\nu\lambda})=\gamma^{\mu}+\frac{i}{4}[\sigma_{\nu\lambda},\gamma^{\mu}]\epsilon^{\nu\lambda}+O(\epsilon^{2}).\tag{6.33}$$

Um die Kovarianz der Dirac-Gleichung zu zeigen, benötigen wir

$$\begin{aligned}\frac{2}{i}[\sigma^{\nu\lambda},\gamma^{\mu}]&=\overbrace{[[\gamma^{\nu},\gamma^{\lambda}]}^{-2g^{\nu\lambda}+2\gamma^{\nu}\gamma^{\lambda}},\gamma^{\mu}]=2[\gamma^{\nu}\gamma^{\lambda},\gamma^{\mu}]=2\gamma^{\nu}\{\gamma^{\lambda},\gamma^{\mu}\}-2\{\gamma^{\nu},\gamma^{\mu}\}\gamma^{\lambda}\\&=4g^{\lambda\mu}\gamma^{\nu}-4g^{\nu\mu}\gamma^{\lambda}.\end{aligned}\tag{6.34}$$

Wir benutzen dieses Resultat in (6.33) und erhalten

$$\begin{aligned}S^{-1}(\epsilon^{\nu\lambda})\gamma^{\mu}S(\epsilon^{\nu\lambda})&=\gamma^{\mu}+\frac{i}{4}[\sigma_{\nu\lambda},\gamma^{\mu}]\epsilon^{\nu\lambda}=\gamma^{\mu}-\frac{1}{2}(\gamma_{\nu}\epsilon^{\nu\mu}-\gamma_{\lambda}\epsilon^{\mu\lambda})\\&=(\delta^{\mu}{}_{\nu}+\epsilon^{\mu}{}_{\nu})\gamma^{\nu}=\Lambda^{\mu}{}_{\nu}\gamma^{\nu}.\end{aligned}\tag{6.35}$$

[4]Beachte, dass für eine infinitesimale Transformation $S^{-1}(\epsilon^{\mu\nu})=S(-\epsilon^{\mu\nu})$, da $S^{-1}(\epsilon^{\mu\nu})S(\epsilon^{\mu\nu})=(I_{n}+\frac{i}{4}\sigma_{\mu\nu}\epsilon^{\mu\nu})(I_{n}-\frac{i}{4}\sigma_{\mu\nu}\epsilon^{\mu\nu})=I_{n}+O(\epsilon^{2})$.

Damit ist gezeigt, dass das S in (6.31) die Bedingung (6.28) erfüllt und die Dirac-Gleichung mit dieser Wahl Lorentz-invariant ist.

Es ist wichtig zu erkennen, dass die Transformationsmatrix $S(\epsilon^{\mu\nu})$ nicht unitär ist. Aus der Tatsache, dass γ^μ hermitesch ist für $\mu = 0$ und anti-hermitesch sonst, ergibt sich $\gamma^0(\gamma^\mu)^\dagger\gamma^0 = \gamma^\mu$ und damit

$$\gamma^0(\sigma^{\mu\nu})^\dagger\gamma^0 = -\frac{i}{2}\gamma^0[(\gamma^\nu)^\dagger, (\gamma^\mu)^\dagger]\gamma^0 = \frac{i}{2}[\gamma^0(\gamma^\mu)^\dagger\gamma^0, \gamma^0(\gamma^\nu)^\dagger\gamma^0] = \sigma^{\mu\nu}.$$

Mit dieser Relation erhalten wir die verallgemeinerte Unitaritätsbeziehung (bis zur ersten Ordnung in ϵ)

$$\begin{aligned} S^\dagger(\epsilon^{\mu\nu})\gamma^0 S(\epsilon^{\mu\nu}) &= (I_n + \frac{i}{4}\sigma^\dagger_{\mu\nu}\epsilon^{\mu\nu})\gamma^0(I_n - \frac{i}{4}\sigma_{\mu\nu}\epsilon^{\mu\nu}) \\ &= \gamma^0 + \frac{i}{4}\underbrace{\sigma^\dagger_{\mu\nu}\gamma^0}_{\gamma^0\sigma^{\mu\nu}}\epsilon^{\mu\nu} - \frac{i}{4}\gamma^0\sigma_{\mu\nu}\epsilon^{\mu\nu} = \gamma^0 \end{aligned} \tag{6.36}$$

oder anders geschrieben $\gamma^0 S^\dagger \gamma^0 = S^{-1}$.

Schließlich wollen wir noch die elektromagnetische Wechselwirkung berücksichtigen, was wir durch die Substitution

$$-i\hbar\,\partial^\mu = p^\mu \to p^\mu - eA^\mu \tag{6.37}$$

erreichen,

$$i\hbar\partial_t\Psi \;=\; H\Psi = \left[c\alpha_i\left(-i\hbar\partial_{x_i} - eA_i/c\right) + e\phi + \beta mc^2\right]\Psi, \tag{6.38}$$

oder in kovarianter Notation mit $\hbar = c = 1$,

$$\left[\gamma^\mu\left(i\partial_\mu - eA_\mu\right) - m\right]\,\Psi(x) = 0. \tag{6.39}$$

6.3 Erhaltene Norm

Seien Ψ_a und Ψ_b Lösungen der Dirac-Gleichung, die wir mit dem entsprechenden Spinor wie folgt multiplizieren,

$$\begin{aligned} &\Psi_a^\dagger\cdot\left(i\hbar\partial_t\Psi_b = H\Psi_b\right), \\ &\left(-i\hbar\partial_t\Psi_a^\dagger = (H\Psi_a)^\dagger\right)\cdot\Psi_b. \end{aligned} \tag{6.40}$$

Die Subtraktion der beiden Gleichungen ergibt

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t(\Psi_a^\dagger\Psi_b) &= \Psi_a^\dagger H\Psi_b - (H\Psi_a)^\dagger\Psi_b \\ &= \frac{\hbar}{i}\,\alpha_i\Psi_a^\dagger(\overrightarrow{\partial}_{x_i} + \overleftarrow{\partial}_{x_i})\Psi_b \\ &= \frac{\hbar}{i}\,\partial_{x_i}(\Psi_a^\dagger\,\alpha_i\Psi_b) \end{aligned} \tag{6.41}$$

und wir erhalten

$$\partial_t(\Psi_a^\dagger \Psi_b) + \partial_{x_i}(\Psi_a^\dagger \, \alpha_i \Psi_b) = 0, \tag{6.42}$$

oder, nach Einschieben von Einsen unter Berücksichtigung von $I_n = \beta^2 = (\gamma^0)^2$ und $\alpha_i = \beta\,\beta\alpha_i = \gamma^0\gamma^i$,

$$\partial_\mu \left(\overline{\Psi_a}\gamma^\mu \Psi_b\right) = 0; \tag{6.43}$$

dabei haben wir die Dirac-Adjungierte

$$\overline{\Psi_a} \equiv \Psi_a^\dagger \gamma^0 \tag{6.44}$$

definiert. Die Integration über die Raumkoordinaten unter Berücksichtigung der Randbedingungen ($\int d^3r\, \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{j} = \int d\sigma\, \boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{n} = 0$) ergibt uns die erhaltene Größe

$$\begin{aligned} \text{konst.} &= \int d^3r\ \overline{\Psi_a}\gamma^0\Psi_b \\ &= \int d^3r\ \Psi_a^\dagger\Psi_b \ = \ \langle \Psi_a, \Psi_b\rangle. \end{aligned} \tag{6.45}$$

(6.45) definiert eine Norm, $\|\Psi\| = \langle\Psi,\Psi\rangle \geq 0$.

Beachte: Die Größe $\Psi^\dagger\Psi = \overline{\Psi}\gamma^0\Psi$ ist kein Skalar unter Lorentztransformation, sondern die 0^{te} Komponente des 4^{er} Vektors

$$\rho^\mu = \overline{\Psi}\gamma^\mu\Psi. \tag{6.46}$$

Die Dichte ρ^μ transformiert wie ein 4^{er} Vektor:

$$\begin{aligned} \rho'^\mu(x') &= \overline{\Psi'}(x')\gamma^\mu\Psi'(x') \\ &= \overline{\Psi}(x)\underbrace{S^{-1}(\Lambda)\gamma^\mu S(\Lambda)}_{(6.28)\to\Lambda^\mu_\nu\gamma^\nu}\Psi(x) \\ &= \Lambda^\mu_\nu\rho^\nu(x), \end{aligned} \tag{6.47}$$

wobei wir benutzt haben, dass

$$\begin{aligned} \overline{\Psi'}(x') &= \Psi^{\dagger\prime}(x')\gamma^0 = \Psi^\dagger(x)S^\dagger\gamma^0 \\ &= \underbrace{\Psi^\dagger(x)\gamma^0}\underbrace{\gamma^0 S^\dagger\gamma^0} \\ &= \quad \overline{\Psi}(x) \quad\ S^{-1}. \end{aligned} \tag{6.48}$$

6.4 Freie Teilchen

Wir machen den (Block-) Ansatz[5],

$$\Psi_{\boldsymbol{p}}^{(\pm)}(\boldsymbol{r};t) = N_p\, e^{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\mp E_p t)/\hbar} \begin{pmatrix}\chi\\ \eta\end{pmatrix}, \tag{6.49}$$

mit χ, η zwei 2^{er} Spinoren, dem Impuls $\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$, $\boldsymbol{k} = 2\pi\boldsymbol{n}/L$ und $E_p > 0$. Einsetzen in die Dirac-Gleichung (6.19) ergibt

$$\pm E_p \begin{pmatrix}\chi\\ \eta\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mc^2 & c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} \\ c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} & -mc^2\end{pmatrix} \begin{pmatrix}\chi\\ \eta\end{pmatrix}. \tag{6.50}$$

Die Säkulardeterminante ist

$$(mc^2 \mp E_p)(-mc^2 \mp E_p) - c^2(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})^2, \tag{6.51}$$

und wir erhalten Lösungen falls die Dispersion

$$E_p^2 = c^2p^2 + m^2c^4 \tag{6.52}$$

erfüllt ist, wobei wir benützt haben, dass $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})^2 = \sigma_i^2 p_i^2 + \{\sigma_i, \sigma_j\}p_i p_j/2 = \sigma_i^2\, p_i^2 = I_2\, p_i^2 = p^2$. Für die Eigenvektoren erhalten wir

$$\begin{aligned} +: \eta &= \left(\frac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E_p + mc^2}\right)\chi, \\ -: \chi &= -\left(\frac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E_p + mc^2}\right)\eta, \end{aligned} \tag{6.53}$$

und mit $\chi^\dagger\chi \equiv 1$, sowie $\eta^\dagger\eta \equiv 1$ erhalten wir für die Normierung[6]

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{\boldsymbol{p}}^{(+)} \Psi_{\boldsymbol{p}}^{(+)} \rangle \;=\; 1 &= N_p^2 \Omega \chi^\dagger \left(1, \frac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E_p + mc^2}\right) \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E_p + mc^2}\end{pmatrix} \chi \\ &= N_p^2 \Omega \left(1 + \frac{c^2p^2}{(E_p + mc^2)^2}\right) \\ &= N_p^2 \Omega \left(1 + \frac{E_p^2 - m^2c^4}{(E_p + mc^2)^2}\right) \\ &= N_p^2 \Omega \frac{2E_p}{E_p + mc^2} \end{aligned} \tag{6.54}$$

und dasselbe Resultat gilt für $\Psi_{\boldsymbol{p}}^{(-)}$.

Um diese aufwändige Schreibweise zu vereinfachen geht man zu den Dirac-Spinoren über.

[5] Trotz der positiv semidefiniten Norm $\|\cdot\| \geq 0$ ist werden wir Lösungen mit negativen Energien finden.

[6] Das Resultat ist nicht Lorentz-kovariant, da $\|\cdot\|$ kein Skalar sondern die 0-Komponente eines 4-er Vektors ist.

6.4.1 Dirac-Spinor

Die freien Lösungen der Dirac Theorie lassen sich mir der Definition der Dirac-Spinoren

$$u(\boldsymbol{p},s) \equiv \sqrt{E_p + mc^2} \begin{pmatrix} 1 \\ \dfrac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E_p+mc^2} \end{pmatrix} \chi^{(s)},$$
$$v(\boldsymbol{p},s) \equiv \sqrt{E_p + mc^2} \begin{pmatrix} \dfrac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E_p+mc^2} \\ 1 \end{pmatrix} (-i\sigma_2\chi^{(s)}), \tag{6.55}$$

einfach ausgedrückt durch

$$\Psi^{(+)}_{\boldsymbol{p},s}(\boldsymbol{r};t) = \frac{1}{\sqrt{2E_p\Omega}}\, u(\boldsymbol{p},s)\, e^{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-E_pt)/\hbar},$$
$$\Psi^{(-)}_{-\boldsymbol{p},-s}(\boldsymbol{r};t) = \frac{1}{\sqrt{2E_p\Omega}}\, v(\boldsymbol{p},s)\, e^{-i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-E_pt)/\hbar}. \tag{6.56}$$

Der 2^{er} Spinor $\chi^{(s)}$ beschreibt den Spin eines Spin-1/2-Teilchens,

$$\chi^{1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$
$$\chi^{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \tag{6.57}$$

ebenso beschreibt $-i\sigma_2\chi^{(s)}$ einen Spin, allerdings ist

$$-i\sigma_2\chi^{(1/2)} = \eta^{(1/2)} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$
$$-i\sigma_2\chi^{(-1/2)} = \eta^{(-1/2)} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{6.58}$$

und $\eta^{(s)}$ beschreibt ein down (up)-Spin für $s = 1/2$ $(= -1/2)$, gerade umgekehrt zu $\chi^{(s)}$,

$$\chi^{(s)} \propto \eta^{(-s)}. \tag{6.59}$$

6.5 Interpretation

Die Dirac-Gleichung besitzt wiederum Lösungen mit negativer Energie, siehe $\Psi^{(-)}_{-\boldsymbol{p},-s}$ in (6.56). Zusätzlich zur Komponenten-Struktur $\binom{\chi}{\eta}$, welche wir auch für die Klein-Gordon-Gleichung gefunden und als Teilchen-Antiteilchen-Paar interpretiert haben, besitzt die Dirac-Gleichung eine 2^{er} Spinor Struktur in χ und η. Diese Spinor-Struktur

interpretieren wir als den Spinzustand eines Spin-1/2 Teilchens. Damit beschreibt $\Psi^{(+)}_{\boldsymbol{p},s}$ ein Teilchen mit Impuls $\boldsymbol{p}$ nd Spin s, während der Zustand $\Psi^{(-)}_{-\boldsymbol{p},-s}$ mit Impuls $-\boldsymbol{p}$ und Spin $-s$ ein Anti-Teilchen mit Impuls $\boldsymbol{p}$ und Spin s beschrieben. Die Zustände $\Psi^{(+)}$ und $\Psi^{(-)}$ sind orthogonal, denn

$$v^\dagger(-\boldsymbol{p},s')\cdot u(\boldsymbol{p},s) = u^\dagger(\boldsymbol{p},s)\cdot v(-\boldsymbol{p},s') \;=\; 0 \tag{6.60}$$

und damit ist

$$\begin{aligned}
&\int d^3r\; \Psi^{(-)\dagger}_{\boldsymbol{p},-s'}\Psi^{(+)}_{\boldsymbol{p},s'} = \int \frac{d^3r}{2E_p\Omega}\, e^{-i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}+E_pt)/\hbar} v^\dagger(-\boldsymbol{p},s')\cdot u(\boldsymbol{p},s)\, e^{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-E_pt)/\hbar}\\
&= \frac{1}{2E_p}\, e^{-2iE_pt/\hbar}\, v^\dagger(-\boldsymbol{p},s')\cdot u(\boldsymbol{p},s)\\
&= \frac{E_p+mc^2}{2E_p}\, e^{-2iE_pt/\hbar}\, \eta^{(s')\dagger} \underbrace{\left(\frac{-c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E_p+mc^2},1\right)\begin{pmatrix}1\\ \dfrac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E_p+mc^2}\end{pmatrix}}_{0}\chi^{(s)}.\\
&= 0.
\end{aligned} \tag{6.61}$$

Beachte, dass andere Kombinationen mit $\boldsymbol{p}\neq\boldsymbol{p}'$ wegen $\int d^3r\,\cdots = 0$ verschwinden, aber für $\Psi^{(-)\dagger}\Psi^{(+)}$ ergibt sich $\int d^3r\cdots = \Omega$.

Schließlich bilden die freien Lösen ein vollständiges System,

$$\sum_{\boldsymbol{p},s}\left(\Psi^{(+)}_{\boldsymbol{p},s}(\boldsymbol{r})\Psi^{(+)\dagger}_{\boldsymbol{p},s}(\boldsymbol{r}\,') + \Psi^{(-)}_{\boldsymbol{p},s}(\boldsymbol{r})\Psi^{(-)\dagger}_{\boldsymbol{p},s}(\boldsymbol{r}\,')\right) = \begin{pmatrix}-I_2 & 0\\ 0 & -I_2\end{pmatrix}\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'). \tag{6.62}$$

Die Antiteilchen erhalten wir wiederum durch Ladungskonjugation.

6.5.1 Ladungs-Konjugation C

Die Ladungskonjugation

$$C:\ \Psi\to\Psi^C \;=\; C\beta\Psi^* \tag{6.63}$$

mit

$$C = -i\alpha_2 \;=\; \begin{pmatrix}0 & -i\sigma_2\\ -i\sigma_2 & 0\end{pmatrix} \tag{6.64}$$

transformiert Zustände mit negativer Energie in solche mit positiver Energie, welche einer Dynamik mit umgekehrter Ladung gehorchen: Mit

$$i\hbar\Psi = \left[c\,\alpha_i\,(-i\hbar\partial_{x_i} - eA_i/c) + e\phi + \beta mc^2\right]\Psi \tag{6.65}$$

gilt durch komplex-Konjugation und Multiplikation mit $C\,\beta$:

$$\begin{aligned} -i\hbar\partial_t\Psi^C &= C\beta\left[c\,\alpha_i^*\left(i\hbar\partial_{x_i} - eA_i/c\right) + e\phi + \beta mc^2\right]\Psi^* \\ \downarrow C\beta\alpha_i^*\Psi^* &= \underbrace{C\beta C^{-1}}_{-\beta}\underbrace{C\alpha_i^* C^{-1}}_{-\alpha_i}\underbrace{C\beta C^{-1}}_{-\beta}\underbrace{C\beta\Psi^*}_{\Psi^C} \\ &= -\beta\alpha_i\beta\Psi^C = \alpha_i\Psi^C, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \downarrow C\beta^2\Psi^* &= \underbrace{C\beta C^{-1}}_{-\beta}\underbrace{C\beta\Psi}_{\Psi^C} = -\beta\Psi^C, \\ &= \left[c\,\alpha_i\left(i\hbar\partial_{x_i} - eA_i/c\right) + e\phi - \beta mc^2\right]\Psi^C, \end{aligned} \tag{6.66}$$

und damit folgt Ψ^C der Dynamik

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\Psi^C &= \left[c\,\alpha_i\left(-i\hbar\partial_{x_i} + eA_i/c\right) - e\phi + \beta mc^2\right]\Psi^C, \\ &= H(-e)\Psi^C. \end{aligned} \tag{6.67}$$

Auch bildet die Ladungskonjugation C die Zustände $\Psi^{(-)}_{-\boldsymbol{p},-s}$ auf $\Psi^{(+)}_{\boldsymbol{p},s}$ ab, denn

$$\begin{aligned} C\beta v^*(\boldsymbol{p},s) &= \sqrt{E_p + mc^2}\begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_2 \\ -i\sigma_2 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \dfrac{c\boldsymbol{\sigma}^*\cdot\boldsymbol{p}}{E_p+mc^2} \\ -1 \end{pmatrix}\left(-i\sigma_2\chi^{(s)}\right) \\ &= \sqrt{E_p + mc^2}\begin{pmatrix} 1 \\ \dfrac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E_p+mc^2} \end{pmatrix}\chi^{(s)} = u(\boldsymbol{p},s). \end{aligned} \tag{6.68}$$

Dabei haben wir verwendet, dass $\sigma_2\boldsymbol{\sigma}^*\sigma_2 = -\boldsymbol{\sigma}$. Analog zu (6.68) ist

$$C\beta u^*(\boldsymbol{p},s) = v(\boldsymbol{p},s). \tag{6.69}$$

Entsprechend finden wir, dass

$$\Psi^{(-)C}_{-\boldsymbol{p},-s} = C\beta\Psi^{(-)*}_{-\boldsymbol{p},-s} = \Psi^{(+)}_{\boldsymbol{p},s}, \tag{6.70}$$

und wir identifizieren den (+) Energiezustand $\Psi^{(-)C}_{-\boldsymbol{p},-s}$, welcher der $-e$-Dynamik gehorcht als Anti-Teilchen mit identischer Masse und Spin und mit Impuls $\boldsymbol{p}$ und Spinkomponente s:

$\Psi^{(+)}_{\boldsymbol{p},s}$ = Teilchen mit $E_p > 0$, Impuls $\boldsymbol{p}$ und Spin s,

$\Psi^{(-)}_{-\boldsymbol{p},-s}$ = Zustand mit $E_p < 0$, Impuls $-\boldsymbol{p}$ und Spin $-s$, interpretiert als Anti-Teilchen mit $E_p > 0$, Impuls $\boldsymbol{p}$ und Spin s.

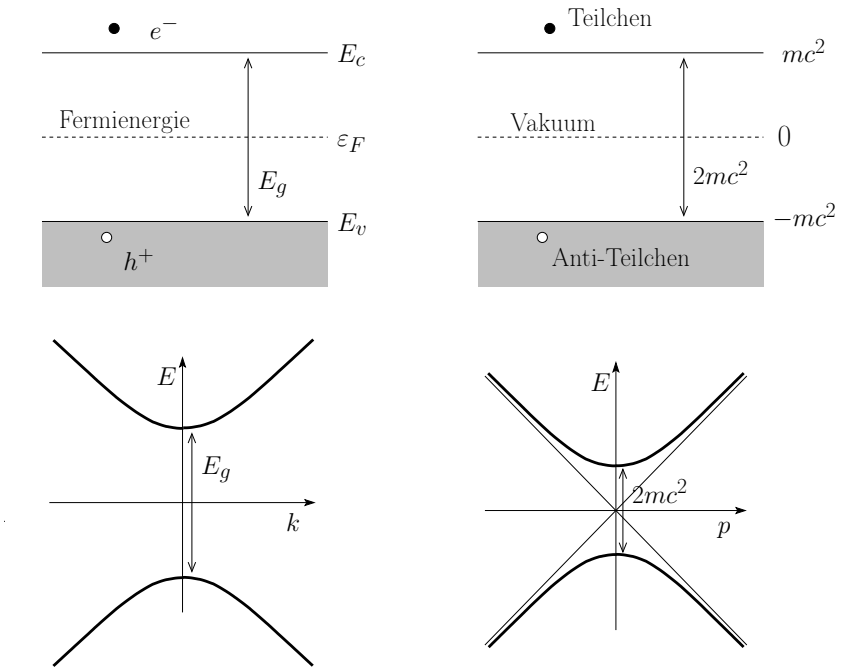


Abbildung 6.1: Links: Leitungs- und Valenzband (oben) und Dispersion (unten) der Elektronen in einem Halbleiter mit direkter Energielücke (z. B. GaAs, ZnO, ...). Die Anregungen (fehlende Elektronen) im Valenzband werden als Löcher interpretiert. Rechts: Lochtheorie der Dirac-Gleichung. Die Zustände mit negativer Energie sind gefüllt und blockieren den Zerfall von Zuständen positiver Energie. Die Anregungen mit negativer Energie werden als Anti-Teilchen interpretiert.

Da diese Teilchen Fermionen sind gilt das Pauli-Ausschlussprinzip und wir können eine interessante Interpretation geben, welche für die bosonischen Klein-Gordon-Teilchen nicht möglich war:

Interpretieren wir das physikalische Vakuum als mit negativ-Energiezuständen gefüllt, dann sind die $E_p > 0$ Zustände der Pauli-Blockierung wegen stabil. Damit hat der niedrigste Zustand die Energie mc^2 und nicht $-\infty$. Der Zustand $\Psi^{(-)}_{-\boldsymbol{p},-s}$ beschreibt die Absenz des Teilchens mit gleicher Masse und gleichem Spin, aber, da es ein Loch ist, inverser Ladung. Seine Energie ist

$$0 - (-E) = \underbrace{0}_{\text{Vakuum Energie}} \overbrace{-}^{\text{Teilchen fehlt}} \underbrace{(-E)}_{\text{En. des Teilchens}} = E > 0, \tag{6.71}$$

sein Impuls $0 - (-\boldsymbol{p}) = \boldsymbol{p}$ und sein Spin $0 - (-s) = s$. Diese Lochtheorie der Diracgleichung ist die relativistische Verallgemeinerung der Lochtheorie in Halbleitern, wie in Abbildung 6.1 gezeigt.

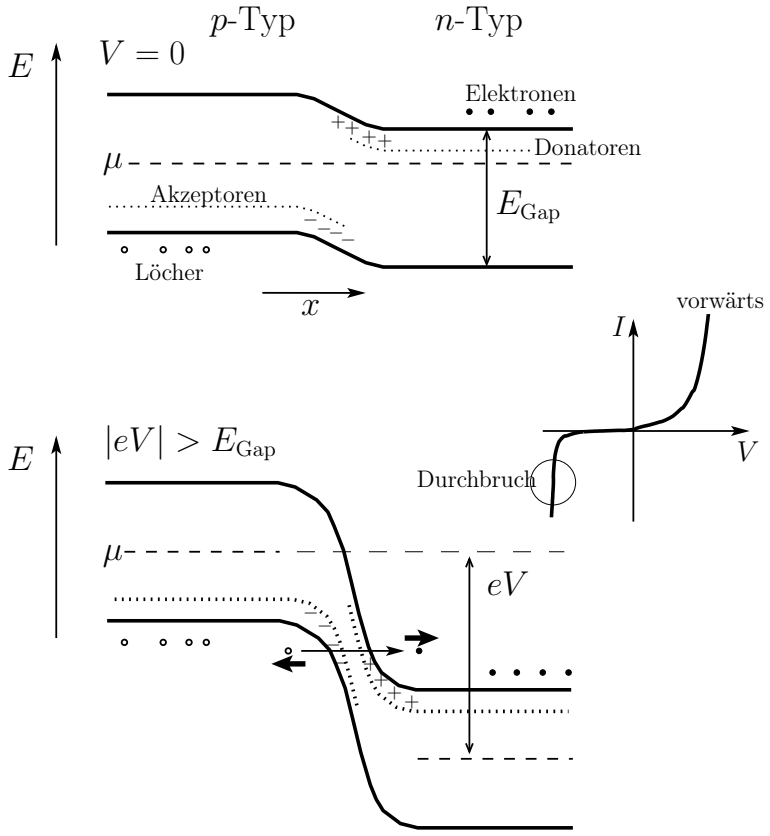


Abbildung 6.2: Elektron-Loch Paarerzeugung im elektrischen Feld eines p–n Halbleiter Übergangs. Oben: Situation im Gleichgewicht ohne angelegte Spannung, $V = 0$. Unten: Situation im rückwärts polarisierten p–n Übergang im Durchbrucksregime wo Teilchen-Loch Paare via Tunnelprozess erzeugt werden. Vgl. dazu die Strom-Spannungs Charakteristik der p–n Diode.

Weiter ist es interessant, das kleinsche Paradox (Streuung an einer Potentialstufe) für Fermionen zu diskutieren (obwohl die Paarerzeugung erst in einer Vielteilchenphysik wirklich Sinn macht). Man findet folgende Resultate: 1) für $eV > 2mc^2$ werden sowohl Bosonen als auch Fermionen total reflektiert. 2) Bei Fermionen kann aufgrund des Pauliprinzips kein Paar das reflektierte Teilchen begleiten. 3) Reflektierte Bosonen können von weiteren Bosononpaaren begleitet werden (stimulierte Emission im Kanal des reflektierten Bosons). 4) Bei Fermionen können Teilchen-Anti-Teilchen Paare spontan produziert werden. Als Pendant finden zur spontanen Elektron-Positron (e^-–e^+) Paarerzeugung im starken elektrischen Feld erwähnen wir die Teilchen-Loch Paarproduktion via Tunneleffekt an einem Halbleiter p–n-Übergang im Durchbruchsgebiet, siehe Abbildung 6.2.

6.6 Nichtrelativistischer Grenzfall

Wir wollen den nichtrelativistischen Grenzfall bis zur Ordnung p^4/m^3, das heißt $p^2/2m \cdot (v/c)^2$, also inklusive erster, relativistischer Korrekturen herleiten. Es ist $p^2/2m \simeq e\phi \ll mc^2$. Der einfachste Weg funktioniert leider nicht: zuerst betrachten wir eine Lösung

$$\Psi = \begin{pmatrix} \chi \\ \eta \end{pmatrix} e^{-iEt/\hbar} \tag{6.72}$$

mit $E > 0$, $\chi = \chi(\boldsymbol{r})$ und $\eta = \eta(\boldsymbol{r})$. Mit $E = T + mc^2$ können wir schreiben

$$\begin{aligned} T\chi &= e\phi\chi + c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}/e)\,\eta, \\ (2mc^2 + T)\eta &= e\phi\eta + c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}/c)\,\chi. \end{aligned} \tag{6.73}$$

Die zweite Gleichung gibt

$$\eta = \frac{1}{2mc^2 + T - e\phi} c\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}/c)\chi \tag{6.74}$$

und einsetzen in (6.73) führt auf

$$T\chi = \Big[e\phi + c\boldsymbol{\sigma} \cdot \big(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}/e\big) \frac{1}{2mc^2 + T - e\phi} c\boldsymbol{\sigma} \cdot \big(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}/e\big)\Big]\chi. \tag{6.75}$$

Wollen wir bis Ordnung p^4/m^3 gehen, so müssen wir den Nenner entsprechend entwickeln und erhalten

$$\begin{aligned} T\chi = \Big[&(e\phi + \frac{1}{2m}\Big[\boldsymbol{\sigma} \cdot \big(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}/c\big)\Big]^2 - \frac{1}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma} \cdot \big(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}/c\big) \\ &\times \big(T - e\phi\big)\boldsymbol{\sigma} \cdot \big(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}/c\big)\Big]\chi = H(\text{Energie})\chi. \end{aligned} \tag{6.76}$$

Die Abhängigheit von T auf der rechten Seite gefällt uns nicht da sie uns einen energieabhängigen Hamiltonoperator aufzwingt. Deshalb ersetzen wir T durch die niedrigste Approximation

$$T \approx e\phi + \frac{1}{2m}\left[\boldsymbol{\sigma} \cdot \big(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}/c\big)\right]^2. \tag{6.77}$$

Dieser Schritt is aber nicht eindeutig; denn die Reihenfolge $(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}/c)(T - e\phi)$ erzeugt einen Term $\boldsymbol{p}\, e\phi \propto e\boldsymbol{E}$, während der Ausdruck $T - e\phi \approx \left[\boldsymbol{\sigma} \cdot \big(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}/c\big)\right]^2/2m$ mit $\boldsymbol{\sigma} \cdot \big(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}/c\big)$ vertauscht. Alternativ kann man den Faktor $\boldsymbol{\sigma} \cdot \big(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}/c\big)$ zuerst mit $(T - e\phi)$ kommutieren und erst dann (6.77) verwenden, allerdings ist auch dieses Vorgehen nicht eindeutig und erzeugt zudem noch nicht hermitesche Terme.

Ein eindeutiger nichtrelativistischen Grenzfall lässt sich mit der Foldy-Wouthuysen-Transformation konstruieren, einer unitären Transformation, welche die nichtdiagonalen Terme klein macht. Im transformierten System können wir dann das gekoppelte

Gleichungssystem lösen. Wir starten von der Dirac-Gleichung in der Form

$$\begin{aligned} T\begin{pmatrix}\chi\\ \eta\end{pmatrix} &= \left[-mc^2 + e\phi + c\boldsymbol{\alpha}\cdot(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}/c) + mc^2\beta\right]\begin{pmatrix}\chi\\ \eta\end{pmatrix} \\ &= H\begin{pmatrix}\chi\\ \eta\end{pmatrix} \qquad (6.78) \\ &\widehat{=} mc^2\left[-1 + \left(\frac{v}{c}\right)^2 + \left(\frac{v}{c} - \left(\frac{v}{c}\right)^2\right) + 1\right]\begin{pmatrix}\chi\\ \eta\end{pmatrix}; \qquad (6.79) \end{aligned}$$

die letzte Gleichung listet die Ordung der Terme im relativistischen Parameter v/c auf, wobei der Term $c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} \propto v/c$ gross ist. Demgegenüber tauchten in der Klein-Gordon-Gleichung nur Terme $\propto 1,\ (v/c)^2$, weshalb deren nichtrelativistischer Grenzfall unproblematisch war. Es ist gerade der Term $c\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{p} \propto (v/c)mc^2$, welcher uns Mühe bereitet und wir werden ihn wegtransformieren. Dazu setzen wir eine unitäre Transformation der Form

$$U = U^\dagger = \underbrace{\sqrt{1 - \frac{\lambda^2 p^2}{m^2c^2}}}_{\Lambda}\beta + \frac{\lambda}{mc}\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}, \qquad (6.80)$$

mit dem geeignet zu wählenden Parameter λ an; wir werden λ so wählen, dass im transformierten System der Term $c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}$ verschwindet[7]. Wir definieren den transformierten Spinor

$$\begin{pmatrix}\chi'\\ \eta'\end{pmatrix} = U\begin{pmatrix}\chi\\ \eta\end{pmatrix}, \qquad (6.81)$$

transformieren (6.78) mit U,

$$UT\begin{pmatrix}\chi\\ \eta\end{pmatrix} = T\begin{pmatrix}\chi'\\ \eta'\end{pmatrix} \;=\; UHU^{-1}\begin{pmatrix}\chi'\\ \eta'\end{pmatrix}, \qquad (6.82)$$

und erhalten den transformierten Hamiltonoperator

$$H' = UHU^{-1}. \qquad (6.83)$$

[7]Der Ansatz (6.80) definiert tatsächlich eine unitäre Transformation,

$$\begin{aligned} UU^\dagger &= \left(\Lambda\beta + \frac{\lambda}{mc}\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}\right)^2 \\ &= \Lambda^2\beta^2 + \frac{\lambda}{mc}\Lambda\{\beta,\alpha_i\}p_i + \frac{\lambda^2}{m^2c^2}[\{\alpha_i,\alpha_j\}\ p_ip_j/2 + p^2] \\ &= \Lambda^2 + \frac{\lambda^2}{m^2c^2}p^2 = 1. \end{aligned}$$

Wir transformieren die Terme mc^2, $e\phi$, $c\boldsymbol{\alpha}\cdot(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A}/c)$, und $mc^2\beta$ und erhalten

$$
\begin{aligned}
&U\,[mc^2]\,U^{-1} = mc^2, && \text{(a)}\\
&U\,[e\phi]\,U^{-1} = \Lambda\, e\phi\,\Lambda + \beta\frac{\lambda}{mc}\,(\Lambda\, e\phi\,\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} - \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}\, e\phi\,\Lambda) && \text{(b)}\\
&\qquad + \frac{\lambda^2}{m^2c^2}\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}\, e\phi\,\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p},\\
&U\left[c\boldsymbol{\alpha}\cdot\big(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A}/c\big)\right]U^{-1} = \underline{-\Lambda c\,\boldsymbol{\alpha}\cdot(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A}/c)\,\Lambda} && \text{(c)}\\
&\qquad + \beta\frac{\lambda}{m}[\Lambda\,\boldsymbol{\alpha}\cdot(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A}/c)\;\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}\;\boldsymbol{\alpha}\cdot(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A}/c)\,\Lambda] && (6.84)\\
&\qquad + \frac{\lambda^2}{m^2c}\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}\;\boldsymbol{\alpha}\cdot(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A}/c)\,\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p},\\
&U\,[mc^2\beta]\,U^{-1} = mc^2\beta\Lambda^2 + \underline{2\lambda\Lambda c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}} - \beta\lambda^2p^2/m. && \text{(d)}
\end{aligned}
$$

Kritisch sind die (unterstrichenen) nichtdiagonalen Terme von ungerader Ordnung in $\boldsymbol{\alpha}$ und von relativer Ordnung v/c. Mit

$$\Lambda \approx 1 - \frac{\lambda^2p^2}{2m^2c^2} = 1 - \mathcal{O}[(v/c)^2], \tag{6.85}$$

erhalten wir (der Index nd steht für „nichtdiagonal“)

$$
\begin{aligned}
H'_{\mathrm{nd},v/c} &= -c\boldsymbol{\alpha}\cdot\big(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A}/c\big) + 2\lambda c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + \mathcal{O}[(v/c)^3]\\
&\overset{\lambda=1/2}{=} e\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{A} \simeq\ \mathcal{O}[(v/c)^2].
\end{aligned}
\tag{6.86}
$$

Die Gleichung (6.82) erhält dann die Form

$$T\begin{pmatrix}\chi'\\ \eta'\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}H'_{11} & e\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{A}\\ e\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{A} & -2mc^2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\chi'\\ \eta'\end{pmatrix}, \tag{6.87}$$

mit (wir beziehen uns auf (6.84); die Terme $\propto mc^2$ in (a) und (d) kombinieren zu $(-I_4+\beta)mc^2$ und geben keinen Beitrag zu H'_{11} aber den Beitrag $-2mc^2$ zu H'_{22})

$$
\begin{aligned}
H'_{11} \approx\ & \underbrace{e\phi - \frac{p^2}{8m^2c^2}\,e\phi - e\phi\,\frac{p^2}{8m^2c^2}}_{\text{(b): }\Lambda\, e\phi\,\Lambda} + \underbrace{\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\, e\phi\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{4m^2c^2}}_{\text{(b)}} \\
&+ \underbrace{\frac{1}{2m}\big[\boldsymbol{\sigma}\cdot\big(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A}/c\big)\;\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} + \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\;\boldsymbol{\sigma}\cdot\big(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A}/c\big)\big] - \frac{p^4}{8m^3c^2}}_{\text{(c)}} - \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{\text{(d)}}.
\end{aligned}
\tag{6.88}
$$

Der Rest sind Umformungen; mit $\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$ erhält man für den (c)-Term

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{\sigma}\cdot\big(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A}/c\big)\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\;\boldsymbol{\sigma}\cdot\big(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A}/c\big) \qquad (6.89)\\
&\quad = 2p^2-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\;\boldsymbol{\sigma}\cdot(e\boldsymbol{A}/c)-\boldsymbol{\sigma}\cdot(e\boldsymbol{A}/c)\;\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\\
&\quad = 2p^2-(e/c)\big(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}\big)-i(e/c)\boldsymbol{\sigma}\cdot\big[\big(\boldsymbol{p}\wedge\boldsymbol{A}\big)-\big(\boldsymbol{A}\wedge\boldsymbol{p}\big)\big]\\
&\quad = \big(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A}/c\big)^2+p^2-\big(e\boldsymbol{A}/c\big)^2-(e\hbar/c)\boldsymbol{\sigma}\cdot\big(\boldsymbol{\nabla}\wedge\boldsymbol{A}\big)\\
&\quad = \big(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A}/c\big)^2+p^2-(e/c)^2A^2-(e\hbar/c)\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}.
\end{aligned}$$

Die (b)-Terme lassen sich ebenfalls vereinfachen gemäß

$$\begin{aligned}
p^2\phi+\phi p^2 &= (p^2\phi)+2(\boldsymbol{p}\phi)\cdot\boldsymbol{p}+2\phi p^2,\\
\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\;\phi\;\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} &= \boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{p}\phi)\;\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}+\phi p^2\\
&= (\boldsymbol{p}\phi)\cdot\boldsymbol{p}+i\boldsymbol{\sigma}\cdot[(\boldsymbol{p}\phi)\wedge\boldsymbol{p}\,]+\phi p^2
\end{aligned}$$

und wir erhalten

$$\begin{aligned}
&-(e/8m^2c^2)\{p^2\phi+\phi p^2-2\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\;\phi\;\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\,\}\\
&\qquad = -(e/8m^2c^2)\{(p^2\phi)-2i\boldsymbol{\sigma}\cdot[(\boldsymbol{p}\phi)\wedge\boldsymbol{p}\,]\}.
\end{aligned}$$

Einsetzen in (6.88) ergibt den Hamiltonoperator (den diamagnetischen Term $\propto A^2$ erhält man aus $\eta' = (e/2mc^2)\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{A}\;\chi' + \mathcal{O}(v^4/c^4)$)

$$\begin{aligned}
H'_{11}+\frac{e^2}{2mc^2}A^2 = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+e\phi-\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}-\frac{p^4}{8m^3c^2}\\
+\frac{e\hbar^2(\nabla^2\phi)}{8m^2c^2}+\frac{e\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\big[(\boldsymbol{\nabla}\phi)\wedge\boldsymbol{p}\,\big]. \qquad (6.90)
\end{aligned}$$

Die Dynamik eines Spin-1/2 Teilchens im elektromagnetischen Feld $\phi, \boldsymbol{A}$ mit relativistischen Korrekturen bis Ordnung $(v/c)^2$ ergibt sich zu (mit $\phi(\boldsymbol{r}) = \phi(r)$ können wir $\boldsymbol{\nabla}\phi\wedge\boldsymbol{p}$ ersetzen durch $[r^{-1}(\partial_r\phi)\boldsymbol{L}]$

$$\begin{aligned}
H = \underbrace{\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+e\phi}_{H_0}-\underbrace{\frac{1}{2mc^2}\left(\frac{p^2}{2m}\right)^2+\frac{e\hbar}{4m^2c^2}\frac{(\partial_r\phi)}{r}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}+\frac{e\hbar^2\,(\nabla^2\phi)}{8m^2c^2}}_{\text{Feinstruktur}}\\
\underbrace{-\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}}_{\text{Zeeman}}. \qquad (6.91)
\end{aligned}$$

Kombiniert man den orbitalen- und Spin-Zeeman Term erhält man

$$H_{\text{Zeeman}} = -\frac{e}{2mc}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S}), \qquad (6.92)$$

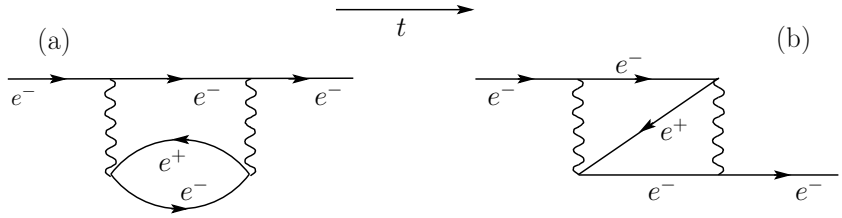


Abbildung 6.3: Feynmandiagramme zur virtuellen Elektron-Loch Paarerzeugung: (a) Vakuumpolarisation (direkter Term) und (b) Zitterbewegung (Austauschterm zur Vakuumpolarisation). Das Elektron verschwindet (via Paarvernichtung) um an einem anderen Ort (via Paarerzeugung) wieder aufzutauchen.

und daraus den gyromagnetischen Faktor des Elektron Spins, $g = 2$. Man kann argumentieren, dass der Darwin Term $\propto \nabla^2\phi$ von der Verschmierung des Elektrons über die Comptonskala[8] $\hbar/mc$ herrührt: Die Mittelung des Potentials

$$\begin{aligned}\langle e\phi(\boldsymbol{r}+\delta\boldsymbol{r})\rangle &\approx \langle e\phi(\boldsymbol{r}) + e\delta\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nabla}\phi(\boldsymbol{r}) + \frac{e}{2}(\delta\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nabla})^2\phi(\boldsymbol{r})\rangle \\ &\approx e\phi(\boldsymbol{r}) + \frac{e}{6}\frac{\hbar^2}{m^2c^2}(\nabla^2\phi),\end{aligned} \tag{6.93}$$

ergibt einen Term der entsprechenden Struktur und Größenordnung. Die entsprechenden Quantenfluktuationen in der Position des Elektrons laufen unter dem Namen „Zitterbewegung“. Unschön ist, dass dieses Argument den Spin nicht involviert, denn die Klein-Gordon-Gleichung zeigt keinen entsprechenden Term.

Eine tiefergehende Analyse zeigt, dass die Zitterbewegung von der Interferenz positiver und negativer Energiezustände her stammt: ein Zustand mit rein positiver (negativer) Energie zeigt keine Zitterbewegung. Die Streuung an einem Potential mischt einem Zustand mit $E > 0$ aber immer Zustände mit $E < 0$ bei. Innerhalb der Lochtheorie wird die Zitterbewegung wie folgt interpretiert: Das Potential mischt einem $E > 0$ Zustand Komponenten mit $E < 0$ bei. Die Interferenz-Effekte, welche zur Zitterbewegung führen, entsprechen virtuellen e^+–e^--Paaren. Das streuende e^- annihiliert das e^+ und das e^- des e^+–e^--Paares übernimmt seine Rolle. Das bedeutet, dass das Elektron springt. Der Prozess wie in Abbildung 6.3 skizziert ist ein Austauschprozess.

Die Ausdehnung der Zitterbewegung findet man mit folgender Abschätzung: Die Lebensdauer Δt des virtuellen e^+–e^--Paares ist durch die Unschärferelation gegeben[9]: $\Delta t \simeq \hbar/2mc^2$, woraus sich die Distanz $\Delta r \simeq c\Delta t \simeq \hbar/mc$ ergibt.

Die Anwendung auf das Wasserstoff Atom $\phi(r) = e/r$ ergibt eine Feinstruktur die nur die Quantenzahlen n und j involviert, obwohl der Darwin-Term nur zum Bahndrehimpuls $l = 0$ und der Spin-Bahn-Term zu $l \neq 0$ beiträgt. Die Kompensation

[8] Die Comptonskala $\hbar/mc$ ist die Längenskala der relativistischen Differentialgleichung.

[9] Gemäß heisenbergschem Unschärfeprinzip ist $\Delta E\,\Delta t \geq \hbar$, wobei ΔE durch die Ruheenergie mc^2 des Elektrons gegeben ist.

dieser Beiträge ergibt dann die Energie

$$T = E_{nj} = -mc^2 \left[\frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} + \frac{(Z\alpha)^4}{2n^4} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right]. \tag{6.94}$$

Anhang A

Sphärische Bessel-Funktionen

A.1 Definition

Die Bessel-Funktionen J_n sind die Lösungen der Differentialgleichung

$$\left[\partial_x^2 + \frac{1}{x}\partial_x + \left(1 - \frac{n^2}{x^2}\right)\right] J_n(x) = 0. \tag{A.1}$$

Für halbzahlige $n = l + \frac{1}{2}$ betrachtet man meistens die äquivalente Differentialgleichung

$$\left[\partial_x^2 + \frac{2}{x}\partial_x + \left(1 - \frac{l(l+1)}{x^2}\right)\right] z_l(x) = 0. \tag{A.2}$$

mit den sphärischen Bessel- und Neumann-Funktionen,

$$\text{Bessel} \to j_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}}\, J_{l+\frac{1}{2}}(x), \tag{A.3}$$

$$\text{Neumann} \to n_l(x) = (-1)^{l+1}\sqrt{\frac{\pi}{2x}}\, J_{-l-\frac{1}{2}}(x). \tag{A.4}$$

als Lösung. Beachte, dass (A.2) unter $l + \frac{1}{2} \mapsto -l - \frac{1}{2}$ symmetrisch ist, und damit die Neumann-Lösungen in die Bessel-Lösungen übergehen. Beispiele für die sphärischen Bessel- und Neumann-Funktionen sind (siehe auch Abbildung A.1 und A.2)

$$\begin{aligned}
j_0 &= \frac{\sin x}{x}, & n_0 &= -\frac{\cos x}{x}, \\
j_1 &= \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}, & n_1 &= -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x}, \\
j_2 &= \left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right)\sin x - \frac{3}{x^2}\cos x, & n_2 &= -\left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right)\cos x - \frac{3}{x^2}\sin x.
\end{aligned} \tag{A.5}$$

Die sphärischen Bessel-Funktionen zeigen folgendes Verhalten für kleine (Reihenent-

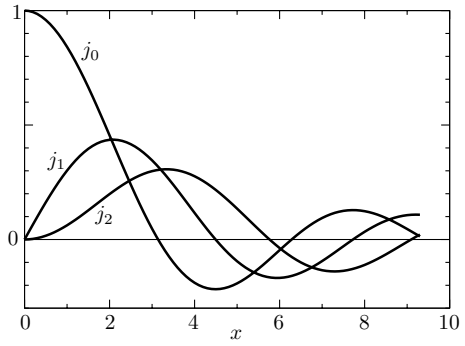


Abbildung A.1: Bessel-Funktionen $j_0(x)$, $j_1(x)$, $j_2(x)$.

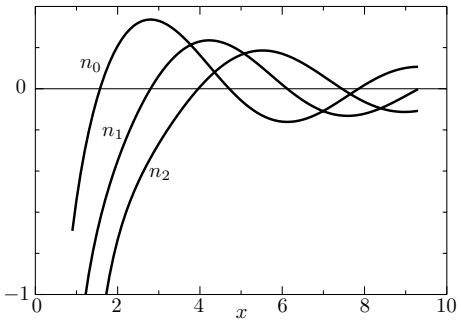


Abbildung A.2: Neumann Funktionen $n_0(x)$, $n_1(x)$, $n_2(x)$.

wicklung für $x \to 0$) und große (Asymptotik für $x \to \infty$) Argumente:

$$\begin{aligned} &x \to 0: && x \to \infty: \\ &j_l \sim \frac{x^l}{(2l+1)!!}, && j_l \sim \frac{1}{x}\cos[x-(l+1)\pi/2], \\ &n_l \sim -\frac{(2l-1)!!}{x^{l+1}}, && n_l \sim \frac{1}{x}\sin[x-(l+1)\pi/2]. \end{aligned} \tag{A.6}$$

wobei $(2l-1)!! = 1\cdot 3\cdot \ldots \cdot (2l-3)\cdot(2l-1) = \frac{(2l)!}{2^l l!}$ die Doppelfakultät bezeichnet. Für die sphärischen Bessel-Funktionen $z_l = j_l, n_l$ gelten zudem die Rekursionsformeln $(l > 0)$

$$\begin{aligned} z_{l-1} + z_{l+1} &= \frac{2l+1}{x}\, z_l, \\ \partial_x z_l &= z_{l-1} - \frac{l+1}{x}\, z_l. \end{aligned} \tag{A.7}$$

Beachte, dass n_l für $x \to 0$ immer singulär ist. Außerdem definieren wir die sphärischen Hankel-Funktionen als Linearkombinationen

$$\begin{aligned} h_l^{(1)}(x) &= j_l(x) + i\, n_l(x), \\ h_l^{(2)}(x) &= j_l(x) - i\, n_l(x), \end{aligned} \tag{A.8}$$

mit dem asymptotischen Verhalten

$$h_l^{(1,2)} \sim \frac{1}{x}\, e^{\pm i[x-(l+1)\pi/2]}. \tag{A.9}$$

A.2 Entwicklung der Ebenen Welle

Die ebene Welle $e^{ikr\cos\theta}$ ist eine Lösung von (1.2) und damit von (1.33) mit $V \equiv 0$. Da wie im letzten Kapitel besprochen, $j_l(x = kr)$ die Differentialgleichung (1.33) löst, können wir für die ebene Welle den Ansatz

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_l A_l\, j_l(kr)\, \underbrace{P_l(\cos\theta)}_{\propto Y_{l0}} \tag{A.10}$$

wählen, welcher die Radial- und Winkelabhängigkeit separiert. Als letztes, müssen wir die Koeffizienten A_l bestimmen. Mit (1.29), d. h. $P_l \perp P_{l'}$, erhalten wir durch Integration unter Ausnutzung der Normierung $\int dz\, P_l(z)^2 = 2/(2l+1)$

$$\frac{2}{2l+1} A_l\, j_l(kr) = \int_{-1}^{1} dz\, P_l(z) e^{ikrz}. \tag{A.11}$$

Wir betrachten $r \to 0$, entwickeln $\exp(ikrz)$ auf der rechten Seite und $j_l(kr)$ auf der linken Seite in $x = kr$ mit anschließendem Koeffizientenverlgeich. Zuerst die rechte Seite: Wir entwickeln $\exp(ikrz)$ und erhalten

$$\int_{-1}^{1} dz\, P_l(z) \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(ikrz)^s}{s!} \approx \int_{-1}^{1} dz\, P_l(z) \frac{(ikrz)^l}{l!}, \tag{A.12}$$

wobei wir benutzt haben, dass im Grenzfall kleiner x nur der Term $s = l$ einen nenneswerten Beitrag liefert [Terme mit $s < l$ geben keinen Beitrag da $P_l \perp z^s = \sum_{i \le s} c_i P_i$; Terme mit $s > l$ geben eine kleine Korrektur von der Ordung $O(x^{l+2})$].

Als Nächstes ersetzen wir z^l durch Legendrepolynome $P_{l'}(z)$ mit $l' \le l$. Unter dem Integral verschwinden Terme mit $l' < l$ (Orthogonalität der Legendrepolynome). Wir haben

$$P_l(z) = \frac{(2l-1)!!}{l!} z^l + O(z^{l-2}). \tag{A.13}$$

für den Term mit $l' = l$, womit wir unter dem Integral z^l durch $l! P_l(z)/(2l-1)!!$ ersetzen können. Schließlich nutzen wir die Normierung von $P_l(z)$ um das Integral über z auszuführen und erhalten

$$\int_{-1}^{1} dz\, P_l(z) \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(ikrz)^s}{s!} \approx \frac{2(ikr)^l}{(2l+1)!!} \tag{A.14}$$

Zur linken Seite: Die Entwicklung von $j_l(x)$ für kleine x ergibt [siehe (A.6)]

$$\frac{2}{2l+1} A_l\, j_l(kr) \approx A_l \frac{2(kr)^l}{(2l+1)(2l+1)!!} \tag{A.15}$$

und der Koeffizientenvergleich liefert uns das gewünschte Resultat

$$A_l = i^l (2l+1). \tag{A.16}$$

Für den allgemeinen Fall mit $\boldsymbol{k}$ und $\boldsymbol{r}$ beliebig können wir das Additionstheorem für Y_{lm} benutzen und $P_l(\cos\vartheta)$ durch die Kugelfunktionen ausdrücken

$$\sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}(\theta,\varphi)Y_{lm}^*(\theta',\varphi') = \frac{2l+1}{4\pi}P_l(\cos\vartheta); \tag{A.17}$$

damit erhalten wir für die ebene Welle den Ausdruck

$$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = 4\pi\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} i^l\, j_l(kr)Y_{lm}^*(\Omega_{\boldsymbol{k}})Y_{lm}(\Omega_{\boldsymbol{r}}). \tag{A.18}$$

Anhang B

Spin- und Bahnrasse

Die Analyse des N Spin-1/2 Fermionproblems ist wichtig für die Diskussion von Atomen und sehr instruktiv im Hinblick auf das Verständnis der Rolle der Permutationssymmetrie. Das Thema ist zudem eine schöne Anwendung der Gruppentheorie. Hier ist ein Versuch das Problem so einfach wie möglich darzustellen. Zuerst werden wir kurz auf die Darstellungstheorie von S_N eingehen. Dann werden wir den Zusammenhang von Spin- und Rasse bei der Ausreduktion von $\mathcal{H}_{1/2}^{\otimes N}$ erläutern.

Das Kapitel führt alle notwendigen Hilfsmittel ein und zeigt und Beispielen, wie man sie benutzt. Die Resultate werden plausibel gemacht. Beweise der Aussagen können z. B. in den Büchern Morton Hamermesh „Group theory and its application to physics problems“ oder Hermann Weyl „The classical groups: their invariants and representations“ nachgelesen werden.

B.1 Symmetrische Gruppe S_N

Die Elemente π der Gruppe S_N sind die Permutationen von N Objekten,

$$\begin{aligned}\pi &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & N \\ \pi(1) & \pi(2) & \cdots & \pi(N) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 2 & 4 & 3 & \cdots \\ \pi(2) & \pi(4) & \pi(3) & \cdots \end{pmatrix}; \end{aligned} \tag{B.1}$$

hier ist π eine Abbildung von $\mathbb{Z}_N$ nach $\mathbb{Z}_N$, welche die obere Zeile auf die untere, das heißt k auf $\pi(k)$, abbildet. Die Inverse der Permutation π ist

$$\pi^{-1} = \begin{pmatrix} \pi(1) & \pi(2) & \cdots & \pi(N) \\ 1 & 2 & \cdots & N \end{pmatrix}. \tag{B.2}$$

Die Gruppe S_N hat $N!$ Elemente, die Ordnung g von S_N ist $N!$.

Eine wichtige klasse von Permutationen sind die k-Zyklen

$$\pi_{(\alpha_1\cdots\alpha_k)} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 & \cdots & \alpha_k & \beta_1 & \cdots \beta_{n-k} \\ \alpha_2 & \alpha_3 & \alpha_4 & \cdots & \alpha_1 & \beta_1 & \cdots \beta_{n-k} \end{pmatrix}; \tag{B.3}$$

$\pi_{(\alpha_1\cdots\alpha_k)}$ wird auch kurz mit $(\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_k)$ bezeichnet; der Zyklus bildet α_1 auf α_2, α_2 auf α_3, $\ldots$, α_k auf α_1 ab und lässt die Elemente β_k, welche nicht im Zyklus involviert sind, invariant. Der einfachste Zyklus ist der Zweierzyklus oder die Vertauschung $\pi_{(\alpha_1\alpha_2)} = (\alpha_1\alpha_2)$, z. B.

$$\pi_{(35)} = (35) = \begin{pmatrix} 3 & 5 & \beta_1 & \cdots & \beta_{n-2} \\ 5 & 3 & \beta_1 & \cdots & \beta_{n-2} \end{pmatrix}. \tag{B.4}$$

Jede Permutation lässt sich aus Vertauschungen aufbauen. Eine Permutation heißt gerade (ungerade), wenn sie aus einer geraden (ungeraden) Anzahl von Vertauschungen aufgebaut werden kann. Wir nennen

$$(-1)^\pi \text{ die Signatur von } \pi, \text{ mit } \begin{cases} (-1)^\pi = 1, & \pi \text{ gerade}, \\ (-1)^\pi = -1, & \pi \text{ ungerade}. \end{cases} \tag{B.5}$$

Die Zerlegung von π in unabhängige Zyklen[1] bestimmt die Äquivalenzklasse der Permutation[2] Zum Beispiel hat S_3 insgesamt drei Äquivalenzklassen: die Identität e bildet (wie immer) eine Äquivalenzklasse, die drei Zweierzyklen $(\alpha_1\alpha_2)$ mit $1 \leq \alpha_1 < \alpha_2 \leq 3$ bilden die zweite Äquivalenzklasse und die zwei Dreierzyklen $(\alpha_1\alpha_2\alpha_3)$ $1 \leq \alpha_1 < \alpha_2 < \alpha_2 \leq 3$ bilden auch eine eigene Äquivalenzklasse.

Im Allgemeinen kann man zweigen, dass π und π' genau dann äquivalent sind, wenn sie die gleiche Zyklenstruktur haben; betrachten wir eine Permutation mit der Zyklenstruktur $3+2$,

$$\pi = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 5 & 3 & 2 & 1 & 4 \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{ccc|cc} 1 & 5 & 4 & 2 & 3 \\ 5 & 4 & 1 & 3 & 2 \end{array}\right) = (1\,5\,4)(2\,3). \tag{B.6}$$

Tatsächlich lässt die Transformation $\nu\pi\nu^{-1}$ mit $\nu \in S_N$ die Zyklenstruktur invariant; wir illustrieren dies am obigen Beispiel mit einem spezifischen ν,

$$\begin{aligned} \nu &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 2 & 4 & 1 & 3 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & 4 & 1 & 3 & 2 \\ 5 & 3 & 2 & 1 & 4 \end{pmatrix} \\ \nu^{-1} &= \begin{pmatrix} 2 & 4 & 1 & 3 & 5 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 5 & 3 & 4 & 1 \\ 1 & 5 & 4 & 2 & 3 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{B.7}$$

[1] das heißt, jede Zahl kommt nur einmal vor.

[2] Zwei Permutationen π und π' sind äquivalent, wenn es ein $\nu \in S_N$ gibt, so dass $\nu\pi\nu^{-1} = \pi'$.

Dann lässt sich $\nu\pi\nu^{-1}$ einfach konstruieren,

$$\nu\pi\nu^{-1} = \begin{pmatrix} 2 & 5 & 3 & 4 & 1 \\ 1 & 5 & 4 & 2 & 3 \\ 5 & 4 & 1 & 3 & 2 \\ 5 & 3 & 2 & 1 & 4 \end{pmatrix} \begin{matrix} \leftarrow & \nu^{-1} \\ \leftarrow & \pi \\ \leftarrow & \nu \end{matrix}$$
$$= \begin{pmatrix} 2 & 5 & 3 & 4 & 1 \\ 5 & 3 & 2 & 1 & 4 \end{pmatrix} = (2\,5\,3)(4\,1), \tag{B.8}$$

und die Zyklenstruktur bleibt erhalten. Dieser Sachverhalt lässt sich allgemein beweisen und damit definiert die Zyklenstruktur ein Äquivalenzkriterium.

Um die Anzahl der Äquivalenzklassen von S_N zu finden brauchen wir demnach alle Zerlegungen von N. Wir nennen $[\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_k] \equiv \lambda$ eine Zerlegung von N, wenn $\lambda_i \geq 1$ ganze Zahlen gemäß $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_k$ sortiert sind und

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_k = N. \tag{B.9}$$

Die Zerlegungen von N ergeben die Äquivalenzklassen von S_N. Für das Beispiel mit $N = 5$ findet man durch einfaches Abzählen 7 Äquivalenzklassen,

$$S_5: \quad \left.\begin{aligned} 5 &= 5 \\ &= 4 + 1 \\ &= 3 + 2 \\ &= 3 + 1 + 1 \\ &= 2 + 2 + 1 \\ &= 2 + 1 + 1 + 1 \\ &= 1 + 1 + 1 + 1 + 1 \end{aligned}\right\} \rightarrow 7 \text{ Klassen.}$$

Die Anzahl irreduzibler Darstellungen von S_N ist gleich der Anzahl K der Klassen. Sei d_i die Dimension der i-ten irreduziblen Darstellung. Dann ist die Gruppenordnung $g = N!$ gegeben durch[3]

$$g = \sum_{i=1}^{K} d_i^2. \tag{B.10}$$

An konkreten Beispielen findet man durch ausprobieren

$$\begin{aligned} S_2: &\qquad K = 2, &&\qquad 2! = 1 + 1, \\ S_3: &\qquad K = 3, &&\qquad 3! = 1 + 1 + 2^2, \\ S_4: &\qquad K = 5, &&\qquad 4! = 24 = 1 + 1 + 2^2 + 3^2 + 3^2, \\ S_5: &\qquad K = 7, &&\qquad 5! = 120 = 1 + 1 + 4^2 + 4^2 + 5^2 + 5^2 + 6^2. \end{aligned}$$

[3] Diese Beziehung zwischen der Gruppenordnung und der Summe der Quadrate der Dimensionen aller irreduzibler Darstellungen gilt im Allgemeinen für eine beliebige endliche Gruppe.

Die beiden eindimensionalen Darstellungen kommen immer vor. Dies sind die antisymmetrische (A) und die symmetrische (S) Darstellung. Sie werden erzeugt durch die (Anti-)Symmetrisierungsoperatoren

$$\mathcal{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\pi \in S_N} (-1)^\pi \pi, \tag{B.11}$$

$$\mathcal{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\pi \in S_N} \pi, \tag{B.12}$$

respektive ihren Darstellungen im Hilbertraum. Wir haben ja schon im Kapitel 2.3 gesehen, dass die Darstellung des (Anti-)Symmetrisierungsoperator auf einen eindimensional Unterraum des Gesamthilbertraums projiziert. Das Anwenden einer beliebigen Permutation π bewirkt auf diesem Raum dann nur noch die Multiplikation mit $(\pm 1)^\pi$. Diese Eigenschaften lassen sich einfach aus den Multiplikationsregeln

$$\pi\mathcal{S} = \mathcal{S}\pi = \mathcal{S} \quad \text{und} \quad \pi\mathcal{A} = \mathcal{A}\pi = (-1)^\pi \mathcal{A} \tag{B.13}$$

herleiten.

B.2 Beispiel: 2 Spin-1/2 Fermionen

Im Studium von N Spin-1/2 Fermion ist die Kernfrage wie Spin, Spinsymmetrie und Bahnsymmetrie zusammenhängen. Zur Einarbeitung in die Thematik analysieren wir das Problem zweier Spin-1/2 Fermionen. Wir separieren die Gesamtwellenfunktion in Spin- und Bahnanteile, $\Psi(x_1, x_2) = \varphi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\, \chi(s_1, s_2)$. Der (totale) Spin legt die Spin-Symmetrie fest,

$$\begin{aligned} S = 1: \qquad & \chi_t = \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \big(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\big)/\sqrt{2}, \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases} \quad \text{symmetrisch unter } S_2, \\ S = 0: \qquad & \chi_s = \big(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\big)/\sqrt{2}, \quad \text{antisymm. unter } S_2. \end{aligned} \tag{B.14}$$

Die Fermion-Antisymmetrie legt die Bahnsymmetrie fest

$$S = 1 \qquad \to \chi_t \text{ symmetrisch} \qquad \to \varphi_{\mathcal{A}} \text{ antisymmetrisch}, \tag{B.15}$$

$$S = 0 \qquad \to \chi_s \text{ antisymmetrisch} \qquad \to \varphi_{\mathcal{S}} \text{ symmetrisch}. \tag{B.16}$$

Der Zusammenhang von Spin und Bahnrasse, welcher aus dem Satz von Weyl und dem paulischen Austauschprinzip folgt, verallgemeinert diesen Sachverhalt für ein System von N Fermionen. Im Allgemeinen werden auch die anderen irreduziblen Darstellungen von S_N auftreten, welche verschieden von den eindimensionalen Darstellungen S und A sind. Der totale Spin legt die Spinsymmetrie (unter Vertauschung mit S_N) und via Pauliprinzip die Bahnsymmetrie (unter S_N) fest. Dabei bezeichnet die Begriffe Spin-

und Bahnrassen die zur irreduziblen Darstellung der Permutationssymmetrie gehörigen „Quantenzahlen“ (gleich wie L die zur irreduziblen Darstellung der Rotationssymmetrie gehörigen Drehimpulsquantenzahl ist). Die Spin- und Bahnrassen bestimmen also gemäß welcher irreduziblen Darstellung von S_N die Spin und die Bahnfunktionen transformieren. Wir nehmen das Resultat der Zerlegung des Hilbertraumes von N Spin-1/2 Teilchen vorweg.

B.3 N Spin-1/2 Teilchen

Für die Zerlegung des Spin-Hilbertraumes von N Teilchen in irreduzible Darstellungen gilt

$$\begin{aligned} \left(\mathcal{H}_{1/2}\right)^{\otimes N} &= \oplus_S \, \mu_S(N) \, \mathcal{H}_S, \qquad S \;=\; \text{Spin-Quantenzahl}, \\ &= \oplus_S \, (2S+1) \, \mathcal{H}_{\mu_S}. \end{aligned} \tag{B.17}$$

Dabei ist $\mathcal{H}_{1/2}$ der zweidimensionale Hilbertraum eines Spin-1/2 Teilchens, $\mathcal{H}_{\mu_S}$ der $\mu_S(N)$-dimensionale Darstellungsraum zur $\mu_S(N)$-dimensionalen irreduziblen Darstellung der Permutationen S_N und $\mathcal{H}_S$ der $(2S+1)$-dimensionale Darstellungsraum zur $(2S+1)$-dimensionalen irreduziblen Darstellung der Drehgruppe $SU(2)$. Der Spin S legt die Spinrasse μ_S fest, bestimmt also gemäß welcher irreduziblen Darstellung von S_N die Spinwellenfunktion transformiert. Kommt der Spin S in der Zerlegung von $\left(\mathcal{H}_{1/2}\right)^{\otimes N}$ $\mu_S(N)$-mal vor, erhalten wir $2S+1$ mal eine $\mu_S(N)$-dimensionale irreduzible Darstellung von S_N, d. h. die irreduzible Darstellung von S_N mit Rasse μ_S kommt gerade $(2S+1)$ mal vor. Weiter legt die Spinrasse μ_S, via der Bedingung der totalen Antisymmetrie für die Gesamtwellenfunktion Ψ, die Bahnrasse μ_B eindeutig fest. Wir erklären und illustrieren dieses Resultat in der Folge. Dazu brauchen wir die irreduziblen Darstellungen von S_N.

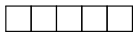
B.4 Irreduzible Darstellungen von S_N

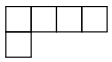
Wir betrachten die Zerlegung der Permutationen in Zyklen, zum Beispiel

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 3 & 1 & 4 \end{pmatrix} &= (1\,2\,3)(4) \\ \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 4 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} &= (1\,4)(2\,3) \\ \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 4 & 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} &= (1\,4\,2\,3) \end{aligned} \tag{B.18}$$

Jede Zerlegung von N definiert eine Äquivalenzklasse von S_N. Zum Beispiel für $N = 5$ finden wir 7 Klassen mit den Zerlegungen $5 = 5,\ 4+1,\ 3+2,\ 3+1+1,\ 2+2+$

$1,\ 2+1+1+1,\ 1+1+1+1+1$. Zu jeder dieser Zerlegungen definieren wir ein Young-Diagramm mit h Zeilen und k Spalten,

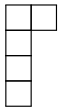
$S_5 : 5 = 5$  $[5]$

$= 4+1$  $[4,1]$

$= 3+2$ $[3,2]$

$= 3+1+1$ $[3,1^2]$

$= 2+2+1$ $[2^2,1]$

$= 2+1+1+1$  $[2,1^3]$

$= 1+1+1+1+1$ $[1^5]$

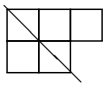
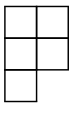
Jede Klasse oder Partition erzeugt eine irreduzible Darstellung von S_N. Zu jeder Partition gehört eine assoziierte Partition,

$$\text{Partition } \lambda \rightarrow \text{assoziierte Partition } \tilde{\lambda} \tag{B.19}$$

und ein assoziiertes Young-Diagramm,

$$\text{Young-Diagramm } Y \rightarrow \text{ assoziiertes Young-Diagramm } \tilde{Y} \tag{B.20}$$

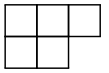
welches durch Vertauschen von Zeilen und Spalten hervorgeht, vergleiche dazu das folgende Beispiel mit der entsprechenden Spiegelachse,

$Y_\lambda \qquad \rightarrow \qquad \tilde{Y}_\lambda = Y_{\tilde{\lambda}}$

$\lambda = [3,2] \qquad \tilde{\lambda} = [2^2,1]$ (B.21)

Zusätzlich zu den Young-Diagrammen definieren wir die Young-Tableaus durch Auffüllen der Young-Diagramme Y mit den Zahlen $1, 2, \ldots N$:



$\Longrightarrow$ θ_λ

$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 4&2&5\\\hline 1&3\\\cline{1-2}\end{array}$ $\rightarrow$ $\begin{array}{|c|c|}\hline 4&1\\\hline 2&3\\\hline 5\\\cline{1-1}\end{array}$

$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4&5\\\cline{1-2}\end{array}$ $\rightarrow$ $\begin{array}{|c|c|}\hline 1&4\\\hline 2&5\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}$

$\tilde{\theta}_\lambda$ assoziiertes Tableau

Zu jedem Young-Tableau definieren wir den Zeilen-Symmetrisierer

$$\mathcal{S}_\lambda = \frac{1}{\lambda_1! \cdots \lambda_h!} \sum_{\pi_\lambda} \pi_\lambda \tag{B.22}$$

und den Antisymmetrisierer

$$\mathcal{A}_\lambda = \frac{1}{\lambda_1! \cdots \lambda_h!} \sum_{\pi_\lambda} (-1)^{\pi_\lambda} \pi_\lambda. \tag{B.23}$$

Dabei permutiert π_λ nur Elemente innerhalb aber nicht zwischen den Zeilen, d. h. jeder Zyklus in π_λ enthält Elemente aus nur einer Zeile. Als Beispiel betrachten wir das $\lambda = [3, 2]$ Tableau[4]

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4&5\\\cline{1-2}\end{array}\,. \tag{B.24}$$

$\mathcal{S}_\lambda$ ist gegeben durch

$$\begin{aligned}\mathcal{S}_\lambda = \frac{1}{3!\,2!}\big[&(1)(2)(3)(4)(5) + (12)(3)(4)(5) + (1)(23)(4)(5)\\ &+ (13)(2)(4)(5) + (23)(1)(4)(5)\\ &+ (123)(4)(5) + \text{ alle mit } (45)\big]\end{aligned} \tag{B.25}$$

Es ist $\mathcal{S}_{\lambda=[N]} = \mathcal{S}$, $\mathcal{A}_{\lambda=[N]} = \mathcal{A}$. Die assoziierten Symmetrisierer permutieren Elemente in den Spalten,

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{S}}_\lambda &= \frac{1}{\tilde{\lambda}_1! \cdots \tilde{\lambda}_k!} \sum_{\tau_\lambda} \tau_\lambda,\\ \tilde{\mathcal{A}}_\lambda &= \frac{1}{\tilde{\lambda}_1! \cdots \tilde{\lambda}_k!} \sum_{\tau_\lambda} (-1)^{\tau_\lambda} \tau_\lambda;\end{aligned} \tag{B.26}$$

[4] Für das $\lambda = [3, 2]$ Tableau ist $\lambda_1 = 3$ und $\lambda_2 = 2$.

die Permutationen τ_λ lassen die Spalten des Young-Tableau θ_λ invariant, d. h. τ_λ permutiert nur Elemente innerhalb der Spalten. Im obigen Beispiel wird aus $\lambda = [3,2]$ neu $\tilde{\lambda} = [2^2, 1]$ und

$$\tilde{\mathcal{S}}_\lambda = \frac{1}{2!\,2!\,1!}\big[(1)(2)(3)(4)(5) + (14)(2)(3)(5) + (14)(25)(3) + (1)(4)(25)(3)\big].$$

Es ist $\tilde{\mathcal{S}}_{\lambda=[1^N]} = \mathcal{S}$, $\tilde{\mathcal{A}}_{\lambda=[1^N]} = \mathcal{A}$.

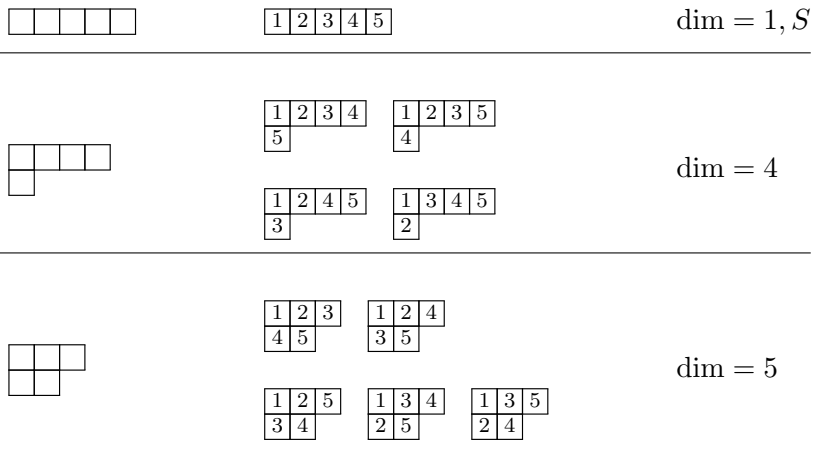
Die irreduziblen Symmetrisierer

$$\begin{aligned} i_\lambda &= \mathcal{S}_\lambda \tilde{\mathcal{A}}_\lambda \quad \text{(irreduzibler Symmetrisierer)} \\ j_\lambda &= \tilde{\mathcal{A}}_\lambda \mathcal{S}_\lambda \quad \text{(irreduzibler Antisymmetrisierer)} \end{aligned} \tag{B.27}$$

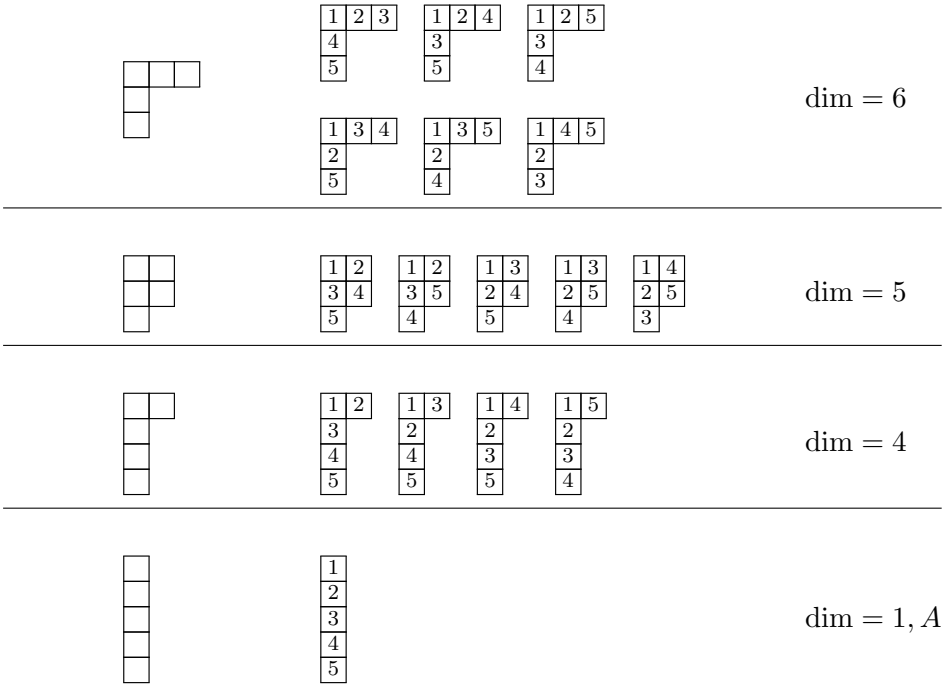
definieren die irreduziblen Darstellungen von S_N (i_λ und j_λ definieren äquivalente Darstellungen). Die Operatoren i_λ und j_λ sind die Verallgemeinerungen von $\mathcal{S}$ und $\mathcal{A}$, welche die eindimensionalen Darstellungen S und A definieren. Es ist[5]

$$\begin{aligned} i_{\lambda=[N]} &= \mathcal{S}_{[N]}\tilde{\mathcal{A}}_{[N]} = \mathcal{S}e = \mathcal{S}, \\ j_{\lambda=[N]} &= \tilde{\mathcal{A}}_{[N]}\mathcal{S}_{[N]} = e\mathcal{S} = \mathcal{S}, \\ i_{\lambda=[1^N]} &= \mathcal{S}_{[1^N]}\tilde{\mathcal{A}}_{[1^N]} = e\mathcal{A} = \mathcal{A}, \\ j_{\lambda=[1^N]} &= \tilde{\mathcal{A}}_{[1^N]}\mathcal{S}_{[1^N]} = \mathcal{A}e = \mathcal{A}. \end{aligned} \tag{B.28}$$

Um die Dimension der zu Y zugehörigen irreduziblen Darstellung zu finden schreiben wir alle Standardtableaus zu Y auf. Ein Standardtableau Y ist ein Tableau bei dem die Nummerierung der Zellen derart durchgeführt wird, dass in jeder Spalte von oben nach unten und in jeder Zeile von links nach rechts die Zahlen größer werden; wieder betrachten wir S_5 als Beispiel,



[5] e ist die Identität.



Dabei ist die erstgenannte Darstellung das sogenannte „normalgeordnete Tableau“. Wie erwartet erhalten wir den üblichen Zusammenhang zwischen der Ordnung der Gruppe $N!$, der Anzahl Klassen K, und den Dimensionen d_i der irreduziblen Darstellungen, siehe (B.10),

$$N! = \sum_{i=1}^{K} d_i^2 : \qquad 5! = 120 = 1 + 4^2 + 5^2 + 6^2 + 4^2 + 5^2 + 1. \tag{B.29}$$

Als nächstes benutzen wir die obigen Strukturen um Bahn- und Spinwellenfunktionen mit wohldefinierter Symmetrie unter Vertauschungen zu definieren.

B.5 Bahnfunktionen mit definierter Symmetrie

Seien $u(x)$, $v(x)$, $w(x), \ldots$ Einteilchenwellenfunktionen. Wir suchen Vielteilchenfunktionen vom Typ[6]

$$\Psi(1, \cdots, N) = \sum \cdots u(\,\cdot\,)v(\,\cdot\,)w(\,\cdot\,)\cdots \tag{B.30}$$

mit wohldefinierter Rasse, das heißt definierter Symmetrie unter Permutation. Wir nehmen an, dass die Funktionen $u(x)$, $v(x)$, $w(x), \ldots$ orthonormal sind. In der Folge betrachten wir die Fälle $N = 2$ und $N = 3$.

[6] Für den allgemeinen Fall $u \neq v$, $v \neq w$, $u \neq w$, ...

$N = 2$: Y ist entweder $Y = \ydiagram{2}$ also S oder $Y = \ydiagram{1,1}$ und damit A. Die Basisvektoren der irreduziblen Darstellung erhalten wir durch Anwenden der (Anti-) Symmetrisierer auf den Produktzustand $\varphi(1,2) = u(1)\,v(2) = uv$[7] Wir unterdrücken im Folgenden die Argumente der Funktionen und verstehen, dass die erste Funktion das Argument 1, die zweite das Argument 2, usw. bekommt. Damit gilt

$$
\begin{aligned}
S\colon \ydiagram{2} \qquad & i_{[2]} = \mathcal{S}_{[2]} = [e + (12)]/2, \qquad && e = (1)(2) \\
& i_{[2]}\varphi = (uv + vu)/2 \equiv \varphi_{\mathcal{S}}/\sqrt{2} \\
A\colon \ydiagram{1,1} \qquad & i_{[1^2]} = \tilde{\mathcal{A}}_{[1^2]} = [e - (12)]/2 \\
& i_{[1^2]}\varphi = (uv - vu)/2 \equiv \varphi_{\mathcal{A}}/\sqrt{2}.
\end{aligned}
\tag{B.31}
$$

$N = 3$: Es gibt drei mögliche Anordnungen von Tableau Y: $Y = \ydiagram{3}$ (S), $Y = \ydiagram{1,1,1}$ (A), und die dritte Variante $Y = \ydiagram{2,1}$ die wir mit Z bezeichnen.

$$
\begin{aligned}
S\colon \ydiagram{3} \qquad & i_{[3]} = [e + (12) + (23) + (13) + (123) + (132)]/6 \\
& i_{[3]}\varphi = (uvw + vuw + uwv + wvu + wuv + vwu)/6 \\
& \equiv \varphi_{\mathcal{S}}/\sqrt{6}, \\
A\colon \ydiagram{1,1,1} \qquad & i_{[1^3]} = [e - (12) - (23) - (13) + (123) + (132)]/6 \\
& i_{[1^3]}\varphi = (uvw - vuw - uwv - wvu + wuv + vwu)/6 \\
& \equiv \varphi_{\mathcal{A}}/\sqrt{6}, \\
Z\colon \ydiagram{2,1} \qquad & i_{[21]} = \mathcal{S}_{[21]}\tilde{\mathcal{A}}_{[21]} \\
& = \frac{1}{2!\,1!}[e + (12)]\frac{1}{2!\,1!}[e - (13)] \\
& = [e + (12) - (13) - (132)]/4 = e_{\mathcal{Z}}/4 \\
& i_{[21]}\varphi = (uvw + vuw - wvu - vwu)/4 \\
& \equiv \varphi_{\mathcal{Z}}/2, \\
\ydiagram{2,1} \qquad & i'_{[21]} = [e + (13) - (12) - (123)]/4 = e'_{\mathcal{Z}}/4 \\
& i'_{[21]}\varphi = (uvw + wvu - vuw - wuv)/4 \\
& \equiv \varphi'_{\mathcal{Z}}/2.
\end{aligned}
$$

[7] In diesem Kapitel lassen wir den Operator auf die Produktfunktion wirken. Dabei vertauscht es die Faktoren $u, v, \ldots$ mit π.

Das Anwenden aller Gruppenelemente auf $\varphi_{\mathcal{Z}}$ erzeugt eine zweidimensionale Darstellung von S_3; wir schreiben $4\,i_{[21]} = e_{\mathcal{Z}}$, dann ist

$$\begin{aligned} e\,e_{\mathcal{Z}} &= e_{\mathcal{Z}}, \\ (12)e_{\mathcal{Z}} &= e_{\mathcal{Z}}, \\ (23)e_{\mathcal{Z}} &= (23) + (132) - (123) - (12) \equiv \overline{e}_{\mathcal{Z}}, \\ (31)e_{\mathcal{Z}} &= -e_{\mathcal{Z}} - \overline{e}_{\mathcal{Z}}, \\ (123)e_{\mathcal{Z}} &= -e_{\mathcal{Z}} - \overline{e}_{\mathcal{Z}}, \\ (132)e_{\mathcal{Z}} &= \overline{e}_{\mathcal{Z}}. \end{aligned} \tag{B.32}$$

Somit spannen $e_{\mathcal{Z}} = e + (12) - (13) - (132)$ und $\overline{e}_{\mathcal{Z}} = (23) + (132) - (123) - (12)$ respektive $\varphi_{\mathcal{Z}} = e_{\mathcal{Z}}\varphi/2$ und $\overline{\varphi}_{\mathcal{Z}} = \overline{e}_{\mathcal{Z}}\varphi/2$ eine zweidimensionale irreduzible Darstellung (wir nennen sie Z) von S_3 auf. Ebenso spannen

$$\begin{aligned} e'_{\mathcal{Z}} &= e + (13) - (12) - (123), \\ \overline{e}'_{\mathcal{Z}} &= (23) + (123) - (132) - (23), \end{aligned} \tag{B.33}$$

eine zweite zweidimensionale irreduzible Darstellung Z' von S_3 auf; mit $(e'_{\mathcal{Z}} e_{\mathcal{Z}}) = 0$ ist diese Darstellung von Z verschieden. Die Ausreduktion des 6-dimensionalen Darstellungsraumes aufgespannt durch die Produktwellenfunktionen $u(\pi_1)v(\pi_2)w(\pi_3)$, $\pi \in S_3$ erzeugt somit

$$S \oplus A \oplus Z \oplus Z'. \tag{B.34}$$

Die Standardtableaus definieren jeweils einen erzeugenden Vektor in jeder dieser irreduziblen Darstellungen.

B.6 Spinfunktionen mit definierter Symmetrie

Wir betrachten das Spin Problem für N Spin-1/2 Fermionen. Die Zustände $\chi_\uparrow$ und $\chi_\downarrow$ spannen den Hilbertraum $\mathcal{H}_{1/2}$ auf und die Produktfunktionen

$$\chi_{\sigma_1} \otimes \chi_{\sigma_2} \otimes \cdots \chi_{\sigma_N} \tag{B.35}$$

definieren eine Basis im 2^N-dimensionalen Produktraum $(\mathcal{H}_{1/2})^{\otimes N}$. Die Operatoren S^2, S_z, $\pi \in S_N$, mit $\boldsymbol{S} = \sum_{i=1}^N \boldsymbol{s}_i$ dem Gesamtspin, kommutieren paarweise und können somit gleichzeitig „diagonalisiert“ werden, das heißt wir können die Darstellungen von $SU(2)$ (mit Quantenzahlen S für $\boldsymbol{S}^2$ und M_S für S_z) und von S_N (mit Quantenzahlen gegeben durch die Standardtableaus) simultan ausreduzieren.

$SU(2)$: $\mathcal{H}_{1/2}^{\otimes N} = \oplus_S \mu_S(N)\mathcal{H}_S$ gemäß den Regeln der Spinaddition. Als Beispiele betrachten wir wiederum die Fälle $N = 2, \ldots, 5$:

$$\begin{aligned}
N=2: \quad & \mathcal{H}_{1/2}^{\otimes 2} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1, \\
& \mu_0(2) = \mu_1(2) = 1. \\
N=3: \quad & \mathcal{H}_{1/2}^{\otimes 3} = \Big(\mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1\Big) \otimes \mathcal{H}_{1/2}, \\
& = 2\mathcal{H}_{1/2} \oplus \mathcal{H}_{3/2}, \\
& \mu_{1/2}(3) = 2, \quad \mu_{3/2}(3) = 1. \\
N=4: \quad & \mathcal{H}_{1/2}^{\otimes 4} = \Big(\mathcal{H}_{1/2} \oplus \mathcal{H}_{1/2} \oplus \mathcal{H}_{3/2}\Big) \otimes \mathcal{H}_{1/2}, \\
& = 2\mathcal{H}_0 \oplus 3\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2, \\
& \mu_0(4) = 2, \quad \mu_1(4) = 3, \quad \mu_2(4) = 1. \\
N=5: \quad & \mathcal{H}_{1/2}^{\otimes 5} : \mu_{1/2}(5) = 5 \quad \mu_{3/2}(5) = 4, \quad \mu_{5/2}(5) = 1.
\end{aligned} \tag{B.36}$$

Im Allgemeinen gilt

$$\mu_S(N) = \frac{(2S+1)N!}{(N/2-S)!(N/2+S+1)!} \tag{B.37}$$

Und damit

$$\sum_S \mu_S(N) \cdot (2S+1) = 2^N, \qquad \mu_{\frac{N}{2}}(N) = 1. \tag{B.38}$$

S_N: Im Spinproblem existieren nur zwei Basisvektoren $\chi_\uparrow$ und $\chi_\downarrow$. Damit können die Young Tableaus höchstens 2 Zeilen haben, sonst verschwindet der zugehörige Projektor auf der Produktbasis. Hätten wir zum Beispiel drei Zeilen,

$$\begin{array}{|c|}\hline \uparrow \\ \hline \downarrow \\ \hline \downarrow \\ \hline \end{array} = i_{[1^3]}\, \chi_\uparrow\chi_\downarrow\chi_\downarrow = \mathcal{A}\, \chi_\uparrow\chi_\downarrow\chi_\downarrow$$

so ergäbe die Antisymmetrisierung der beiden Spin-↓ Zustände eine 0. Weiterhin muss in jeder Spalte der Zustand ↑ mit einem Zustand ↓ gepaart werden, da die Wellenfunktion auch in diesem Fall verschwindet. Zum Beispiel ergibt die Operation i_Z mit $Z = \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1} \end{array}$ angewandt auf $\chi_\uparrow\chi_\downarrow\chi_\uparrow$ mit 1 und 3 beide im Zustand ↑

$$\begin{aligned}
i_{[2,1]}\, \chi_\uparrow\chi_\downarrow\chi_\uparrow &= \frac{1}{4}[e + (12)][e - (13)]\chi_\uparrow\chi_\downarrow\chi_\uparrow \\
&= \frac{1}{4}[e + (12)](\chi_\uparrow\chi_\downarrow\chi_\uparrow - \chi_\uparrow\chi_\downarrow\chi_\uparrow) = 0.
\end{aligned} \tag{B.39}$$

Wir parameterisieren ein allgemeines Young-Diagramm mit zwei Zeilen

$$\mu_S = \overbrace{\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline & \cdots & & \\ \hline & \cdots & \\ \cline{1-3}\end{array}\cdots\ \begin{array}{|c|}\hline \\ \hline\end{array}}^{N/2+S} \qquad \begin{array}{l} \underbrace{}_{N/2-S} \end{array} \quad \underbrace{}_{2S} \tag{B.40}$$

durch die Zahl

$$S = \begin{cases} 0, 1, \ldots \frac{N}{2}, & \text{N gerade,} \\ \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \ldots \frac{N}{2}, & \text{N ungerade,} \end{cases} \tag{B.41}$$

welche sich später als die Spinquantenzahl S herausstellt. Durch elementare Kombinatorik erhält man das Resultat, dass es genau $\mu_S(N)$ normalgeordnete Young Tableaus mit der Rasse μ_S gibt. Im Folgenden beweisen wir, dass der Darstellungsraum $\mathcal{H}_{1/2}^{\otimes N}$ die Darstellung zum Young-Diagramm μ_S genau $(2S+1)$-mal enthält.

Der Raum zu der festen magnetischen Quantenzahl (Eigenwert von S_z)

$$M_S = \nu \cdot \frac{1}{2} - (N-\nu) \cdot \frac{1}{2} = \nu - \frac{N}{2} \in \left\{ -\frac{N}{2}, -\frac{N}{2}+1, \ldots, \frac{N}{2} \right\}. \tag{B.42}$$

wird durch die Produktzustände mit ν-mal Spin-$\uparrow$ und $(N-\nu)$-mal Spin-$\downarrow$ Zuständen aufgespannt, $\nu \in \{0, \ldots, N\}$. Der Vektorraum zu festem S_z ist $N!/\nu!\,(N-\nu)!$-dimensional, da er durch die Angabe der Teilchen mit Spin-$\uparrow$ bestimmt ist (ohne Berücksichtigung der Reihenfolge). Innerhalb dieses Raumes können wir orthogonale Unterräume zu festem $\boldsymbol{S}^2$ suchen. Die erlaubte Werte von S sind

$$S = \frac{N}{2}, \frac{N}{2} - 1, |M_S| + 1, |M_S|; \tag{B.43}$$

das sind $N/2 - |M_S| + 1$ verschiedene Möglichkeiten.[8]

Wie wir bei der Ausreduktion nach $SU(2)$ gesehen haben, kommt der Unterraum zu festem S, M_S gerade $\mu_S(N)$-mal vor. Er definiert damit eine $\mu_S(N)$-dimensionale Darstellung von S_N, da eine Permutation $\pi \in S_N$ weder S noch M_S verändert. Der Unterraum in $\mathcal{H}_{1/2}^{\otimes N}$ zu festem S, M_S erzeugt demnach einen Darstellungsraum von S_N. Wir haben gesehen, dass $\mu_S(N)$ auch gerade die Anzahl der normalgeordneten Young-Tableaus von der Rasse μ_S angibt. Es gilt daher die (richtige) Vermutung, dass die Darstellung irreduzibel ist, welche wir im Folgenden beweisen möchten.

Betrachen wir zunächst den Fall $S = M_S$. Wir benötigen eine Wellenfunktion mit maximaler Spinprojektion. Für ein festes Young-Diagramm von der Form $\mu_S = [N/2+S, N/2-S]$ wird dies durch die folgende Wellenfuntion

$$\chi_{S,M_S} \propto \begin{array}{|c|c|c|c|}\hline \uparrow & \cdots & \uparrow & \uparrow & \cdots & \uparrow \\ \hline \downarrow & \cdots & \downarrow \\ \cline{1-3}\end{array} \qquad \underbrace{}_{2M_S} \tag{B.44}$$

[8] Es gilt $\sum_{S=|M_S|}^{N/2} \mu_S(N) = N!/\nu!(N-\nu)!$

erreicht. Die Anwendung von Permutationen π aus S_N auf die Wellenfunktion liefert den $\mu_S(N)$-dimensionalen Unterraum zu festem S und M_S, welcher nach der irreduziblen Darstellung μ_S von S_N transformiert. Durch das Anwenden des Operators S_-, welcher mit allen $\pi \in S_N$ kommutiert, erhalten wir äquivalente Darstellungen und zwar gerade $2S+1$ Stück zu $M_S = -S, \ldots, S$. Also zerfällt $\mathcal{H}_{1/2}^{\otimes N}$ gemäß

$$\mathcal{H}_{1/2}^{\otimes N} = \bigoplus_S (2S+1)\mathcal{H}_{\mu_S}, \tag{B.45}$$

mit $\mathcal{H}_{\mu_S}$ der irreduziblen Darstellung zu μ_S.

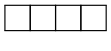
Wir überprüfen das Resultat an den üblichen Beispielen $N = 2, \ldots, 5$,

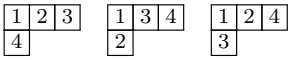
$N=2$ $\dim = 1$, $S = 1$, Triplett $\begin{cases} \mathcal{S}\vert\uparrow\uparrow\rangle, \\ \mathcal{S}\vert\uparrow\downarrow\rangle, \\ \mathcal{S}\vert\downarrow\downarrow\rangle, \end{cases}$

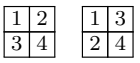
$\dim = 1$, $S = 0$, Singulett $\{\mathcal{A}\vert\uparrow\downarrow\rangle$.

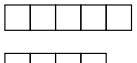
$N=3$ $\dim = 1$, $S = \frac{3}{2}$,

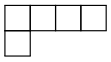
$\dim = 2 = \mu_{\frac{1}{2}}(3)$, $S = \frac{1}{2}$.

$N=4$  $\dim = 1 = \mu_2(4)$, $S = 2$,

 $\dim = 3 = \mu_1(4)$, $S = 1$,

 $\dim = 2 = \mu_0(4)$, $S = 0$.

$N=5$  $\mu_{\frac{5}{2}}(5) = 1$, $S = \frac{5}{2}$,

 $\mu_{\frac{3}{2}}(5) = 4$, $S = \frac{3}{2}$,

$\mu_{\frac{1}{2}}(5) = 5$, $S = \frac{1}{2}$.

Damit haben wir die Zerlegungen (Satz von Weyl, Schur-Weyl Dualität)

$$\mathcal{H}_{1/2}^{\otimes N} = \bigoplus_S \mu_S(N)\mathcal{H}_S = \bigoplus_S (2S+1)\mathcal{H}_{\mu_S}; \tag{B.46}$$

der Spin S legt das Young-Diagramm μ_S und damit die Spinsymmetrie fest. Der Darstellungsraum $\mathcal{H}_{\mu_S}$ wird durch die $|S, M_S\rangle$ zu festen S und M_S aufgespannt.

Als Abschluss noch das Beispiel für 4 Teilchen mit Spin 1/2,

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{1/2}^{\otimes 4} &\overset{SU(2)}{=} 2\mathcal{H}_0 \oplus 3\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \\ &\overset{S_4}{=} \mathcal{H}_{\mu_0} \oplus 3\mathcal{H}_{\mu_1} \oplus 5\mathcal{H}_{\mu_2}\end{aligned}$$

$$= \left\{ \begin{array}{ll} \left\{ \begin{array}{ll} \mathcal{H}_0\colon & |0,0\rangle \\ \mathcal{H}_0'\colon & |0',0'\rangle \end{array} \right. & \mathcal{H}_{\mu_0}, \dim = 2 \\ \left\{ \begin{array}{ll} & |1,1\rangle \\ \mathcal{H}_1\colon & |1,0\rangle \\ & |1,-1\rangle \\ & |1,1\rangle' \\ \mathcal{H}_1'\colon & |1,0\rangle' \\ & |1,-1\rangle' \\ & |1,1\rangle'' \\ \mathcal{H}_1''\colon & |1,0\rangle'' \\ & |1,-1\rangle'' \end{array} \right. & \begin{array}{l} \mathcal{H}_{\mu_1}, \dim = 3 \\ \mathcal{H}_{\mu_1}' \\ \mathcal{H}_{\mu_1}'' \end{array} \\ \left\{ \begin{array}{ll} & |2,2\rangle \\ & |2,1\rangle \\ \mathcal{H}_2\colon & |2,0\rangle \\ & |2,-1\rangle \\ & |2,-2\rangle \end{array} \right. & \begin{array}{l} \mathcal{H}_{\mu_2}, \dim = 1 \\ \mathcal{H}_{\mu_2}' \\ \mathcal{H}_{\mu_2}'' \\ \mathcal{H}_{\mu_2}^{(3)} \\ \mathcal{H}_{\mu_2}^{(4)} \end{array} \end{array} \right.$$

mit

$$\mu_0 = \ydiagram{2,2}, \qquad \mu_1 = \ydiagram{3,1}, \qquad \mu_2 = \ydiagram{4},$$
$$\mu_0(4) = 2, \qquad \mu_1(4) = 3, \qquad \mu_2(4) = 1.$$

B.7 Spin und Bahn

Wir betrachten eine N-Teilchen System mit totalem Spin S. Die Spinwellenfunktion hat die Symmetrie μ_S. Sei die Symmetrie der Bahnfunktion durch das Diagramm μ_B gegeben. Es gilt: Das Tensorprodukt $\mu_B \otimes \mu_S$ der beiden Darstellungen enthält die

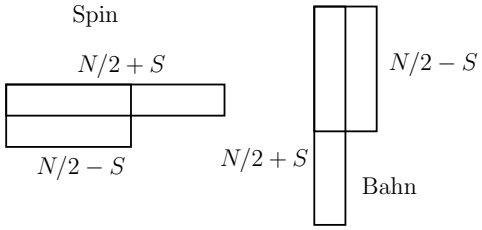


Abbildung B.1: Youngtableaus assoziiert mit den Spin- und Bahnwellenfunktionen für N Spin-1/2 Fermionen mit Gesamtspin S.

Darstellung

$$\begin{aligned} &\text{(Bosonen)} \quad S \Leftrightarrow \mu_B = \mu_S \\ &\text{(Fermionen)} \quad A \Leftrightarrow \mu_B = \tilde{\mu}_S. \end{aligned} \tag{B.47}$$

Daraus folgt, dass die Spinrasse, die durch μ_S gegeben ist, die Bahnrasse μ_B festlegt: Für Bosonen gilt, dass die Bahnrasse der Spinrasse entspricht, $\mu_B = \mu_S$, während für Fermionen die Bahn- und Spinrasse assoziiert zueinander sind, $\mu_B = \tilde{\mu}_S$, siehe Abbildung B.1.

Als Beispiel betrachten wir $N = 3$ Elektronen in der p-Schale für die wir explizit eine Wellenfunktion mit $S = 1/2$ finden möchten. Wie wir wissen, legt der Spin die Spinrasse

$$\mu_S = [21] = \begin{array}{|c|c|}\hline & \\ \hline \\ \cline{1-1} \end{array} \tag{B.48}$$

fest. Wir wissen weiterhin, dass der Zustand zu $M_S = 1/2$ dem Young-Tableau $\begin{array}{|c|c|}\hline \uparrow & \uparrow \\ \hline \downarrow \\ \cline{1-1} \end{array}$ entspricht. Damit bekommen wir eine Wellenfunktion zu $S = 1/2$, $M_S = 1/2$

$$\begin{aligned} \chi_{1/2,1/2}(s_1,s_2,s_3)/\sqrt{2} &= i_{[21]}\,\chi_\uparrow(s_1)\chi_\uparrow(s_2)\chi_\downarrow(s_3) = \mathcal{S}_{\mu_S}\tilde{\mathcal{A}}_{\mu_S}\chi_\uparrow(s_1)\chi_\uparrow(s_2)\chi_\downarrow(s_3) \\ &= \frac{1}{2}\mathcal{S}_{\mu_S}[\chi_\uparrow(s_1)\chi_\uparrow(s_2)\chi_\downarrow(s_3) - \chi_\uparrow(s_3)\chi_\uparrow(s_2)\chi_\downarrow(s_1)] \\ &= \frac{1}{4}[\chi_\uparrow(s_1)\chi_\uparrow(s_2)\chi_\downarrow(s_3) + \chi_\uparrow(s_2)\chi_\uparrow(s_1)\chi_\downarrow(s_3) \\ &\quad - \chi_\uparrow(s_3)\chi_\uparrow(s_2)\chi_\downarrow(s_1) - \chi_\uparrow(s_2)\chi_\uparrow(s_3)\chi_\downarrow(s_1)] \\ &= \frac{1}{2}[\chi_\uparrow(s_1)\chi_\uparrow(s_2)\chi_\downarrow(s_3) - \chi_\downarrow(s_1)\chi_\uparrow(s_2)\chi_\uparrow(s_3)] \end{aligned}$$

Wir wissen, dass der Raum zu festem S genau $[\mu_S(N) = 2]$-mal entartet ist. Einen zweiten Basiszustand erhalten wir durch Anwendung der Transposition $(s_2 \leftrightarrow s_3)$ auf $\chi_{1/2,1/2}$ mit dem Resultat

$$\chi'_{1/2,1/2}(s_1,s_2,s_3) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_\uparrow(s_1)\chi_\downarrow(s_2)\chi_\uparrow(s_3) - \chi_\downarrow(s_1)\chi_\uparrow(s_2)\chi_\uparrow(s_3)]; \tag{B.49}$$

Die zwei Zustände χ und χ' sind linear unabhängig und liegen daher in den verschiedenen Darstellungen Z und Z' von (B.34). Das Anwenden anderer Elemente von S_3 auf χ liefert dann allerdings immer Linearkombinationen von χ und χ'. Natürlich

können die Spinwellenfunktionen zu einem bestimmten S und M_S auch mit einer Clebsch-Gordan Tabelle gefunden werden.

Als nächstes Wollen wir die möglichen Bahnwellenfunktionen bestimmen. Wir wissen, dass die Bahnrasse μ_B dem assoziierten Diagramm $\tilde{\mu}_S$ entsprechen muss. In unserem Fall gilt

$$\mu_B = \tilde{\mu}_S = \mu_S = \ydiagram{2,1}. \tag{B.50}$$

In der p-Schale gibt es Wellenfunktionen mit $M_L = -1, 0, 1$. Wir bezeichnen die Wellenfunktionen mit φ_{M_L}. Da in einer Spalte des Young-Tableaus jede Quantenzahl nur einmal vorkommen darf (siehe die Diskussion beim Spin), sind folgende Zustände erlaubt

$$\begin{array}{cccccccccc} & \begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\\hline 0\\\cline{1-1}\end{array} & \begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\\hline -1\\\cline{1-1}\end{array} & \begin{array}{|c|c|}\hline 1&0\\\hline 0\\\cline{1-1}\end{array} & \begin{array}{|c|c|}\hline 1&0\\\hline -1\\\cline{1-1}\end{array} & \begin{array}{|c|c|}\hline 1&-1\\\hline 0\\\cline{1-1}\end{array} & \begin{array}{|c|c|}\hline 1&-1\\\hline -1\\\cline{1-1}\end{array} & \begin{array}{|c|c|}\hline 0&0\\\hline -1\\\cline{1-1}\end{array} & \begin{array}{|c|c|}\hline 0&-1\\\hline -1\\\cline{1-1}\end{array} \\ \underbrace{M_L = } & 2 & 1 & 1 & 0 & 0 & -1 & -1 & -2 \end{array} \tag{B.51}$$

8 Möglichkeiten (entspricht $L = 1$ und $L = 2$).

Wir betrachten nur den Fall mit $M_L = 2$.[9] Wir müssen die dafür die Bahnwellenfunktion $\varphi_1(\boldsymbol{r}_1)\varphi_0(\boldsymbol{r}_2)\varphi_1(\boldsymbol{r}_3)$ mit dem assoziierten Young-Tableau $\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}$ symmetrisieren und erhalten

$$\begin{aligned} \varphi_{2,2}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3) &= \frac{1}{\sqrt{2}} i'_{[2,1]} \varphi_1(\boldsymbol{r}_1)\varphi_0(\boldsymbol{r}_2)\varphi_1(\boldsymbol{r}_3) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_1(\boldsymbol{r}_1)\varphi_0(\boldsymbol{r}_2)\varphi_1(\boldsymbol{r}_3) - \varphi_0(\boldsymbol{r}_1)\varphi_1(\boldsymbol{r}_2)\varphi_1(\boldsymbol{r}_3)]. \end{aligned} \tag{B.52}$$

Wir wissen, dass das Produkt $\Psi = \varphi_{2,2}\chi_{1/2,1/2}$ die antisymmetrische Darstellung enthalten muss. Um eine antisymmetrische Wellenfunktion zu bekommen, müssen wir daher die Wellenfunktion nur noch antisymmetrisieren

$$\begin{aligned} \Psi^{\mathcal{A}} &\propto \mathcal{A}\varphi_{2,2}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3)\chi_{1/2,1/2}(s_1, s_2, s_3) \\ &= \mathcal{A}\varphi_{1\uparrow}(x_1)\varphi_{0\uparrow}(x_2)\varphi_{1\downarrow}(x_3) - \mathcal{A}\varphi_{1\downarrow}(x_1)\varphi_{0\uparrow}(x_2)\varphi_{1\uparrow}(x_3) \\ &\quad - \mathcal{A}\varphi_{0\uparrow}(x_1)\varphi_{1\uparrow}(x_2)\varphi_{1\downarrow}(x_3) + \underbrace{\mathcal{A}\varphi_{0\downarrow}(x_1)\varphi_{1\uparrow}(x_2)\varphi_{1\uparrow}(x_3)}_{=0} \\ &= 3\mathcal{A}\varphi_{1\uparrow}(x_1)\varphi_{0\uparrow}(x_2)\varphi_{1\downarrow}(x_3) \end{aligned} \tag{B.53}$$

wobei $\varphi_{M_L M_S}(\boldsymbol{r}, s) = \varphi_{M_L}(\boldsymbol{r})\chi_{M_S}(s)$. Die Wellenfunktion $\Psi^{\mathcal{A}}$ ist nun die fermionische Dreiteilchenwellenfunktion zu $M_S = S = 1/2$ und $M_L = L = 2$.

[9] Da M_L maximal ist, wissen wir auch dass dies ein Zustand zu $L = 2$ ist.

Anhang C

$SU(n)$ mit Young-Diagrammen

Wir haben im Anhang B gesehen, dass sich die Darstellungen von $SU(2)$ mit Hilfe von Young-Diagrammen charakterisieren lassen. Dazu haben wir N-Kopien von $SU(2)$ benutzt, so dass neben der Wirkung von $SU(2)$ (auf alle Kopien gleichzeitig) auch die Wirkung der symmetrischen Gruppe S_N definiert ist. Die Darstellungen von $SU(2)$ folgen dann aus denen von S_N (beschrieben durch die Young-Diagramme mit dem Satz von Weyl). Dieses Vorgehen kann man auf $SU(n)$ verallgemeinern. In diesem Kapitel werden wir Aspekte der Darstellungstheorie von $SU(n)$ und insbesondere $SU(3)$ mithilfe von Young-Diagrammen verstehen. Als physikalische Anwendung leiten wir zum Schluss die Multipletstruktur des Quarkmodells (den „Eightfold Way“) her. Wir beginnen dieses Kapitel, indem wir die Ergebnisse des letzten Abschnittes für den Fall von $SU(n)$ etwas allgemeiner formulieren.

C.1 $SU(n)$ Tensoren und die Schur-Weyl Dualität

Um die Wirkung der Gruppe $SU(n)$ zu beschreiben, brauchen wir einen n-dimensionalen Hilbertraum $\mathcal{H}$ mit der Basis $|1\rangle, \ldots, |n\rangle$. Damit gilt

$$U|j\rangle = \sum_{i=1}^{n} U_{ij}|i\rangle, \qquad U \in SU(n), \quad j = 1, \ldots, n\,. \tag{C.1}$$

Diese Darstellung bezeichnet man als die definierende (oder auch fundamentale) Darstellung von $SU(n)$. Für den Fall der $SU(2)$ ist die obige Darstellung die Spin-1/2 Darstellung mit Basis Vektoren $|1\rangle = |\uparrow\rangle$ und $|2\rangle = |\downarrow\rangle$.

Für Systeme N identischer Teilchen, betrachtet man den Produktraum $\mathcal{H}^{\otimes N} = \mathcal{H} \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}$. Dieser transformiert unter der sogenannten Produktdarstellung $U^{\otimes N}$ von $SU(n)$, d.h. jeder Basisvektor transformiert mit der definierenden Darstellung und damit gilt

$$U^{\otimes N} = \underbrace{U \otimes \cdots \otimes U}_{N\text{-mal}}\,. \tag{C.2}$$

Dies Produktdarstellung ist in der Regel reduzierbar und eine wichtige Aufgabe in der Physik ist nun die Frage welche irreduziblen Darstellungen in $\mathcal{H}^{\otimes N}$ enthalten sind. Im Bezug auf $SU(2)$ bedeutet diese Frage, welche Spins in einem N-Teilchensystem vorkommen können. Allgemeiner kann man dieses Vorgehen benutzen, um (alle) irreduziblen Darstellungen der Lie-Gruppe $SU(n)$ mit Hilfe der (bekannten) Darstellungstheorie von S_N zu erhalten.

Dafür definieren wir die Wirkung der symmetrischen Gruppe S_N auf dem Produktraum $\mathcal{H}^{\otimes N}$ durch[1]

$$\pi|j_1,\ldots,j_N\rangle = |\pi(j_1),\ldots,\pi(j_N)\rangle. \tag{C.3}$$

Für das folgende ist es entscheidend, dass die Wirkungen von S_N und $SU(n)$ vertauschen. In der Tat erhalten wir

$$\begin{aligned}
\pi U^{\otimes N}\,|j_1,\ldots,j_N\rangle &= \sum_{i_1,\ldots,i_N} \pi\,|i_1,\ldots,i_N\rangle U_{i_1 j_1}\cdots U_{i_N j_N} \\
&= \sum_{i_1,\ldots,i_N} |\pi(i_1),\ldots,\pi(i_N)\rangle U_{i_1 j_1}\cdots U_{i_N j_N} \\
&= \sum_{i_1,\ldots,i_N} |\pi(i_1),\ldots,\pi(i_N)\rangle U_{\pi(i_1)\pi(j_1)}\cdots U_{\pi(i_N)\pi(j_N)} \\
&= U^{\otimes N}|\pi(j_1),\ldots,\pi(j_N)\rangle = U^{\otimes N}\pi\,|j_1,\ldots,j_N\rangle\,.
\end{aligned}$$

Der entscheidende Schritt passiert von der zweiten zu der dritten Zeile, bei dem die U Matrizen umsortiert werden unter Ausnutzung der Tatsache, dass π eine Bijektion ist. Damit können auf dem Produktraum $\mathcal{H}^{\otimes N}$ die Darstellungen von S_N gleichzeitig mit denen von $SU(n)$ reduziert werden.

Aus letzten Kapitel wissen wir, dass die irreduziblen Darstellungen von S_N durch Young-Diagramme λ bestimmt sind. Die zugehörigen Basisvektoren in $\mathcal{H}^{\otimes N}$, werden durch die irreduziblen Symmetrisierer i_λ erzeugt. Dabei legen die Anzahl der Standardtableaus die Dimension $\lambda(N)$ des irreduziblen Unterraums fest. Wenn man den Vektorraum $\mathcal{H}^{\otimes N}$ auf ein bestimmtes Standardtableau projiziert, erhält man im Allgemeinen einen d_λ-dimensionalen Unterraum mit $d_\lambda = 0, 1, \ldots$. Jeder Basisvektor in diesem Unterraum erzeugt nun unter S_N eine eigene irreduzible Darstellung der Rasse λ, siehe Kapitel B.5. Damit hängt d_λ nicht vom gewählten Tableau ab und wir erhalten die Ausreduktion

$$\mathcal{H}^{\otimes N} = \bigoplus_\lambda d_\lambda \mathcal{H}_\lambda \tag{C.4}$$

in irreduzible Darstellungen $\mathcal{H}_\lambda$ von S_N. Es gilt natürlich $\sum_\lambda d_\lambda \lambda(N) = \dim(\mathcal{H}^{\otimes N}) = n^N$. Es ist sogar möglich, d_λ in geschlossener Form zu bestimmen. Man erhält nach

[1] Mit der rechten Seite bezeichnen wir das Resultat nach dem Vertauschen der Faktoren, d.h. $(123)|u,v,w\rangle = |w,u,v\rangle$; in anderen Worten $\pi|j_1,\ldots,j_N\rangle = |j_{\pi^{-1}(1)},\ldots j_{\pi^{-1}(N)}\rangle$.

einer längeren Herleitung[2]

$$d_\lambda = \frac{D(l_1, l_2, \dots l_N)}{D(n-1, n-2, \dots, 0)} \quad , \quad D(l_1, l_2, \dots, l_N) = \prod_{i<j}(l_i - l_j) \tag{C.5}$$

mit $l_j = \lambda_j + n - j$ und λ_j der Länge der j-ten Reihe in λ.

Da π und $U^{\otimes N}$ vertauschen, kann π die Quantenzahlen, welche die irreduziblen Darstellungen von $SU(n)$ Charakterisieren nicht verändern. Also haben die irreduziblen Darstellungen von S_N auch feste Quantenzahlen unter $SU(n)$. Genau dies haben wir bei $SU(2)$ gesehen: Die irreduziblen Darstellungen von S_N, beschrieben durch μ_S, haben ein festes S. Weiterhin verändert $U^{\otimes N}$ die Rasse eines Zustandes nicht, so dass die Darstellungen von $SU(n)$ eine feste Rasse haben. Für $SU(2)$ bedeutet das sogar, dass der Spin S die Rasse $\lambda = \mu_S$ des Zustandes eindeutig festlegt. Damit ist die Dimension $(2S+1)$ der Darstellung $\mathcal{H}_S$ unter $SU(2)$ genau die Multiplizität d_λ mit der die Rasse μ_S auftritt. Dieser eindeutige Zusammenhang zwischen den irreduziblen Darstellungen setzt sich auf die Gruppen $SU(n)$ fort.

Aus (C.4) wissen wir, dass die $\lambda(N)$-dimensionale irreduzible Darstellung $\mathcal{H}_\lambda$ von S_N mit Rasse λ d_λ-mal auftritt. Unter der Wirkung von $SU(n)$ wird der Rasse λ die irreduzible Darstellung $\mathcal{H}^\lambda$ zugeordnet.[3] Da die Wirkung von S_N mit der von $SU(n)$ vertauscht, kommt die irreduzible Darstellung $\mathcal{H}^\lambda$ $\lambda(N)$-mal vor. Damit erhalten wir die Zerlegung (Schur-Weyl Dualität)

$$\mathcal{H}^{\otimes N} = \underbrace{\bigoplus_\lambda \lambda(N)\, \mathcal{H}^\lambda}_{SU(n)} = \underbrace{\bigoplus_\lambda d_\lambda\, \mathcal{H}_\lambda}_{S_N} . \tag{C.6}$$

Für die Dimension folgt daraus $\lambda(N)\dim(\mathcal{H}^\lambda) = d_\lambda \dim(\mathcal{H}_\lambda) = d_\lambda \lambda(N)$. Damit wird die Dimension $\dim(\mathcal{H}^\lambda) = d_\lambda$ der irreduziblen Darstellungen von $SU(n)$ durch (C.5) festgelegt. Die Darstellungstheorie von $SU(n)$ folgt damit aus der von S_N.

Der Zusammenhang zwischen den Young-Diagrammen und den irreduziblen Darstellungen von $SU(n)$ wird Schur-Weyl Dualität genannt. Das erstaunliche hierbei ist, dass man die irreduziblen Darstellungen von $SU(n)$ bestimmen kann, ohne kontinuierliche Lie-Gruppen zu untersuchen. Alles folgt aus der Darstellungstheorie der endlich-dimensionalen Symmetrischen Gruppe S_N. In den nächsten Abschnitten werden wir dies an Hand von $SU(2)$ und $SU(3)$ etwas genauer diskutieren.

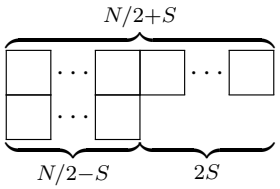
C.2 $SU(2)$ mit Young-Diagrammen

Wir werden zuerst $SU(2)$ mit den im letzten Abschnitt entwickelten Methoden untersuchen, um die Analyse von $SU(3)$ vorzubereiten. Die definierende Darstellung

[2] Siehe T. Inui, Y. Tanabe, Y. Onodera „Group Theory and Its Applications in Physics“, Kapitel 15.5.

[3] Man kann zeigen, dass diese Zuordnung eindeutig ist.

von $SU(2)$ ist Spin-1/2, so dass es nur zwei Basisvektoren $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ gibt. Damit können die Young-Diagramme maximal 2 Reihen haben, da sonst der Antisymmetrisierer immer eine 0 erzeugt. Also kann für ein festes N, jedes Young-Diagramm durch die Angabe einer einzigen Konstante S (dem Spin) vollständig beschrieben werden. Wie in (B.40) schon gezeigt, verwenden wir die Konvention [4]

$\mu_S =$ 

. (C.7)

Bei festem N beschreibt $2S$ somit den „Überhang“ des Young Diagramms. Der Spin $S = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots$ steht in direktem Zusammenhang mit dem Casimir Operator $\boldsymbol{S}^2$ von $SU(2)$, der die irreduziblen Darstellungen von $SU(2)$ bestimmt. Ein Casimir Operator ist ein Operator, der mit allen Generatoren der Lie-Gruppe Kommutiert, hier also mit S_x, S_y, S_z. Um die Zustände in den Darstellungen von $SU(2)$ zu kennzeichnen wählt man neben $\boldsymbol{S}^2$ einen weiteren Operator, konventionell S_z, der die verschiedenen Basiszustände in der Darstellung eindeutig festlegt. Hier haben die Basiszustände $|S, M_S\rangle$ in $\mathcal{H}^{\mu_S} \equiv \mathcal{H}_S$ die zusätzliche Quantenzahl $M_S = -S, \ldots, S$. Die Dimension der zu S gehörenden Darstellung erhält man sofort mit Gleichung (C.5)

$$\begin{aligned} d_{\mu_S} &= \frac{D(l_1, l_2)}{D(1,0)} = l_1 - l_2 = (\mu_1 + 2 - 1) - (\mu_2 + 2 - 2) \\ &= (\mu_1 - \mu_2) + 1 = 2S + 1. \end{aligned}$$

Durch elementare Kombinatorik (genau wie in B) lässt sich nun auch $\mu_S(N) = \dim(\mathcal{H}_\lambda)$ bestimmen. Zusammenfassend finden wir die bereits bekannte Zerlegung:

$$\mathcal{H}^{\otimes N} = \bigoplus_S \mu_S(N)\, \mathcal{H}_S = \bigoplus_S (2S+1)\, \mathcal{H}_{\mu_S} \tag{C.8}$$

Wie im letzten Kapitel gesehen, kann man mit der Schur-Weyl Dualität auch Basisvektoren für die Spin-S Darstellung zu bestimmen.

C.3 $SU(3)$ mit Young-Diagrammen

Für die Gruppe $SU(3)$ ist das Vorgehen komplett analog. Physikalisch beschreibt diese Gruppe z. B. die Flavour Symmetrie von Quarks. Die fundamentale Darstellung von $SU(3)$ ist 3 dimensional und man bezeichnet die Basis Vektoren mit $|u\rangle$ (Up-Quark), $|d\rangle$ (Down-Quark) und $|s\rangle$ (Strange-Quark).

Da es nur 3 verschieden Basisvektoren gibt, dürfen die Young-Diagramme maximal 3 Reihen haben. In diesem Fall braucht es für festes N also zwei Zahlen p, q, um ein

[4] Die Konstante muss so gewählt werden, dass das Ergebnis für d_λ unabhängig von N ist.

Young-Diagramm eindeutig festzulegen. In der Literatur der Lie-Gruppen Theorie wird das Tupel (p, q) als Dynkin-Indizes bezeichnet. Wir definieren die Rasse als

$$\lambda_{(p,q)} = (q, p) = \overbrace{\begin{array}{|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|}\hline & \cdots & & & \cdots & & & \cdots & \\ \cline{1-9} & \cdots & & & \cdots & \\ \cline{1-6} & \cdots & \\ \cline{1-3} \end{array}}^{(N+2p+q)/3} \underbrace{\qquad\qquad\qquad}_{q} \underbrace{\qquad\qquad}_{p}, \tag{C.9}$$

wobei $p, q = 0, 1, 2, \ldots$ beschreibt die Länge der Überhänge beschreiben.

Genau wie bei der $SU(2)$ stehen die Zahlen (p, q) in direktem Zusammenhang mit Casimir Operatoren der Gruppe. Also sind die irreduziblen Darstellungen von $SU(3)$ festgelegt durch zwei Casimir Operatoren, einer für p und einer für q. Wir bezeichnen diese irreduzible Darstellung mit $\mathcal{H}^{\lambda} = \mathcal{H}^{(p,q)}$. Um die Zustände innerhalb einer Darstellung $\mathcal{H}^{(p,q)}$ festzulegen wird nun ein weiteres beliebiges Element der Lie-Algebra gewählt wodurch man einen vollständigen Satz von Quantenzahlen erhält.[5]

Die Dimension der Darstellung $\mathcal{H}^{(p,q)}$ bestimmt man wieder mit Gleichung (C.5) als (wiederum hängt $d_{(p,q)}$ nicht von N ab)

$$\begin{aligned} d_{(p,q)} &= \frac{D(l_1, l_2, l_3)}{D(2, 1, 0)} = \frac{(l_1 - l_2) \cdot (l_1 - l_3) \cdot (l_2 - l_3)}{(2-1) \cdot (2-0) \cdot (1-0)} \\ &= \frac{1}{2}(p+1)(q+1)(p+q+2). \end{aligned} \tag{C.10}$$

Dieses zentrale Resultat die Lie-Gruppen Theorie erhalten wir wiederum direkt aus der Darstellungstheorie von S_N.

Als einfaches Beispiel betrachten wir die fundamentale Darstellung von $SU(3)$, beschrieben durch das Diagramm $\square$. Dieses Diagramm gehört zu $N = 1, (p, q) = (1, 0)$, sodass sich die Dimension mit Gleichung (C.10) wie erwartet $d_{(1,0)} = 3$ ergibt.

Für $N = 2$ gibt es nun zwei mögliche Diagramme: Zum einen $\square\square$ mit $(p, q) = (2, 0)$ und $d_{(2,0)} = 6$ sowie $\begin{array}{|c|}\hline \\ \hline \\ \hline \end{array}$ mit $(p, q) = (0, 2)$ und $d_{(0,2)} = 6$. Genau wie bei $SU(2)$ kann man nun Basisvektoren mit Young-Symmetrisierer bestimmen, die unter einer irreduziblen Darstellung von $SU(3)$ transformieren.

Die Erweiterung des Vorgehens auf $SU(n)$ ist relativ klar. Die Young-Diagramme von $SU(n)$ können maximal n Reihen haben, da die fundamentale Darstellung genau n Basis Vektoren hat. Für festes N, braucht man genau $n - 1$ Konstanten, um ein Young-Diagramme von $SU(n)$ vollständig zu beschreiben. Damit hat $SU(n)$ insgesamt $(n - 1)$ Casimir Operatoren hat. Ein Young-Diagramm bekommt einen Index $(p_1, p_2, \ldots, p_{n-1})$, durch welches es eindeutig beschrieben wird. Die Konstanten $(p_1, p_2, \ldots, p_{n-1})$ müssen erneut so definiert werden, dass die Dimension d_{λ} unabhängig

[5] Dies wird in der Literatur auch Cartan-Unteralgebra genannt.

von N wird, was konkret bedeutet, dass die Konstanten jeweils den Überhang im Diagramm beschreiben. Dann können die Dimensionen der Darstellungen, sowie Basisvektoren einfach mit Hilfe der Young-Diagramme bestimmt werden.

C.4 Konjugierte Darstellung

Neben den normalen irreduziblen Darstellungen sind auch konjugierte irreduziblen Darstellungen $\overline{U} = U^*$ in der Physik wichtig.[6] Hier bezeichnet U^* die komplex konjugierte Matrix. Startend von einer irreduziblen Darstellung $\mathcal{H}_\lambda$ ist natürlich auch $\overline{\mathcal{H}_\lambda}$ irreduzible. Es stellt sich daher sofort die Frage, ob $\mathcal{H}_\lambda$ und $\mathcal{H}_{\overline{\lambda}} \equiv \overline{\mathcal{H}_\lambda}$ dieselbe irreduzible Darstellung sind.[7]

Auch die konjugierte Darstellung $\overline{\lambda}$ lässt sich einfach mit Young-Diagrammen beschreiben. In $SU(n)$ wird bei festem N ein Young-Diagram λ durch ein Tupel $\boldsymbol{p} = (p_1, \ldots, p_{n-1})$ der „Überhänge“ beschrieben. Die konjugierte Darstellung entspricht dann einfach dem konjugierten Young-Diagram $\overline{\lambda}$, das gegeben ist durch $\overline{\boldsymbol{p}} = (p_{n-1}, p_{n-2}, \ldots, p_1)$, wobei gegebenenfalls ein anderes N nötig ist um ein zulässiges Young-Diagramm zu erhalten. Man beachte, dass die Konjugation eine Involution ist, d. h. $\overline{\overline{\lambda}} = \lambda$.

Im Beispiel von $SU(2)$ gibt es nur einen Überhang. Damit ist die konjugierte Darstellung äquivalent zur normalen Darstellung. In der Tat erhält man für die fundamentale Darstellung[8] von $SU(2)$,

$$U^* = \sigma_2 U \sigma_2, \qquad U \in SU(2)\,. \tag{C.11}$$

Diese nichttriviale Beziehung schreibt man auch als $\mathcal{H}_{1/2} \simeq \overline{\mathcal{H}_{1/2}}$. Um sie zu zeigen, kann man die Parameterisierung $U = \exp(i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})$, $\boldsymbol{n} \in \mathbb{R}^3$ verwenden, zusammen mit der Eigenschaft $\sigma_j^* = -\sigma_2\sigma_j\sigma_2$ der Paulimatrizen.

Für $SU(3)$ unterscheidet sich jedoch die konjugierte von der normale Darstellung. Als Beispiel betrachten wir die (1,0) und die (1,1) Darstellung von $SU(3)$. Wir erhalten

$$\overline{(1,0)} = \overline{\square} = \begin{array}{l}\square\\\square\end{array} = (0,1) \tag{C.12}$$

$$\overline{(1,1)} = \overline{\begin{array}{ll}\square&\square\\\square&\\\square&\end{array}} = \begin{array}{ll}\square&\square\\\square&\\\square&\end{array} = (1,1) \tag{C.13}$$

Im Allgemeinen gilt $\overline{(p,q)} = (q,p)$. Die Indizes p und q sind damit konugiert zueinander.

[6] Falls sich $|j\rangle$ mit U transformiert, transformiert $\langle j|$ mit U^*.

[7] Formal bedeutet dies, dass das es eine unitäre Transformation T gibt, so dass $TUT^\dagger = U^*$ für alle U gilt.

[8] Dies genügt, da die „höheren“ Darstellungen durch das bilden von Tensor Produkten der fundamentalen Darstellung erzeugt werden.

Während in $SU(2)$ die verschiedenen Darstellungen alleine durch ihre Dimension identifiziert werden können, ist dies für $SU(3)$ nicht möglich. In der Tat führen verschiedene Kombinationen von (p, q) auf dieselbe Dimension. Mit dem Konzept der konjugierten Darstellungen ist es aber möglich die physikalisch relevanten „kleinen" Darstellungen (p, q) mit $pq, \leq 3$ alleine durch ihre Dimension $d_{(p,q)} = \dim \mathcal{H}^{(p,q)}$ zu beschreiben. In der Teilchenphysik verwendet man oft die Konvention

$$\mathcal{H}^{(p,q)} \equiv \begin{cases} \boldsymbol{d}_{(p,q)}, & p \geq q \\ \overline{\boldsymbol{d}_{(p,q)}}, & p < q\,. \end{cases} \tag{C.14}$$

Das heißt, man schreibt $\mathcal{H}^{(1,0)} = \mathbf{3}$ und $\mathcal{H}^{(0,1)} = \overline{\mathbf{3}}$, anstatt das Tupel (p, q) anzugeben. Diese Notation ist besonders nützlich, wenn man über die Transformation von Teilchen und Antiteilchen in Produktdarstellung spricht. In der Tat transformieren die Up-, Down-, und Strange-Quark (nach Definition) mit der fundamentalen Darstellung $\mathbf{3}$. Damit transformieren die zugehörigen Antiteilchen mit $\overline{\mathbf{3}}$.

C.5 Produktdarstellungen und das Quark Modell

Young-Diagramme ermöglichen es, graphisch Produktdarstellungen auszureduzieren. Wir wollen dies in diesem Kapitel am Beispiel von $SU(3)$ erklären, um damit das Quark Modell besser zu verstehen. Bisher haben wir immer Tensor-Produkte der fundamentalen Darstellung von $SU(3)$ ausreduziert. Grafisch Dargestellt bedeutet es das wir Tensorprodukte von $\square$ in direkte Summen zerlegt haben. So gilt zum Beispiel für $SU(3)$

$$3 \otimes 3 = \square \otimes \square = \square\square \oplus \begin{array}{l}\square\\[-4pt]\square\end{array}. \tag{C.15}$$

Dieses Resultat erhält man direkt aus der folgenden Regel für das graphische Tensorprodukt einer irreduziblen Darstellung mit der fundamentalen Darstellung (ein einzelnes Kästchen):

> Das zusätzliche Kästchen $\square$ wird in allen Positionen hinzugefügt, mit der Bedingung, dass ein zulässiges Young-Diagramm entsteht. Das Resultat ist die direkte Summer aller dieser Diagramme.

Eine schöne Anwendung der in den letzten Abschnitten eingeführten Methoden findet sich im (statischen) Quarkmodell der Teilchenphysik. Im statischen Quarkmodell unterscheidet man zwei Arten von Teilchen: die Baryonen (bestehend aus 3 Quarks) und den Mesonen (bestehend aus einem Quark und einem Antiquark). Wie schon oben erwähnt, transformiert ein Quark mit der fundamentalen Darstellung $\mathbf{3}$, während ein Anti-Quark mit der konjugierten Darstellung $\overline{\mathbf{3}}$ transformiert. Dieses Transformationensverhalten versteht man in der modernen Teilchenphysik als eine Konsequenz der Flavour Symmetrie der Quarks. Die starke Wechselwirkung, hängt nur von der

Farb-Ladung der Quarks und nicht vom Flavour ab. Ersetzt man daher ein Quark durch ein anderes, lässt aber die Farbe gleich, ändert sich die Masse des Hadrons nicht signifikant, solange die jeweilige Quarkmassen viel kleiner als die Wechselwirkungsskala der starken Wechselwirkung sind. Dies ist für die leichten Quarks (u, s, d) erfüllt, so dass diese untereinander ausgetauscht werden können, ohne dass sich die Masse des Hadrons signifikant ändert. Dieser Austausch wird durch die Darstellung $\mathbf{3}$, und $\overline{\mathbf{3}}$ beschrieben. Historisch wurde diese Symmetrie aus experimentellen Daten hergeleitet.

Es stellt sich nun die Frage, warum stabile Zustände nur aus 3 Quarks ($\mathbf{3} \otimes \mathbf{3} \otimes \mathbf{3}$) oder einem Quark Anti-Quark Paar ($\mathbf{3} \otimes \overline{\mathbf{3}}$) bestehen und nicht zum Beispiel nur aus zwei Quarks ($\mathbf{3} \otimes \mathbf{3}$). Der Grund dafür liegt in der starken Wechselwirkung. Wegen dem „color-confinement“, muss alle Materie farblos sein. Das heißt, die Wellenfunktion muss invariant (ein Singulett) sein unter einer Transformation im Farbraum (r, g, b). Da die Farbladung auch durch die Symmetriegruppe $SU(3)$ beschrieben wird, lassen sich die Darstellungen ebenfalls durch Young-Diagramme beschreiben. Die einzige eindimensionale Darstellung erhält man mit $p = q = 0$, was dem Young-Tableau $\begin{array}{|c|}\hline r \\ \hline g \\ \hline b \\ \hline \end{array}$ entspricht. Damit benötigt man 3 Quarks für ein Farbsinglet, was den Baryonen entspricht. Die einzige andere Möglichkeit eine farblose Wellenfunktion zu erzeugen, ist die Kombination von Farbe mit Anti-Farbe, da $\square \otimes \overline{\square}$ ein Singulett enthält. In der Tat bildet der Zustand $|r\overline{r}\rangle + |g\overline{g}\rangle + |b\overline{b}\rangle$ ein Farbsingulett, was den Mesonen entspricht.

Die stabilen Teilchen werden nun dargestellt durch Basisvektoren von irreduziblen Darstellungen in den Tensorprodukträumen $\mathbf{3}\otimes\mathbf{3}\otimes\mathbf{3}$ (Baryonen) und $\mathbf{3}\otimes\overline{\mathbf{3}}$ (Mesonen). Somit müssen wir die Produktdarstellungen in irreduzible Darstellungen zerlegen, um die entsprechenden Teilchen zu finden. Wir verwenden dazu die graphische Methode.

Wir beginnen mit den Baryonen:

$$\begin{aligned}
\mathbf{3} \otimes \mathbf{3} \otimes \mathbf{3} &= \square \otimes \square \otimes \square = \left(\begin{array}{|c|}\hline \\ \hline \end{array} \oplus \square\square \right) \otimes \square \\
&= \left(\begin{array}{|c|}\hline \\ \hline \end{array} \otimes \square \right) \oplus \left(\square\square \otimes \square \right) \\
&= \begin{array}{|c|}\hline \\ \hline \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|}\hline \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|}\hline \\ \hline \end{array} \oplus \square\square\square
\end{aligned} \tag{C.16}$$

In konventioneller Notation schreibt man dieses Resultat als

$$\mathbf{3} \otimes \mathbf{3} \otimes \mathbf{3} = \mathbf{1} \oplus \mathbf{8} \oplus \mathbf{8} \oplus \mathbf{10}. \tag{C.17}$$

Dabei entsprechen nur **8** und **10** physikalischen Teilchen. Der Singulettzustand **1**, ist wegen des Pauliprinzips verboten.

Das Pauliprinzip verlangt, dass die Gesamtwellenfunktion (Spin, Flavor und Farbe) antisymmetrisch ist. Wie wir schon gesehen habe, ist der Farbfreiheitsgrad wegem dem

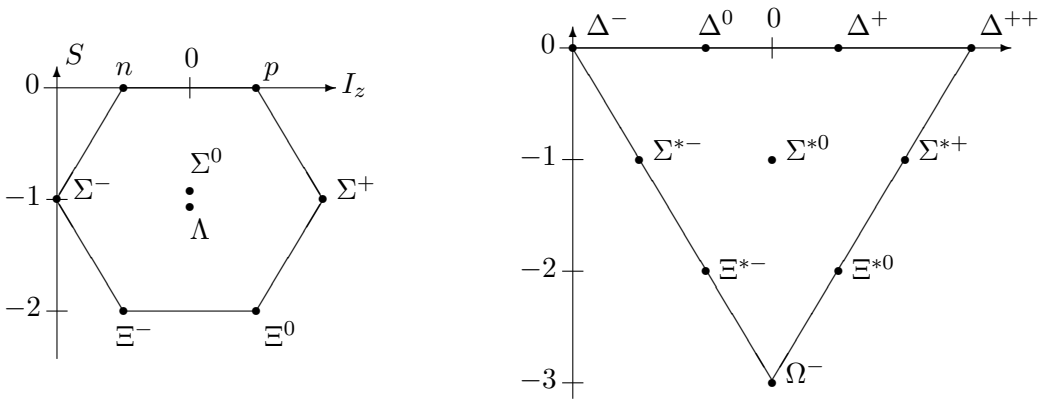


Abbildung C.1: Baryon Oktett **8** zum Spin-1/2 (links) und Baryon Decuplet **10** zum Spin-3/2 (rechts). Die x-Achse in diesem Graph beschreibt die Isospin Quantenzahl I_z (proportional zu Anzahl Up-Quark minus Anzahl Down-Quark), während die y-Achse die Strangeness S (respektive die Hyperladung Y) beschreibt. Wir wollen hier auf diese Charakterisierung nicht weiter eingehen (für mehr Infos siehe S. Coleman „Aspects of Symmetry“).

color-confinement ein Singulett und damit antisymmetrisch. Damit muss die Spin-Flavour Wellenfunktion symmetrisch sein. Jedes Quark hat Spin-1/2, so dass sich die 3 Quarks zum Gesamtspin $S = \frac{1}{2}$ (mit der Rasse $\begin{array}{|c|c|}\hline \\ \hline \end{array}$) oder zum Gesamtspin $S = \frac{3}{2}$ (mit der Rasse $\begin{array}{|c|c|c|}\hline \\ \hline \end{array}$) kombinieren. Mit (B.47) wissen wir, dass die zugehörigen Flavour Wellenfunktionen dieselbe Rasse haben müssen, damit die Spin-Flavour Wellenfunktion insgesamt eine symmetrische Darstellung hat. Damit erhalten wir nur die Teilchen **8** zum Spin-1/2 und **10** zum Spin-3/2.

Die Zerlegung ist graphisch in Abbildung C.1 dargestellt. Wegen der Symmetrie erwarten wir, dass die Teilchen in **8** (die leichten Baryonen) respektive in **10** (die schweren Baryonen) jeweils dieselbe Masse haben (bis auf die kleinen Massenunterschiede der Quarks). Diese Aussage stimmt bis auf Effekte der elektroschwachen Wechselwirkung. Die Flavour-Wellenfunktionen die zu den einzelnen Teilchen gehören, lassen sich nun mit Young-Tableaus bestimmen. Als Beispiel betrachten wir das Δ^+-Teilchen zum Spin-3/2 bestehend aus den Quarks uud (Strangeness 0, Isospin 1/2). Die Wellenfunktion ist gegeben durch $\begin{array}{|c|c|c|}\hline u & u & d \\ \hline \end{array}$. Im Vergleich dazu das Proton (p) zum Spin-1/2 (mit demselben Quarkinhalt). In diesem Fall ist die Flavourwellenfunktion durch $\begin{array}{|c|c|}\hline u & u \\ \hline d \\ \cline{1-1} \end{array}$ bestimmt.

Das Vorgehen für die Mesonen ist analog. Hier gilt die Zerlegung

$$3 \otimes \overline{3} = \square \otimes \overline{\square} = \square \otimes \begin{array}{|c|}\hline \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|}\hline \\ \hline \\ \cline{1-1} \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|}\hline \\ \hline \\ \cline{1-1} \end{array}. \tag{C.18}$$

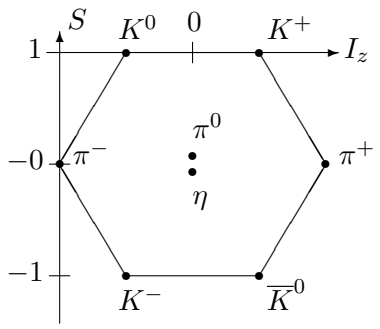


Abbildung C.2: Meson Oktett **8**

In konventioneller Notation schreibt man dieses Resultat als

$$\mathbf{3} \otimes \overline{\mathbf{3}} = \mathbf{1} \oplus \mathbf{8}. \tag{C.19}$$

Im Gegensatz zu den Baryonen ist hier das Singlet **1** erlaubt. Es beschreibt ein η' Meson beschreibt. Der Grund liegt daran, dass die Mesonen aus unterscheidbaren Teilchen (Quark und Antiquark) zusammengesetzt werden, so dass das Pauli Prinzip nicht greit. Wir haben das Meson Oktett in Abbilung C.2 zusammengefasst. Wiederum haben die Mesonen im Oktett ähnliche Massen. Damit wollen wir unseren Exkurs in die Welt der Darstellungstheorie beenden. Die Darstellungstheorie ist ein Feld von großer Relevanz für die Physik von dem wir hier nur einen kleinen Ausschnitt zeigen konnten. Ein guter Einstiegspunkt für das weitere Studium dieser Thematik ist das Buch „Group theory and its application to physical problems“ von Morton Hamermesh, wo Sie auch Beweise zu den hier nur motivierten Methoden finden können.

Index

Abschirmung
    Metall, 95
    Thomas-Fermi, 49
Additionstheorem für Y_{lm}, 138
Anderson-Higgs Mechanismus, 102
Anregung
    Elektron-Loch, 99
antisymmetrische Wellenfunktionen, 32
Antiteilchen, 125
Atom
    mit zwei Elektronen, 43
Ausschlussprinzip, 33, 38, 126
Austuschentartung, 31
Auswahlregeln, 64

Bahnwellenfunktion, 34
Barionen, 33
barn ($1b = 10^{-24}$ cm^2), 8
BCS, 37
BEC, 37
Besetzungszahl, 67
Bessel-Funktion, 135
    sphärische, 9
Bogoliubov Transformation, 105
Bogoliubov-de Gennes-Hamiltonoperator, 105
bornsche Näherung, 14
Bose-Kondensat, 40
Bosonen, 33
    Kondensat, 40
    Paarbildung, 37
    Streuung, 41

Cooper-Paar, 103
Cooperpaare, 40

Dielektrizitätskonstante
    RPA, 97
    Thomas-Fermi, 95
Differentialgleichungen
    Hartree-Fock-, 48
Dirac
    Adjungierte, 121
    Gleichung, 117
    Matrizen, 118
    Norm, 121
    Spinor, 117, 118, 123

Effekt
    Meißner-Ochsenfeld, 100
    Paschen-Back, 63
    Zeeman, 59, 62
Eichbosonen, 33
Eikonalnäherung, 17
Elemente, 54

Feinstruktur, 59
Feldoperatoren, 77
Fermi-Gas, 82
Fermidruck, 40
Fermienergie, 40
Fermionen, 33
    Streuung, 42
Fermisee, 38
Fock-Raum, 68
Foldy-Wouthuysen-Transformation, 128
Friedel Oszillation, 100
Funktion
    Bessel-, 9, 135
    greensche-, 4
    Hankel-, 9, 136
    Neumann-, 135

γ-Matrizen, 118

gebundene Zustände
  im Streuproblem, 24
gibbsches Paradoxon, 31
Gleichung
  Hamilton-Jacobi, 17
  Klein-Gordon, 113
Gleichungen
  Dirac, 117
Gluonen, 33
greensche Funktion
  retardierte, 4

Hamilton-Jacobi Gleichung, 17
Hamiltonoperator
  Bogoliubov-de Gennes, 105
  quadratischer, 75
Hankel-Funktion, 9, 136
harte Kugel, 23
Hartree-Fock-Näherung, 47
Hartree-Näherung, 46
Heisenberg
  Anwendung HUP, 132
Helium, 37, 40
Higgs, 33
hundsche Regeln, 60
Hyperfeinstruktur, 59

identische Teilchen, 27, 30
irreduzible Darstellungen von S_N, 143

Jellium-Modell, 92

Klein-Gordon Gleichung, 113
Koopmans Theorem, 47
Kugel, harte, 23

Landé Faktor, 63
Landau-Dämpfung, 98
Leitungselektronen, 39
Leptonen, 33
Levinsons Theorem, 22
Lippmann-Schwinger Gleichung, 6
London-Eichung, 102
London-Eindringtiefe, 101
London-Gleichung, 101
  erste, 101
  zweite, 101
London-Gleichungen
  Herleitung, 110
LS Kopplung, 56

Meißner-Ochsenfeld-Effekt, 100
Mesonen, 33
Metall
  Abschirmung, 95
  Plasmaresonanz, 99

Neumann-Funktion, 135
Näherung
  bornsche, 14
  Eikonal-, 17
  Hartree, 46
  Hartree-Fock, 47

Optisches Theorem, 13

Paarbildung
  Bosonen, 37
  Fermionen, 37
Paradoxon, gibbsches, 31
Partialwellenzerlegung, 9
Paschen-Back Effekt, 63
Pauli
  Ausschlussprinzip, 126
  Matrizen, 117
paulisches Ausschlussprinzip, 33, 38
Permutation
  $\pi(i)$, 30
  Zyklen, 140
Plasma
  -frequenz, 99
  -resonanz, 98
Plasmon, 99
Produktwellenfunktion, 46

Quarks, 33

random phase approximation, 95
Rasse
  Bahn-Rasse, 142

Spin-Rasse, 142
RPA, 95
Russel-Saunders Kopplung, 56
Röntgenschalen, 54

Satz
von Spin und Statistik, 32
von Weyl, 152
Schur-Weyl Dualität, 159
Slaterdeterminante, 38, 39
S_N
irreduzible Darstellung, 143
Permutationsgruppe, 139
symmetrische Gruppe, 139
Spin und Bahn, 142, 154
Spin-Bahn Kopplung, 56
Spinfunktion
antisymmetrische-, 44
symmetrische-, 44
Spinore, Dirac-, 123
Spinwellenfunktion, 34
Stoßparameter, 17
Streumatrix, 11
Streuung, 40
gebundener Zustand, 21
niederenergetisch, 22
Skizze der Streuung, 2
Streuamplitude $f_{\boldsymbol{k}}(\Omega_{\boldsymbol{r}})$, 6, 15, 18
Streugeometrie, 3
Streulänge a_s, 23
Streuphase $\delta_l(E_k)$, 11, 16, 18
Streuresonanz, 22
Streutheorie, 1
von Bosonen, 41
von Fermionen, 42
Supraflüssigkeit, 37
Supraleitung, 40
Symmetrie und Permutation, 31
Symmetrische Gruppe S_N, 139
symmetrische Wellenfunktionen, 32

Teilchen, identische, 30
Termsymbol, 58
Theorem
Wick, 87
Thomas-Fermi Atom, 52
Schalen, 53
Transformation
Bogoliubov, 105

Ununterscheidbarkeit, 27

Vertauschungsrelation
kanonisch, 71
Vielteilchenproblem, 45

Wellenfunktion
antisymmetrische, 32
Spin und Bahn-, 34
symmetrische, 32
Wellenpakete, 1
Wirkungsquerschnitt
differentieller, 6
partieller, 11
totaler, 9

Young Tableau, 145
Young-Diagramme, 144

Zeeman, 131
Zeeman-Aufspaltung, 59, 62
Zeeman-Effekt
anomaler, 63
normaler, 63
Zweiteilchen Hamilton, 82

Äquivalenzklasse, 140