

Höhere Quantenmechanik

Stefan Weinzierl

13. Dezember 2023

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	4
1.1	Literatur	4
1.2	Axiome der Quantenmechanik	4
1.3	Die Wellenfunktion	5
1.4	Operatoren	5
1.5	Erwartungswerte	9
1.6	Die Schrödingergleichung	10
1.7	Reduktion der Wellenfunktion	13
1.8	Dirac-Notation	15
1.9	Der harmonische Oszillator in der Quantenmechanik	18
1.10	Konventionen	21
2	Mehrteilchensysteme	23
2.1	Vertauschungsoperatoren	23
2.2	Mehrteilchenzustände	25
2.3	Der Fockraum	28
2.4	Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren	29
2.4.1	Bosonen	29
2.4.2	Fermionen	35
2.5	Feldoperatoren	41
2.5.1	Ortsdarstellung	42
2.5.2	Impulsdarstellung	45
2.5.3	Das Heisenbergbild	48
3	Anwendungen	52
3.1	Bosonen	52
3.1.1	Freie Bosonen	52
3.1.2	Wechselwirkende Bosonen	55
3.1.3	Suprafluidität	62
3.2	Fermionen	63
3.2.1	Freie Fermionen	64
3.2.2	Wechselwirkende Fermionen	67
3.2.3	Supraleitung	70
3.3	Streuprozesse	82
3.3.1	Der Wirkungsquerschnitt	82
3.3.2	Die S-Matrix	82
3.3.3	Kausalität	86
3.3.4	Störungstheorie	89
3.3.5	Effektive Theorien	94

4	Relativistische Quantenmechanik	96
4.1	Die Klein-Gordon-Gleichung	97
4.1.1	Teilchen und Antiteilchen	98
4.1.2	Die Viererstromdichte für Spin-0 Teilchen	99
4.1.3	Der nicht-relativistische Grenzfall	101
4.2	Die Dirac-Gleichung	102
4.2.1	Die Viererstromdichte für Spin-1/2 Teilchen	106
4.2.2	Lösungen der Dirac-Gleichung	108
4.2.3	Kovarianz der Dirac-Gleichung	114
4.2.4	Diskrete Transformationen	118
4.3	Ausblick auf die relativistische Quantenfeldtheorie	121

1 Einführung

1.1 Literatur

- F. Schwabl, Quantenmechanik für Fortgeschrittene, Springer, Berlin
- J.J. Sakurai, Advanced Quantum Mechanics, Addison-Wesley, Reading
- J.D. Bjorken, S.D. Drell, Relativistic Quantum Mechanics, McGraw-Hill, New York
- P.G. de Gennes, Superconductivity of Metals and Alloys, Westview Press, Boulder

1.2 Axiome der Quantenmechanik

Wir wiederholen die Postulate (oder Axiome) der Quantenmechanik (für ein Teilchen und eine Raumdimension):

1. Der Zustand eines Systems wird durch eine Wellenfunktion $\psi(x,t)$ beschrieben, wobei die Größe $|\psi(x,t)|^2 dx$ die Wahrscheinlichkeit angibt, daß sich das Teilchen zur Zeit t im (infinitesimalen) Volumenelement dx am Orte x befindet.
2. Jeder Observablen O entspricht ein hermitischer Operator \hat{O} , wobei der Observablen $f(O)$ der Operator $f(\hat{O})$ entspricht.
3. Der Erwartungswert eines Operators ist gegeben durch

$$\langle \hat{O} \rangle = (\psi, \hat{O} \psi) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x,t)^* \hat{O} \psi(x,t).$$

4. Die Zeitentwicklung ist durch die Schrödinger-Gleichung gegeben

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = \hat{H} \psi(x,t).$$

5. Reduktion der Wellenfunktion: Sei \hat{O} ein hermitischer Operator mit den Eigenwerten λ_n und den Eigenfunktionen ψ_n . Wird bei einer Messung von \hat{O} der Wert λ_j gemessen, so geht die Wellenfunktion des Systems über in ψ_j . Ist der Eigenwert λ_j entartet, so geht die Wellenfunktion über in eine Linearkombination der Basisfunktionen des zu λ_j gehörenden Eigenraumes.

1.3 Die Wellenfunktion

In der obigen Auflistung der Axiome haben wir uns auf eine Raumdimension beschränkt. Die Erweiterung auf drei Raumdimensionen (oder jede andere Anzahl von Raumdimensionen) stellt kein Problem dar. In drei Raumdimensionen wird ein physikalisches System durch eine Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$ beschrieben. Beschreibt die Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$ ein physikalisches Teilchen, so gibt

$$|\psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x$$

die Wahrscheinlichkeit an, das Teilchen zur Zeit t im infinitesimalen Volumenelement d^3x am Ort \vec{x} zu finden. Die Wahrscheinlichkeit ist auf Eins normiert:

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

und gleichbedeutend mit der Aussage, daß die Wahrscheinlichkeit das Teilchen zum Zeitpunkt t irgendwo anzutreffen gleich Eins ist. Die Wahrscheinlichkeitsinterpretation ist ein Teil der Kopenhagener Deutung der Quantenmechanik, insbesondere wird hiermit die deterministische Physik aufgegeben.

1.4 Operatoren

Wir wiederholen die wichtigsten Eigenschaften von Operatoren: Wir bezeichnen mit $L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ (oder kurz L^2) den Raum der quadratintegrierbaren komplexwertigen Funktionen $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$, d.h.

$$f \in L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \iff \int_{-\infty}^{\infty} dx |f(x)|^2 < \infty.$$

Für festes t sind die Wellenfunktionen $\psi(x, t)$, betrachtet als Funktionen von x , Elemente von L^2 , da

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2 = 1$$

gilt. Auf dem Funktionenraum L^2 definieren wir ein **Skalarprodukt** durch

$$(\psi_1, \psi_2) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1(x)^* \psi_2(x).$$

Dieses Skalarprodukt ist linear im zweiten Faktor und antilinear im ersten Faktor:

$$\begin{aligned} (\psi_1, c_2\psi_2 + c_3\psi_3) &= c_2(\psi_1, \psi_2) + c_3(\psi_1, \psi_3), \\ (c_1\psi_1 + c_2\psi_2, \psi_3) &= c_1^*(\psi_1, \psi_3) + c_2^*(\psi_2, \psi_3). \end{aligned}$$

Weiter gilt, wie man leicht zeigt,

$$(\psi_1, \psi_2)^* = (\psi_2, \psi_1).$$

Wir bezeichnen zwei Funktionen $\psi_1, \psi_2 \in L^2$ als **orthogonal**, falls

$$(\psi_1, \psi_2) = 0$$

gilt.

Wir wenden uns nun Operatoren zu. Es sei $D \subseteq L^2$ eine Teilmenge des Raumes der quadratintegriblen Funktionen. Eine Abbildung

$$\hat{O} : D \rightarrow L^2$$

bezeichnen wir als einen **linearen Operator**, falls gilt

$$\hat{O}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{O}\psi_1 + c_2\hat{O}\psi_2, \quad \psi_1, \psi_2 \in L^2, \quad c_1, c_2 \in \mathbb{C}.$$

Beispiele für lineare Operatoren sind

$$x, \quad \frac{\partial}{\partial x}, \quad x\frac{\partial}{\partial x} + x^3\frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

Wir sehen nun auch, warum wir uns bei der Definition eines Operators auf eine Teilmenge D (Definitionsbereich) des Raumes L^2 beschränkt haben: Im L^2 gibt es Funktionen ψ , die – da sie aus L^2 sind – quadratintegribel sind, aber andererseits dergestalt sind, so daß $(x\psi)$ nicht quadratintegribel ist. Ein Beispiel hierfür wäre eine Funktion die im Unendlichen wie $1/x$ abfällt.

Die linearen Operatoren bilden eine Algebra. Es ist

$$\begin{aligned} c\hat{O} &: \psi \rightarrow c(\hat{O}\psi), \\ \hat{O}_1 + \hat{O}_2 &: \psi \rightarrow \hat{O}_1\psi + \hat{O}_2\psi, \\ \hat{O}_1\hat{O}_2 &: \psi \rightarrow \hat{O}_1(\hat{O}_2\psi), \end{aligned}$$

Der Einsoperator und der Nulloperator sind wie folgt definiert

$$\begin{aligned} 0 &: \psi \rightarrow 0 \cdot \psi = 0, \\ 1 &: \psi \rightarrow 1 \cdot \psi = \psi. \end{aligned}$$

Wir betrachten nun Operatoren in Verbindung mit dem Skalarprodukt. Da $\hat{O}\psi_2 \in L^2$ gilt, können wir schreiben

$$(\psi_1, \hat{O}\psi_2) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1(x)^* \hat{O}\psi_2(x).$$

Wir nennen \hat{O}^\dagger den zu \hat{O} **adjungierten Operator**, falls für alle $\psi_1, \psi_2 \in L^2$ gilt

$$\left(\hat{O}^\dagger \psi_1, \psi_2\right) = \left(\psi_1, \hat{O} \psi_2\right),$$

d.h.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\hat{O}^\dagger \psi_1(x)\right)^* \psi_2(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1(x)^* \hat{O} \psi_2(x).$$

Wir nennen einen Operator \hat{O} **hermitisch** (oder **selbstadjungiert**), falls

$$\hat{O}^\dagger = \hat{O}.$$

Für einen hermiteschen Operator gilt also

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\hat{O} \psi_1(x)\right)^* \psi_2(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1(x)^* \hat{O} \psi_2(x).$$

In der Quantenmechanik sind hermitesche Operatoren besonders wichtig. Beispiele für hermitesche Operatoren sind

$$\hat{x}, \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2},$$

Der Ortsoperator ist in der Ortsraumdarstellung durch einfache Multiplikation mit x gegeben,

$$\hat{x} = x,$$

der Impulsoperator hingegen enthält einen Ableitungsoperator. Wir zeigen kurz explizit, daß der Impulsoperator hermitisch ist:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\hat{p} \psi_1(x)\right)^* \psi_2(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi_1(x)\right)^* \psi_2(x) = - \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi_1(x)^*\right) \psi_2(x) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1(x)^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi_2(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1(x)^* \hat{p} \psi_2(x), \end{aligned}$$

wobei einmal partielle Integration verwendet wurde. Desweiteren beschreibt

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 = \frac{1}{2m} \hat{p}^2,$$

den Hamilton-Operator für ein freies Teilchen. Wir können diesen Operator durch ein Produkt von zwei Impulsoperatoren ausdrücken. Wir erhalten somit auch Produkte von Operatoren. Hierbei ist zu beachten, daß in Produkten die Operatoren im allgemeinen nicht miteinander kommutieren. Um dies zu sehen, wenden wir zunächst den Ortsoperator \hat{x} und dann den Impulsoperator \hat{p} auf eine Wellenfunktion an. Die Produktregel liefert

$$\hat{p}\hat{x}\psi(x,t) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (x\psi(x,t)) = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x,t) + \frac{\hbar}{i} \psi(x,t)$$

Wenden wir dagegen zuerst den Impulsoperator \hat{p} und dann den Ortsoperator \hat{x} an, so erhalten wir

$$\hat{x}\hat{p}\psi(x,t) = x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t).$$

Wir sehen also, daß wir unterschiedliche Ergebnisse erhalten. Wir definieren den **Kommutator** zweier Operatoren als

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}.$$

Für das obige Beispiel ergibt sich

$$[\hat{x}, \hat{p}]\psi(x,t) = i\hbar\psi(x,t),$$

bzw.

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar.$$

Gilt für zwei Operatoren $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, so sagt man, daß diese Operatoren miteinander kommutieren. In diesem Fall (und nur in diesem Fall) darf man die beiden Operatoren vertauschen:

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}, \quad \text{falls } [\hat{A}, \hat{B}] = 0.$$

Klarerweise kommutiert jeder Operator mit sich selbst, d.h.

$$[\hat{A}, \hat{A}] = 0.$$

Für die Orts- und Impulsoperatoren finden wir also die Vertauschungsrelationen

$$[\hat{x}, \hat{x}] = 0, \quad [\hat{p}, \hat{p}] = 0, \quad [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar.$$

In der Ortsraumdarstellung sind der Orts- und der Impulsoperator gegeben durch

$$\hat{x} = x, \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}.$$

Unser Startpunkt für die Wiederholung der Quantenmechanik war die Beschreibung eines Teilchens durch eine Wellenfunktion $\psi(x,t)$. Da wir x als Variable gewählt haben, bezeichnen wir diese Beschreibung als **Ortsraumdarstellung**. Nun können wir auch bezüglich x eine Fouriertransformation ausführen und gelangen so zur **Impulsraumdarstellung**. Wir definieren die Fouriertransformierte $\phi(p,t)$ der Wellenfunktion $\psi(x,t)$ als

$$\phi(p,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x,t) e^{-\frac{i}{\hbar}px}.$$

Die Rücktransformation lautet

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \phi(p,t) e^{\frac{i}{\hbar}px}.$$

Wiederholen wir die Herleitung in der Impulsraumdarstellung, so finden wir, daß in der Impulsraumdarstellung der Orts- und der Impulsoperator durch

$$\hat{x} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p}, \quad \hat{p} = p$$

gegeben sind. Es läßt sich leicht nachprüfen, daß auch in der Impulsraumdarstellung die obigen Vertauschungsrelationen gelten. Die Vertauschungsrelationen sind von der gewählten Darstellung unabhängig.

1.5 Erwartungswerte

Zur Beschreibung lokalisierter Zustände verwendet man **Wellenpakete**. Ein Wellenpaket ist eine Superposition ebener Wellen zu verschiedenen Impulsen p und läßt sich schreiben als

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \phi(p) e^{\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2}{2m}t\right)}.$$

Man spricht von einem **Gaußschen Wellenpaket** falls die Funktion $\phi(p)$ von der Form

$$\phi(p) = C e^{-\frac{d^2}{\hbar^2}(p-p_0)^2}$$

ist, wobei C und d zwei Konstanten sind. Wir setzen voraus, daß die Normierungskonstante C eine reelle positive Zahl ist. Aus der Normierung der Wahrscheinlichkeit findet man

$$C = (8\pi d^2)^{\frac{1}{4}}.$$

In drei Raumdimensionen lauten die entsprechenden Formeln:

$$\psi(\vec{x},t) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \phi(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}\left(\vec{p}\cdot\vec{x} - \frac{p^2}{2m}t\right)}, \quad \phi(\vec{p}) = C e^{-\frac{d^2}{\hbar^2}(\vec{p}-\vec{p}_0)^2},$$

die Konstante d beschreibt die Breite des Wellenpaketes. Bestimmen wir noch den **Erwartungswert** für den Ort x :

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x,t)^* x \psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\psi(x,t)|^2.$$

Dieses Integral läßt sich leicht durch folgenden Trick berechnen

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x |\Psi(x,t)|^2 = \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx \left(x - \frac{p_0}{m}t\right) |\Psi(x,t)|^2}_0 + \frac{p_0}{m}t \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x,t)|^2}_1 = \frac{p_0}{m}t.$$

Der Erwartungswert des Ortes bewegt sich also mit der Geschwindigkeit $v = p_0/m$ fort. Man bezeichnet v auch als **Gruppengeschwindigkeit** des Wellenpakets. Es gilt

$$v = \frac{p_0}{m} = \left. \frac{\partial E}{\partial p} \right|_{p=p_0}.$$

Im Kontext von Wellenpaketen ist eine Unterscheidung von Gruppengeschwindigkeit und Phasengeschwindigkeit notwendig. Die **Phasengeschwindigkeit** einer einzelnen ebenen Welle ist definiert als die Geschwindigkeit konstanter Phase und für die ebene Welle $\exp(i(px - Et)/\hbar)$ gegeben durch

$$v_{\text{phase}} = \frac{E}{p} = \frac{p}{2m}.$$

Es ist zu beachten, daß die Phasengeschwindigkeit von p abhängt.

1.6 Die Schrödingergleichung

Die Zeitentwicklung der Wellenfunktion ist durch die Schrödinger-Gleichung gegeben

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \hat{H} \Psi(x,t).$$

Die Schrödinger-Gleichung ist von erster Ordnung in der Zeitableitung. Die Wellenfunktion $\Psi(\vec{x}, t)$ wird somit aus der Anfangsbedingung $\Psi(\vec{x}, 0)$ bestimmt.

Die Schrödinger-Gleichung ist linear und homogen in der Wellenfunktion. Es gilt daher das Superpositionsprinzip. Falls $\Psi_1(\vec{x}, t)$ und $\Psi_2(\vec{x}, t)$ zwei Lösungen der Schrödinger-Gleichung sind, so ist auch

$$\Psi_1(\vec{x}, t) + \Psi_2(\vec{x}, t)$$

eine Lösung der Schrödinger-Gleichung.

Oft hängt der Hamilton-Operator nicht von der Zeit t ab. Für zeitunabhängige Hamilton-Operatoren führt der Separationsansatz

$$\Psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \psi(x)$$

die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \hat{H} \Psi(x,t)$$

über in die Eigenwert-Gleichung

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x).$$

Bemerkung: Einen Zustand der Form $\psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi(x)$ bezeichnet man als **stationären Zustand**, da die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$|\psi(x, t)|^2 = |\psi(x)|^2$$

nicht von der Zeit abhängt.

Eine Faustregel zur Bestimmung des Hamilton-Operators erhält man aus dem **Korrespondenzprinzip**. Das Korrespondenzprinzip besagt, daß quantenmechanische Gesetzmäßigkeiten für $\hbar \rightarrow 0$ in klassische übergehen müssen. Die klassische Mechanik stellt also einen Grenzfall der Quantenmechanik dar. Somit läßt sich die klassische Mechanik aus der Quantenmechanik ableiten. Da die Quantenmechanik eine allgemeinere Theorie darstellt, gilt die Umkehrung natürlich nicht.

In der Praxis kennt man üblicherweise die klassischen Gesetzmäßigkeiten und sucht die quantenmechanische Entsprechung. Wir werden nun einige einfache Substitutionsregeln angeben und dann auf die Unzulänglichkeiten dieser Regeln eingehen.

Wir wissen bereits, daß die klassischen Größen x und p in der Quantenmechanik in die Operatoren \hat{x} und \hat{p} übergehen. In der Ortsraumdarstellung sind diese Operatoren gegeben durch

$$\hat{x} = x, \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}.$$

In der klassischen Mechanik lautet die Hamiltonfunktion für ein freies Teilchen

$$H = \frac{p^2}{2m},$$

in der Quantenmechanik haben wir bereits den Hamiltonoperator für ein freies Teilchen kennengelernt

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}.$$

Wir können nun die Verallgemeinerung auf ein Teilchen betrachten, das sich in einem Potential $V(x)$ befindet: In der klassischen Mechanik ist die Hamiltonfunktion

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x),$$

in der Quantenmechanik ersetzen wir klassische Größen durch Operatoren und erhalten

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}).$$

Insbesondere können wir nun auch die Schrödingergleichung für ein Teilchen in einem Potential angeben. Sie lautet

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = \hat{H} \psi(x,t), \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}).$$

In den meisten Fällen wird die einfache Faustregel “Ersetze die klassischen Größen x und p durch die entsprechenden Operatoren \hat{x} und \hat{p} ” ausreichend sein, es soll allerdings darauf hingewiesen werden, daß diese Vorschrift im Allgemeinen nicht eindeutig ist. Dieses Problem tritt zum ersten Mal auf, sobald man die quantenmechanische Entsprechung der klassischen Größe (xp) sucht. Da \hat{x} und \hat{p} nicht miteinander kommutieren, sind

$$\hat{x}\hat{p} \quad \text{und} \quad \hat{p}\hat{x}$$

unterschiedliche Operatoren. Die quantenmechanische Entsprechung soll ein hermitescher Operator sein, daher erhält man in diesem Fall noch eine eindeutige Entsprechung, die durch

$$\frac{1}{2} (\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})$$

gegeben ist. Betrachtet man allerdings das nächstkompliziertere Beispiel (x^2p) , so liefert auch die Forderung der Hermitizität keine eindeutige quantenmechanische Entsprechung mehr, da sowohl

$$\frac{1}{2} (\hat{x}^2\hat{p} + \hat{p}\hat{x}^2)$$

als auch

$$\hat{x}\hat{p}\hat{x}$$

hermitesche Operatoren sind.

Bemerkungen:

- Für eine Hamiltonfunktion der Form $H(x, p) = T(p) + V(x)$ sind diese Überlegungen irrelevant, da keine gemischten Terme (xp) auftreten.
- Da die Quantenmechanik eine allgemeinere Theorie als die klassische Mechanik ist, erwarten wir auch, daß sich die klassische Mechanik nicht eindeutig in die Quantenmechanik fortsetzen läßt.
- Für Probleme, die sich in der theoretischen Beschreibung nicht eindeutig von der klassischen Mechanik in die Quantenmechanik fortsetzen lassen, wird die korrekte quantenmechanische Beschreibung durch einen Vergleich mit dem Experiment bestimmt.

1.7 Reduktion der Wellenfunktion

Wir betrachten nun einen Operator \hat{O} . Wir nennen $\psi(x, t)$ eine **Eigenfunktion** des Operators \hat{O} zum **Eigenwert** λ , falls gilt

$$\hat{O} \psi(x, t) = \lambda \psi(x, t).$$

Für hermitesche Operatoren gilt, daß alle Eigenwerte reell sind.

Für hermitesche Operatoren gilt weiter, daß Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten orthogonal sind.

Die Menge aller Eigenwerte eines Operators wird auch als das **Spektrum** des Operators bezeichnet. Wir werden später Beispiele kennenlernen, in denen das Spektrum eines Operators eine diskrete Menge ist (beispielsweise Hamilton-Operator des harmonischen Oszillators), eine kontinuierliche Menge (beispielsweise Impulsoperator für ein freies Teilchen) oder eine Kombination beider Möglichkeiten (beispielsweise Hamilton-Operator für das Wasserstoffatom).

Diskutieren wir zunächst den Fall eines hermiteschen Operators \hat{O} mit einem diskreten Spektrum. Wir bezeichnen mit ψ_n die Eigenfunktionen und mit λ_n die zugehörigen Eigenwerte, wobei wir $n \in \mathbb{N}$ annehmen wollen. Wir wissen bereits, daß Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten orthogonal sind. Tritt ein Eigenwert mehrmals auf, so spricht man von **Entartung**. Mit Hilfe des Schmidtschen Orthonormalisierungsverfahren kann man auch in diesem Fall eine orthonormale Basis wählen. Wir können also voraussetzen

$$(\psi_i, \psi_j) = \delta_{ij}.$$

Darüberhinaus bildet die Menge aller Eigenfunktionen ψ_n ein vollständiges Funktionensystem, d.h. es gilt

$$\sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(x', t)^* \psi_n(x, t) = \delta(x - x').$$

Kombiniert man beide Eigenschaften, so ergibt sich, daß die Eigenfunktionen ψ_n ein **vollständiges Orthonormalsystem** bilden.

Betrachten wir nun einen hermiteschen Operator \hat{O} mit Eigenwerten λ_n und Eigenfunktionen ψ_n , wobei wir uns für die Messung der Observablen \hat{O} interessieren. Wir setzen voraus, daß die Eigenfunktionen ein vollständiges Orthonormalsystem bilden. Aus der Vollständigkeit folgt, daß sich eine beliebige Wellenfunktion $\psi(x, t)$ (nicht notwendigerweise eine Eigenfunktion zu \hat{O}) durch die Eigenfunktionen $\psi_n(x, t)$ des Operators \hat{O} darstellen läßt:

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x, t), \quad c_n = (\psi_n, \psi).$$

Für die Wahrscheinlichkeitsdichte im Raum der Meßwerte läßt sich zeigen

$$w(\lambda) = \sum_n |c_n|^2 \delta(\lambda - \lambda_n).$$

Wir sehen also, daß bei einer Messung der Observablen \hat{O} als mögliche Meßwerte nur die Eigenwerte λ_n auftreten. Wir sehen weiter, daß die Wahrscheinlichkeit bei einer Messung der Observablen \hat{O} den Meßwert λ_n zu erhalten, gleich $|c_n|^2$ ist.

Betrachten wir nun die folgende Situation: Wir betrachten ein System, das durch die Wellenfunktion ψ beschrieben wird, sowie eine Observable \hat{O} . Wir messen \hat{O} und nehmen an, daß die Messung den Wert λ_n liefert. Unmittelbar nach dieser ersten Messung wiederholen wir die Messung ein zweites Mal. Wir erwarten (und verifizieren experimentell), daß auch die zweite Messung den Wert λ_n liefert. Wir betrachten nun die Konsequenzen für die Wellenfunktion des Systems. Vor der ersten Messung befindet sich unser System in einem allgemeinen Zustand, den wir als

$$\Psi_{\text{before}} = \sum_n c_n \Psi_n$$

schreiben können. Die Wahrscheinlichkeit, den Wert λ_n zu messen, beträgt also $|c_n|^2$. Wurde in der ersten Messung λ_n gemessen, so ist die Wahrscheinlichkeit, in der zweiten Messung wieder λ_n zu messen, gleich Eins und Null für alle anderen Werte von λ . Damit befindet sich das System im Eigenzustand Ψ_n und wird durch die Wellenfunktion

$$\Psi_{\text{after}} = \Psi_n$$

beschrieben. Wir sehen also, daß die (erste) Messung die Wellenfunktion des Systems verändert hat. Liefert die Messung einer Observablen \hat{O} den Wert λ_n (wir wissen bereits, daß λ_n ein Eigenwert von \hat{O} sein muß), so geht die Wellenfunktion des Systems unmittelbar nach der Messung in den Zustand Ψ_n über. Dies wird als **Reduktion der Wellenfunktion** bezeichnet. Diese Aussage werden als letztes ausstehendes Axiom der Quantenmechanik wiederfinden.

Wir haben in der obigen Ableitung Operatoren mit einem diskreten Spektrum betrachtet, und möchten nun noch auch auf Operatoren mit einem kontinuierlichen Spektrum eingehen. Als ein Beispiel betrachten wir den Impulsoperator

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}.$$

Wir verifizieren, daß die Funktionen

$$\Psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p x}$$

Eigenfunktionen zu dem Eigenwert p sind:

$$\hat{p}\Psi_p(x) = p\Psi_p(x).$$

Die Impulseigenfunktionen werden durch die kontinuierliche Variable p indiziert. Im Falle eines kontinuierlichen Spektrums lautet die Orthogonalitätsrelation

$$(\Psi_{p'}, \Psi_p) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_{p'}(x)^* \Psi_p(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar} p' x} e^{\frac{i}{\hbar} p x} = \delta(p - p').$$

Bemerkung: Offensichtlich sind die Impulseigenfunktionen mit der gewählten Normierung nicht auf Eins normiert. Sie sind aber dennoch nützlich. Durch eine Superposition von Impulseigenzuständen kann man Wellenpakete konstruieren, die quadratintegabel und somit auf Eins normierbar sind.

Alternativ kann man das Problem der Normierbarkeit von Kontinuumszuständen dadurch umgehen, daß man ein endliches Volumen V einführt. In einer Dimension ist $V = L$. In diesem Fall werden die Kontinuumszustände diskret

$$p = \frac{\pi\hbar}{L}n, \quad n \in \mathbb{N}$$

und man kann auf Eins normieren.

Die Vollständigkeitsrelation lautet

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp \Psi_p(x')^* \Psi_p(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-\frac{i}{\hbar}px'} e^{\frac{i}{\hbar}px} = \delta(x-x').$$

In einigen wichtigen Fällen besteht das Spektrum eines Operators sowohl aus einem diskreten als auch aus einem kontinuierlichen Teil. In diesem Fall lautet die Entwicklung einer beliebigen Wellenfunktion ψ nach den Eigenfunktionen des Operators \hat{O} :

$$\psi = \sum_n c_n \Psi_n + \int da c_a \Psi_a,$$

wobei die Eigenfunktionen zu diskreten Eigenwerten mit Ψ_n bezeichnet wurden, während die Eigenfunktionen zu kontinuierlichen Eigenwerten mit Ψ_a bezeichnet wurden.

1.8 Dirac-Notation

In den Beispielen, die wir bisher betrachtet haben wird ein Zustand in der Quantenmechanik durch eine Wellenfunktion $\psi(x)$ beschrieben. Die Wellenfunktion $\psi(x)$ ist quadratintegabel und somit ein Vektor im Hilbertraum L^2 . Etwas abstrakter können wir die obige Aussage umformulieren: In der Quantenmechanik werden Zustände durch Vektoren in einem Hilbertraum beschrieben.

Wir führen nun die Bra-Ket-Notation von Dirac ein. Anstelle von $\psi(x)$ verwenden wir die Schreibweise

$$|\psi\rangle$$

für Vektoren des Hilbertraumes. Wir bezeichnen $|\psi\rangle$ als einen **Ket-Vektor**. Während $\psi(x)$ die Ortsraumdarstellung impliziert, ist die Schreibweise $|\psi\rangle$ unabhängig von einer Darstellung. Bezeichnet $\Psi_n(x)$ die Eigenfunktion eines Operators mit der (diskreten) Quantenzahl n , so verwenden wir anstelle von $|\Psi_n\rangle$ die Kurzschreibweise

$$|n\rangle.$$

Diese Kurzschreibweise gilt analog für Eigenfunktionen zu kontinuierlichen Eigenwerten, so notieren wir beispielsweise die Impulseigenfunktionen $\psi_p(x)$ durch

$$|p\rangle.$$

Analoges gilt für den Fall, daß eine Wellenfunktion gleichzeitig Eigenfunktion von mehreren Operatoren ist und durch mehrere Quantenzahlen charakterisiert wird. Beispielsweise verwenden wir für $\psi_{n,l,m}(x)$ die Schreibweise

$$|n, l, m\rangle.$$

Zu einem gegebenen Hilbertraum V können wir auch den dualen Raum V^* betrachten, das ist die Menge aller beschränkten linearen Abbildungen

$$f^* : V \rightarrow \mathbb{C}.$$

Hierbei bedeutet die Beschränktheit, daß es eine Konstante $c > 0$ gibt, so daß

$$|f^*(g)| \leq c \|g\|, \quad \forall g \in V.$$

Es läßt sich zeigen, daß V^* und V isometrisch isomorph sind. Daher unterscheiden wir auch nicht weiter zwischen f^* und f . Elemente aus dem dualen Raum V^* notieren wir mit

$$\langle \psi |$$

und bezeichnen sie als **Bra-Vektoren**. Die Elemente $\langle \psi |$ sind beschränkte lineare Funktionale, die auf Elemente $|\xi\rangle \in V$ angewandt werden können. Die Notation ist dabei so gewählt, daß

$$\langle \psi | (|\xi\rangle) = \langle \psi | \xi \rangle$$

gilt. Hierbei steht auf der linken Seite das Funktional, das auf den Vektor $|\xi\rangle$ angewandt wird, auf der rechten Seite steht das Skalarprodukt des Hilbertraumes. Aufgrund des oben erwähnten Isomorphismuses zwischen V^* und V können wir $\langle \psi |$ mit einem Vektor aus V identifizieren, der dann im ersten Argument des Skalarproduktes auftritt.

Als ein Beispiel betrachten wir den unendlich dimensionalen Hilbertraum $L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ mit einer Orthonormalbasis gegeben durch die Funktionen $(|1\rangle, |2\rangle, \dots) = (\psi_1(x), \psi_2(x), \dots)$. Es sei $|\psi\rangle = \psi(x)$ ein Element des L^2 . Der Bra-Vektor $\langle \psi |$ ist dann die (beschränkte) Linearform

$$\langle \psi | = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x)^* \bullet,$$

wobei der Punkt andeutet, daß wenn diese Linearform auf ein Element $|\xi\rangle = \xi(x)$ des L^2 angewandt wird, an dieser Stelle $\xi(x)$ eingesetzt wird.

Die Dirac-Notation hat den Vorteil, daß sich die Orthogonalitätsrelationen und die Vollständigkeitsrelationen besonders einfach aufschreiben lassen. Es sei $|1\rangle, |2\rangle, \dots$ eine abzählbare Orthonormalbasis eines Hilbertraumes. Die Orthogonalitätsrelation lautet dann

$$\langle n|m \rangle = \delta_{nm}.$$

Die Vollständigkeitsrelation lautet

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1.$$

Wir betrachten auch noch den Fall eines kontinuierlichen Spektrums. Bilden die $|v\rangle$ ein vollständiges Funktionensystem, wobei v eine kontinuierliche Variable ist, so lautet die Vollständigkeitsrelation

$$\int dv |v\rangle\langle v| = 1.$$

Enthält das Spektrum sowohl einen diskreten als auch einen kontinuierlichen Anteil, so lautet die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_n |n\rangle\langle n| + \int dv |v\rangle\langle v| = 1.$$

Für Operatoren verwenden wir die Notation

$$\langle \psi | \hat{O} | \xi \rangle = \langle \psi | \hat{O} \xi \rangle.$$

Dies definiert den Ausdruck auf der linken Seite durch die Wirkung von \hat{O} auf $|\xi\rangle$. Desweiteren definieren wir die Wirkung von \hat{O} auf $\langle \psi |$ durch

$$\langle \psi | \hat{O} = \langle \psi | \hat{O} \cdot 1 = \sum_n \langle \psi | \hat{O} | n \rangle \langle n |,$$

wobei wir angenommen haben, daß die $|n\rangle$ eine Orthonormalbasis des Hilbertraumes und damit insbesondere ein vollständiges Funktionensystem bilden. Die Definitionen der Wirkung des Operators \hat{O} nach links und nach rechts sind miteinander verträglich, denn es ist

$$(\langle \psi | \hat{O} | \xi \rangle) = \sum_n \langle \psi | \hat{O} | n \rangle \langle n | \xi \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \xi \rangle = \langle \psi | \hat{O} \xi \rangle.$$

Es wieder $|1\rangle, |2\rangle, \dots$ eine Orthonormalbasis eines Hilbertraumes V und \hat{O} ein Operator. Wir definieren die **Matrixelemente** O_{nm} des Operators \hat{O} in der Basis $|1\rangle, |2\rangle, \dots$ durch

$$O_{nm} = \langle n | \hat{O} | m \rangle.$$

Kennen wir alle Matrixelemente eines Operators, so können wir den Operator rekonstruieren. Es ist

$$\hat{O} = \sum_{n,m} O_{nm} |n\rangle\langle m|.$$

1.9 Der harmonische Oszillator in der Quantenmechanik

Als ein Beispiel betrachten wir den harmonischen Oszillator in einer Dimension. Der Hamilton-Operator lautet

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2.$$

Dieser Hamilton-Operator ist zeitunabhängig, so daß wir für die Wellenfunktion $\psi(x,t)$ den Separationsansatz

$$\Psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi(x)$$

wählen können. Die Schrödinger-Gleichung reduziert sich dann auf die Eigenwert-Gleichung

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x).$$

Unser Ziel ist es, die Eigenwerte und Eigenfunktionen dieser Gleichung zu bestimmen. Ausführlich aufgeschrieben betrachten wir die Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - E \right] \psi(x) = 0.$$

Wir führen zunächst eine charakteristische Länge

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

ein, so daß sich die Differentialgleichung als

$$\left[x_0^2 \frac{d^2}{dx^2} - \frac{x^2}{x_0^2} + 2 \frac{E}{\hbar\omega} \right] \psi(x) = 0.$$

schreiben läßt. Wir suchen also eine Lösung dieser Differentialgleichung mit der Nebenbedingung, daß die Lösung quadratintegrierbar sein soll. Diese Lösung kann auf zwei verschiedene Arten bestimmt werden: Beim ersten Verfahren suchen wir mittels eines Potenzreihenansatzes nach einer Lösung. Dieses "brute force"-Verfahren hat den Vorteil, daß es sich auch auf andere Probleme übertragen läßt. Das zweite Verfahren ist wesentlich eleganter und verwendet algebraische Methoden und führt Auf- und Abstiegsoperatoren ein. Diese Verfahren hat den Vorteil, daß in einem einfachen Beispiel Auf- und Abstiegsoperatoren eingeführt werden, die in der weiteren Quantenmechanik bishin zur Quantenfeldtheorie vielfach Verwendung finden werden. Unabhängig von der Lösungsmethode findet man, daß die Eigenwerte und Eigenfunktionen durch

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n \in \mathbb{N}_0,$$

und

$$|n\rangle = \Psi_n(x) = (2^n \sqrt{\pi} n! x_0)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right)$$

gegeben sind. Hierbei bezeichnen $H_n(\xi)$ die Hermite-Polynome, definiert durch

$$e^{-t^2+2\xi t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) t^n.$$

Alternativ lassen sich die Hermite-Polynome auch explizit definieren:

$$H_n(\xi) = n! \sum_{m=0}^{[n/2]} (-1)^m \frac{(2\xi)^{n-2m}}{m!(n-2m)!}.$$

Hilfreich ist auch die Definition durch die Formel von Rodrigues:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}.$$

Als vierte Möglichkeit können die Hermite-Polynome rekursiv durch

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2n H_{n-1}(\xi)$$

definiert werden. Hieraus findet man leicht die Hermite-Polynome für kleines n :

$$\begin{aligned} H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2, \\ H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi, \\ H_4(\xi) &= 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12, \\ H_5(\xi) &= 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi. \end{aligned}$$

Setzen wir

$$u_n(\xi) = (2^n \sqrt{\pi} n!)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi)$$

so gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi u_n(\xi) u_m(\xi) = \delta_{nm}.$$

Man bezeichnet die Familie $u_n(\xi)$ auch als zu den Hermite-Polynomen assoziierte Funktionen. Die Funktionen $u_n(\xi)$ bilden ein vollständiges System, denn es gilt

$$\sum_{n=0}^{\infty} u_n(\xi) u_n(\xi') = \delta(\xi - \xi').$$

Betrachten wir noch die Auf- und Absteigeoperatoren: Wir definieren einen nicht-hermiteschen Operator \hat{a} wie folgt

$$\hat{a} = \frac{m\omega\hat{x} + i\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} + x_0 \frac{d}{dx} \right).$$

Der Operator \hat{a} wird als **Absteigeoperator** oder **Vernichtungsoperator** bezeichnet. Der Operator \hat{a} ist offensichtlich nicht hermitisch, aufgrund des Faktors i vor \hat{p} . Der zu \hat{a} adjungierte Operator lautet

$$\hat{a}^\dagger = \frac{m\omega\hat{x} - i\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} - x_0 \frac{d}{dx} \right).$$

Man bezeichnet den Operator \hat{a}^\dagger als **Aufsteigeoperator** oder **Erzeugungsoperator**. Der Kommutator dieser beiden Operatoren ist

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1,$$

wie man leicht durch Nachrechnen zeigt. Die Umkehrung der obigen Gleichungen erlaubt uns, \hat{x} und \hat{p} durch \hat{a} und \hat{a}^\dagger auszudrücken:

$$\begin{aligned} \hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) = \frac{x_0}{\sqrt{2}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \\ \hat{p} &= -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) = -\frac{i\hbar}{x_0\sqrt{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger). \end{aligned}$$

Setzen wir diese Ausdrücke für \hat{x} und \hat{p} in den Hamilton-Operator ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x} = -\frac{\hbar^2}{4x_0^2m} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 + \frac{x_0^2}{4}m\omega^2 (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 \\ &= -\frac{1}{4}\hbar\omega (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 + \frac{1}{4}\hbar\omega (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 = \frac{1}{2}\hbar\omega (\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger). \end{aligned}$$

Verwenden wir noch die Kommutatorrelation $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$, so erhalten wir letztendlich

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right).$$

Wir setzen

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$$

und bezeichnen \hat{N} als **Besetzungszahloperator**. Die Bestimmung der Eigenwerte und der Eigenfunktionen des Hamilton-Operators ist äquivalent zu der Bestimmung der Eigenwerte und der Eigenfunktionen des Besetzungszahloperators. Für den Grundzustand gilt

$$\hat{a} |0\rangle = 0.$$

Dies ist eine Differentialgleichung erster Ordnung für den Grundzustand:

$$\left(\frac{x}{x_0} + x_0 \frac{d}{dx}\right) |0\rangle = 0.$$

Man verifiziert leicht, daß $c \exp(-x^2/(2x_0^2))$ eine Lösung ist. Normiert man diese Lösung auf Eins, so erhält man

$$|0\rangle = (\sqrt{\pi} x_0)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^2}$$

Diese Lösung für den Grundzustand stimmt mit der entsprechenden Lösung, die wir im Rahmen der ersten Methode (Potenzreihenansatz) gewonnen haben, überein.

Die weiteren Lösungen sind im Rahmen der algebraischen Methode gegeben durch

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle.$$

1.10 Konventionen

Im Folgenden stellen wir noch unsere wichtigsten Konventionen zusammen:

Wir bezeichnen mit \vec{x} einen (drei-dimensionalen) räumlichen Vektor. Für die Fouriertransformierte einer Funktion $f(\vec{x})$ verwenden wir die Konvention

$$\tilde{f}(\vec{p}) = \int d^3x e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} f(\vec{x}), \quad f(\vec{x}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \tilde{f}(\vec{p}).$$

Die Fourierdarstellung der Diracschen Deltafunktion lautet

$$\delta(\vec{x}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}}.$$

Für Orts- und Impulseigenzustände verwenden wir die Normierung

$$\langle \vec{x} | \vec{y} \rangle = \delta(\vec{x} - \vec{y}), \quad \langle \vec{p} | \vec{q} \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{q}).$$

Diese Zustände sind nicht auf Eins normiert. Es ist

$$\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}}.$$

Benötigt man auf Eins normierte Zustände, so betrachtet man Wellenpakete oder alternativ ein endliches Volumen. Wir diskutieren kurz die zweite Möglichkeit. In einem endlichen Volumen $V = L^3$ sind die Impulseigenwerte diskret:

$$\vec{p} = \frac{2\pi\hbar}{L} \vec{v}, \quad \vec{v} \in \mathbb{Z}^3.$$

Wir verwenden in diesem Fall die Normierung

$$\langle \vec{p} | \vec{q} \rangle = \delta_{\vec{p}, \vec{q}}.$$

Es ist nun

$$\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{p} \cdot \vec{x}},$$

Mit

$$\Delta p = \frac{2\pi\hbar}{L}$$

ist

$$\sum_{\vec{p}} = \frac{1}{(\Delta p)^3} \sum_{\vec{p}} (\Delta p)^3 = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p,$$

und daher

$$\frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p.$$

Aufgrund der unterschiedlichen Normierung der Einteilchenzustände gilt für die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren folgender Zusammenhang zwischen dem kontinuierlichen und diskreten Fall:

$$(\hat{a}_{\vec{p}})^{\text{cont}} = \sqrt{\frac{V}{(2\pi\hbar)^3}} (\hat{a}_{\vec{p}})^{\text{discr}}, \quad (\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger)^{\text{cont}} = \sqrt{\frac{V}{(2\pi\hbar)^3}} (\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger)^{\text{discr}}.$$

Für den Zusammenhang zwischen dem Kronecker Deltasymbol und der Diracschen Deltafunktion gilt

$$V \delta_{\vec{p}, \vec{q}} = (2\pi\hbar)^3 \delta(\vec{p} - \vec{q}).$$

2 Mehrteilchensysteme

2.1 Vertauschungsoperatoren

Wir betrachten nun quantenmechanische Systeme mit mehreren Teilchen. Für ein System mit N Teilchen ohne Spin ist die Wellenfunktion im Schrödingerbild dann eine Funktion der N Ortskoordinaten \vec{x}_i und der Zeit t :

$$\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N, t).$$

Wir betrachten allerdings gleich die allgemeine Situation, in der die Teilchen auch einen Spin haben. Haben wir nur ein Teilchen, so betrachten wir zunächst eine orthonormale Basis des Ein-Teilchen-Hilbertraumes $|n\rangle$. Hierbei steht n als Abkürzung für einen vollständigen Satz von Quantenzahlen, beispielsweise $n = (\vec{x}, s, m)$, d.h. die Eigenwerte zu den Operatoren \vec{x} , \vec{S}^2 und \hat{S}_3 . Als eine Basis des N -Teilchen-Hilbertraumes können wir dann

$$|n_1\rangle_1 \otimes |n_2\rangle_2 \otimes \dots \otimes |n_N\rangle_N$$

verwenden. Zur Abkürzung schreiben wir

$$|1, 2, \dots, N\rangle = |n_1\rangle_1 \otimes |n_2\rangle_2 \otimes \dots \otimes |n_N\rangle_N$$

Dies bedeutet, daß sich Teilchen 1 im Zustand $|n_1\rangle$, Teilchen 2 im Zustand $|n_2\rangle$, usw. befindet. Allgemein bedeutet die Notation

$$|j\rangle_i,$$

daß sich Teilchen i im Zustand j befindet. Wir führen nun den **Vertauschungsoperator** \hat{P}_{ij} ein, welcher die Eigenwerte der Teilchen i und j miteinander vertauscht:

$$\hat{P}_{ij} |1, \dots, n_i, \dots, n_j, \dots, N\rangle = |1, \dots, n_j, \dots, n_i, \dots, N\rangle.$$

Im Zustand $|1, \dots, j, \dots, i, \dots, N\rangle$ befindet sich Teilchen i im Zustand $|n_j\rangle$, während sich Teilchen j im Zustand $|n_i\rangle$ befindet. Offensichtlich ist

$$\hat{P}_{ij}^2 = 1$$

und somit hat \hat{P}_{ij} die Eigenwerte $+1$ und -1 . Wir betrachten nun ein System mit N identischen Teilchen. Wir setzen voraus, daß der Hamilton-Operator mit allen Vertauschungsoperatoren kommutiert:

$$[\hat{H}, \hat{P}_{ij}] = 0, \quad \forall i, j \in \{1, 2, \dots, N\}, \quad i \neq j.$$

Ist nun $|\psi\rangle$ ein N -Teilchen-Eigenzustand zu \hat{H} , dann ist auch $\hat{P}_{ij}|\psi\rangle$ ein Eigenzustand zum gleichen Eigenwert:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \Rightarrow \hat{H}\hat{P}_{ij}|\psi\rangle = \hat{P}_{ij}\hat{H}|\psi\rangle = E\hat{P}_{ij}|\psi\rangle.$$

Wir stellen weitere Eigenschaften des Operators \hat{P}_{ij} zusammen: Es gilt

$$\langle \hat{P}_{ij} \phi | \hat{P}_{ij} \psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle.$$

Dies folgt durch Umbenennung der Integrationsvariablen. Der adjungierte Operator ist durch

$$\langle \hat{P}_{ij}^\dagger \phi | \psi \rangle = \langle \phi | \hat{P}_{ij} \psi \rangle$$

definiert. Nun ist

$$\langle \phi | \hat{P}_{ij} \psi \rangle = \langle \hat{P}_{ij}^{-1} \phi | \hat{P}_{ij}^{-1} \hat{P}_{ij} \psi \rangle = \langle \hat{P}_{ij}^{-1} \phi | \psi \rangle$$

und somit $\hat{P}_{ij}^\dagger = \hat{P}_{ij}^{-1}$. Wegen $\hat{P}_{ij}^2 = 1$ gilt weiter $\hat{P}_{ij}^{-1} = \hat{P}_{ij}$ und wir erhalten somit

$$\hat{P}_{ij} = \hat{P}_{ij}^\dagger = \hat{P}_{ij}^{-1}.$$

\hat{P}_{ij} ist somit sowohl unitär als auch hermitisch.

Wir haben vorausgesetzt, daß \hat{H} mit allen Vertauschungsoperatoren \hat{P}_{ij} kommutiert. Dies impliziert nicht, daß \hat{H} und alle \hat{P}_{ij} einen Satz kommutierender Operatoren bilden, da die \hat{P}_{ij} im allgemeinen nicht untereinander kommutieren. (Die Vertauschungsoperatoren generieren die Gruppe S_N , diese ist für $N \geq 3$ nicht kommutativ.)

Greifen wir nun einen Vertauschungsoperator \hat{P}_{ij} heraus. Da \hat{P}_{ij} mit \hat{H} kommutiert, können wir gleichzeitige Eigenzustände zu \hat{H} und \hat{P}_{ij} betrachten. Für diese Zustände verwenden wir der Einfachheit halber wieder die Notation $|1, \dots, N\rangle$, die Eigenzustände sind aber im allgemeinen Linearkombinationen der obigen Basisvektoren. \hat{P}_{ij} hat die Eigenwerte ± 1 . Es gilt somit entweder

$$\hat{P}_{ij} |1, \dots, i, \dots, j, \dots, N\rangle = |1, \dots, i, \dots, j, \dots, N\rangle,$$

oder

$$\hat{P}_{ij} |1, \dots, i, \dots, j, \dots, N\rangle = -|1, \dots, i, \dots, j, \dots, N\rangle.$$

Da alle Teilchen identisch sind und somit i und j nicht ausgezeichnet sind, fordern wir nun, daß dies für alle Paare (i, j) mit $i \neq j$ gilt, d.h. wir fordern, daß entweder immer

$$\hat{P}_{ij} |1, \dots, i, \dots, j, \dots, N\rangle = |1, \dots, i, \dots, j, \dots, N\rangle,$$

oder immer

$$\hat{P}_{ij} |1, \dots, i, \dots, j, \dots, N\rangle = -|1, \dots, i, \dots, j, \dots, N\rangle.$$

Im ersten Fall bezeichnen wir die Teilchen als **Bosonen**, im zweiten Fall als **Fermionen**. Im Rahmen der Quantenfeldtheorie läßt sich zeigen, daß Bosonen immer ganzzahligen Spin haben,

Fermionen dagegen immer halbzahligen Spin haben. Dieser Satz wird als **Spin-Statistik-Theorem** bezeichnet.

Bemerkung: Das identische Teilchen immer die gleichen Eigenwerte bezüglich Vertauschung haben müssen, sieht man wie folgt: Angenommen, i, j, k seien drei identische Teilchen und der Zustand $|\dots i, \dots j, \dots k, \dots\rangle$ sei symmetrisch bezüglich einer Vertauschung $i \leftrightarrow j$ als auch einer Vertauschung $j \leftrightarrow k$, aber anti-symmetrisch bezüglich einer Vertauschung $i \leftrightarrow k$. Dann ist

$$\begin{aligned} |\dots i, \dots j, \dots k, \dots\rangle &= |\dots j, \dots i, \dots k, \dots\rangle = |\dots k, \dots i, \dots j, \dots\rangle = -|\dots i, \dots k, \dots j, \dots\rangle \\ &= -|\dots i, \dots j, \dots k, \dots\rangle. \end{aligned}$$

Somit folgt

$$|\dots i, \dots j, \dots k, \dots\rangle = 0.$$

Analog argumentiert man im Falle, daß zwei Vertauschungen anti-symmetrisch sind und eine Vertauschung symmetrisch ist.

2.2 Mehrteilchenzustände

Wir bezeichnen eine Operator \hat{O} als **symmetrisch**, falls er mit allen Vertauschungen \hat{P}_{ij} kommutiert:

$$[\hat{O}, \hat{P}_{ij}] = 0, \quad \text{bzw. } \hat{O} = \hat{P}_{ij} \hat{O} \hat{P}_{ij}.$$

Für symmetrische Operatoren gilt

$$\langle \hat{P}_{ij} \phi | \hat{O} | \hat{P}_{ij} \psi \rangle = \langle \phi | \hat{P}_{ij}^\dagger \hat{O} \hat{P}_{ij} | \psi \rangle = \langle \phi | \hat{O} | \psi \rangle.$$

Symmetrische Operatoren haben also in den Zuständen $\langle \phi |, | \psi \rangle$ und $\langle \hat{P}_{ij} \phi |, \hat{P}_{ij} | \psi \rangle$ die gleichen Matrixelemente. Es gilt auch die Umkehrung: Sind alle Matrixelemente zwischen den Zuständen $\langle \phi |, | \psi \rangle$ und $\langle \hat{P}_{ij} \phi |, \hat{P}_{ij} | \psi \rangle$ gleich, so ist der Operator symmetrisch. Da wir in der Quantenmechanik identische Teilchen nicht unterscheiden können, betrachten wir in der Quantenmechanik nur Operatoren, die symmetrisch in ununterscheidbaren Teilchen sind.

Wir betrachten nun N identische nicht wechselwirkende Teilchen mit Spin s . Der Hamilton-Operator ist dann die Summe freier Ein-Teilchen-Hamilton-Operatoren:

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2m} \vec{p}_j^2.$$

Ein einzelnes Teilchen wird durch drei Quantenzahlen \vec{p} , s und m (hierbei ist der Eigenwert bezüglich \hat{S}_3 gemeint) charakterisiert. Zu gegebenen \vec{p} und s sind die Ein-Teilchen-Eigenzustände $(2s+1)$ -fach entartet. Wir haben

$$\Psi_{\vec{p}, s, m}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}} |s, m\rangle.$$

In unserem System aus N Teilchen bezeichnen wir die auftretenden Ein-Teilchen-Eigenzustände mit $\vec{p}_{1,s,m_1}, \dots, \vec{p}_{N,s,m_N}$. (Da alle Teilchen identisch sind und den Spin s haben, ist die Quantenzahl s natürlich für alle Ein-Teilchen-Eigenzustände gleich.) Die Reihenfolge dieser Auflistung impliziert nicht, daß sich das i -te Teilchen im i -ten Ein-Teilchen-Eigenzustand befindet. Zur Vereinfachung schreiben wir für den Fall, daß sich das i -te Teilchen im j -ten Ein-Teilchen-Eigenzustand befindet

$$\Psi_j(i) = \Psi_{\vec{p}_{j,s,m_j}}(\vec{x}_i).$$

Kürzen wir die einzelnen Tripel \vec{p}_{j,s,m_j} mit n_j ab, so ist der Zusammenhang mit der Bra-Ket-Schreibweise des vorherigen Abschnittes

$$|n_j\rangle_i = \Psi_j(i).$$

In diesem Abschnitt ist es etwas intuitiver, die Wellenfunktions-Schreibweise $\Psi_j(i)$ anstelle der Bra-Ket-Schreibweise zu verwenden. In der Bra-Ket-Notation ist impliziert, daß wir alle Zustände durchnummerieren, beginnend mit dem Grundzustand $|0\rangle$. n_j ist die Nummer, die das Tripel \vec{p}_{j,s,m_j} in dieser Auflistung besitzt. In diesem Abschnitt betrachten wir die N Zustände $\vec{p}_{1,s,m_1}, \dots, \vec{p}_{N,s,m_N}$. Es ist nicht vorausgesetzt, daß diese Zustände konsekutiv in der Auflistung auftreten, wir erlauben sogar (für Bosonen) die Möglichkeit, daß ein Zustand dieser Auflistung öfters auftritt.

Für die Gesamtwellenfunktion können wir zunächst ein Produkt von N Ein-Teilchen-Wellenfunktionen betrachten. Dieses Produkt hat allerdings noch nicht die geforderten Symmetrieeigenschaften unter Vertauschung zweier Teilchen. Wir erhalten die korrekte Gesamtwellenfunktion, indem wir dieses Produkt symmetrisieren (für Bosonen) bzw. anti-symmetrisieren (für Fermionen). Die Gesamtwellenfunktion für nicht-wechselwirkende Bosonen ist somit

$$|\Psi\rangle_{\text{Bosonen}} = c \sum_{\sigma \in S_N} \Psi_{\sigma(1)}(1) \dots \Psi_{\sigma(N)}(N),$$

wobei über alle Permutationen von $(1, 2, \dots, N)$ summiert wird und der Normierungsfaktor c noch unbestimmt ist. Die Gesamtwellenfunktion für nicht-wechselwirkende Fermionen ist

$$|\Psi\rangle_{\text{Fermionen}} = c \sum_{\sigma \in S_N} \text{sign}(\sigma) \Psi_{\sigma(1)}(1) \dots \Psi_{\sigma(N)}(N),$$

wobei für eine gerade Permutation $\text{sign}(\sigma) = 1$ ist, während für eine ungerade Permutation $\text{sign}(\sigma) = -1$ ist. Im Falle der Fermionen läßt sich die Gesamtwellenfunktion auch als eine Determinante darstellen

$$|\Psi\rangle_{\text{Fermionen}} = c \begin{vmatrix} \Psi_1(1) & \dots & \Psi_1(N) \\ \dots & & \dots \\ \Psi_N(1) & \dots & \Psi_N(N) \end{vmatrix}.$$

Diese Determinante wird als **Slater-Determinante** bezeichnet. Tritt ein Satz von Eigenwerten \vec{p}_{j,s,m_j} zweimal auf, so sind zwei Zeilen dieser Determinante identisch und die Determinante ist

daher gleich Null. Daher folgt, daß für Fermionen jeder Zustand, charakterisiert durch die Quantenzahlen \vec{p}_{j,s,m_j} höchstens einmal vorkommen darf. Ein Zustand kann also nicht mehrfach besetzt sein. Dies wird als **Pauli-Verbot** bezeichnet.

Wir bestimmen noch die Normierung: Sind alle Sätze von Eigenwerten \vec{p}_{j,s,m_j} paarweise verschieden, so überzeugt man sich leicht, daß $c = 1/\sqrt{N!}$ die Normierung der Ein-Teilchen-Wellenfunktionen erhält. Dies ist für Fermionen auch schon die korrekte Normierung, da die Sätze von Eigenwerten bei Fermionen immer paarweise verschieden sein müssen. Bei Bosonen kann dagegen ein Zustand mehrfach besetzt sein. Wir nehmen an, daß die N Teilchen sich in r verschiedenen Zuständen befinden und notieren mit N_j die Vielfachheit, mit der der Satz von Eigenwerten \vec{p}_{j,s,m_j} auftritt. Da wir insgesamt N Teilchen haben, gilt

$$N_1 + N_2 + \dots + N_r = N.$$

Dann ist

$$c = \frac{1}{\sqrt{N!N_1!\dots N_r!}}.$$

Wir betrachten drei einfache Beispiele: Für $N = 2$ ergibt sich für Bosonen, die sich in unterschiedlichen Eigenzuständen befinden

$$|\Psi\rangle_{\text{Bosonen}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1(1)\psi_2(2) + \psi_2(1)\psi_1(2)).$$

Befinden sich beide Bosonen im gleichen Eigenzustand, so lautet die Gesamtwellenfunktion

$$|\Psi\rangle_{\text{Bosonen}} = \psi_1(1)\psi_1(2).$$

Für zwei Fermionen haben wir

$$|\Psi\rangle_{\text{Fermionen}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1(1)\psi_2(2) - \psi_2(1)\psi_1(2)).$$

Diese müssen sich in zwei unterschiedlichen Zuständen befinden. Betrachten wir nun einen symmetrischen Operator \hat{O} . Für den Erwartungswert ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle &= \frac{1}{2} \int d^3x_1 d^3x_2 \psi_1(\vec{x}_1)^* \psi_2(\vec{x}_2)^* \hat{O} \psi_1(\vec{x}_1) \psi_2(\vec{x}_2) \\ &\pm \frac{1}{2} \int d^3x_1 d^3x_2 \psi_1(\vec{x}_1)^* \psi_2(\vec{x}_2)^* \hat{O} \psi_2(\vec{x}_1) \psi_1(\vec{x}_2) \\ &\pm \frac{1}{2} \int d^3x_1 d^3x_2 \psi_2(\vec{x}_1)^* \psi_1(\vec{x}_2)^* \hat{O} \psi_1(\vec{x}_1) \psi_2(\vec{x}_2) \\ &+ \frac{1}{2} \int d^3x_1 d^3x_2 \psi_2(\vec{x}_1)^* \psi_1(\vec{x}_2)^* \hat{O} \psi_2(\vec{x}_1) \psi_1(\vec{x}_2), \end{aligned}$$

wobei das “+”-Zeichen für Bosonen und das “-”-Zeichen für Fermionen gilt. Den zweiten und dritten Term bezeichnet man als **Austauschterm**. Austauschsterme spielen bei der kovalenten Bindung eine wichtige Rolle.

Für den vierten Term gilt:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \int d^3x_1 d^3x_2 \psi_2(\vec{x}_1)^* \psi_1(\vec{x}_2)^* \hat{O} \psi_2(\vec{x}_1) \psi_1(\vec{x}_2) = \\
& \quad \frac{1}{2} \int d^3x_1 d^3x_2 (\hat{P}_{12} \psi_1(\vec{x}_1) \psi_2(\vec{x}_2))^* \hat{O} (\hat{P}_{12} \psi_1(\vec{x}_1) \psi_2(\vec{x}_2)) \\
& = \frac{1}{2} \int d^3x_1 d^3x_2 \psi_1(\vec{x}_1)^* \psi_2(\vec{x}_2)^* (\hat{P}_{12} \hat{O} \hat{P}_{12}) \psi_1(\vec{x}_1) \psi_2(\vec{x}_2) \\
& = \frac{1}{2} \int d^3x_1 d^3x_2 \psi_1(\vec{x}_1)^* \psi_2(\vec{x}_2)^* \hat{O} \psi_1(\vec{x}_1) \psi_2(\vec{x}_2).
\end{aligned}$$

Somit ist der vierte Term gleich dem ersten Term.

2.3 Der Fockraum

Wir erinnern uns, daß ein Hilbertraum ein Vektorraum ist, der ein Skalarprodukt besitzt und vollständig ist. Als Grundkörper des Vektorraumes betrachten wir immer die komplexen Zahlen \mathbb{C} . Wir bezeichnen mit V_1 den Hilbertraum der Einteilchenzustände

$$V_1 = \{ |\vec{p}, s, m\rangle \mid \vec{p} \in \mathbb{R}^3, 2s \in \mathbb{N}_0, m = -s, \dots, (s-1), s \}.$$

Es bietet sich an,

$$V_0 = \mathbb{C}$$

zu setzen. Wir setzen weiter

$$V_n = \begin{cases} \text{Sym}(V_1)^{\otimes n}, & \text{(Bosonen),} \\ \text{Asym}(V_1)^{\otimes n}, & \text{(Fermionen),} \end{cases}$$

d.h. V_n ist das symmetrisierte/antisymmetrisierte n -fache Tensorprodukt von V_1 . Zustände in V_n sind von der Form

$$\begin{aligned}
|\Psi\rangle_{\text{Bosonen}} &= \frac{1}{\sqrt{N!N_1!\dots N_r!}} \sum_{\sigma \in S_N} \psi_{\sigma(1)}(1) \dots \psi_{\sigma(N)}(N), \\
|\Psi\rangle_{\text{Fermionen}} &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in S_N} \text{sign}(\sigma) \psi_{\sigma(1)}(1) \dots \psi_{\sigma(N)}(N),
\end{aligned}$$

Der **Fockraum** des Systems ist definiert als die direkte Summe aller V_n für $n \in \mathbb{N}_0$:

$$\begin{aligned}
V &= \bigoplus_{n=0}^{\infty} V_n \\
&= V_0 \oplus V_1 \oplus V_2 \oplus \dots
\end{aligned}$$

Der Fockraum ist ein Hilbertraum. V_0 enthält die Nullteilchenzustände, V_1 die Einteilchenzustände, V_2 die Zweiteilchenzustände, usw..

2.4 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

2.4.1 Bosonen

Wir betrachten ein System mit N Bosonen, hierbei sollen sich N_1 Teilchen im Zustand $|1\rangle$, N_2 Teilchen im Zustand $|2\rangle$, usw. befinden. Es gilt

$$N = N_1 + N_2 + \dots$$

Wir erlauben $N_i = 0$. Da die Teilchen ununterscheidbar sind, ist es nicht relevant, welche Teilchen sich im Zustand $|j\rangle$ befinden, sondern nur wie viele. Zur Beschreibung des Zustandes genügt also die Information, wie viele Teilchen sich im Zustand $|j\rangle$ (für alle j) befinden. Es sei also

$$\begin{aligned} \psi_1 = \psi_2 = \dots = \psi_{N_1} &= |1\rangle, \\ \psi_{N_1+1} = \dots = \psi_{N_1+N_2} &= |2\rangle, \\ \text{usw.} \end{aligned}$$

Wir bezeichnen wieder mit $|n_1\rangle, |n_2\rangle, \dots, |n_N\rangle$ die N auftretenden Zustände, wobei Wiederholungen zugelassen sind. Wir führen die **Besetzungszahendarstellung** ein:

$$\begin{aligned} |N_1, N_2, \dots\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N! N_1! N_2! \dots}} \sum_{\sigma \in S_N} \psi_{\sigma(1)}(1) \dots \psi_{\sigma(N)}(N) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N! N_1! N_2! \dots}} \sum_{\sigma \in S_N} |n_{\sigma(1)}\rangle_1 \otimes \dots \otimes |n_{\sigma(N)}\rangle_N \end{aligned}$$

Die Notation bedeutet hierbei, daß der Zustand $\psi_1 = |n_1\rangle$ mit N_1 Teilchen besetzt ist, der Zustand $\psi_2 = |n_2\rangle$ mit N_2 Teilchen usw..

Bemerkung: Die neu eingeführte Besetzungszahlennotation sollte nicht mit der früherer Notation

$$\begin{aligned} |1, 2, \dots, N\rangle &= \psi_1(1) \psi_2(2) \dots \psi_N(N) \\ &= |n_1\rangle_1 \otimes |n_2\rangle_2 \otimes \dots \otimes |n_N\rangle_N \end{aligned}$$

(Teilchen 1 im Zustand $\psi_1 = |n_1\rangle$, Teilchen 2 im Zustand $\psi_2 = |n_2\rangle$, usw.) verwechselt werden, die wir zur Herleitung der Vertauschungseigenschaften benutzt haben. Letztere ist nicht symmetrisiert. Die Zustände $|1, 2, \dots, N\rangle$ bilden eine Basis des Mehrteilchenraumes mit beliebigen Vertauschungsrelationen, die Zustände $|N_1, N_2, \dots\rangle$ bilden eine Basis des Unterraumes der Zustände mit vollständig symmetrischen Vertauschungsrelationen.

Die Zustände $|N_1, N_2, \dots\rangle$ sind normiert und vollständig, d.h. wir haben

$$\begin{aligned} \text{Normierung:} \quad \langle N_1, N_2, \dots | N'_1, N'_2, \dots \rangle &= \delta_{N_1 N'_1} \delta_{N_2 N'_2} \dots, \\ \text{Vollständigkeit:} \quad \sum_{N_1, N_2, \dots} |N_1, N_2, \dots\rangle \langle N_1, N_2, \dots| &= \mathbf{1}. \end{aligned}$$

In Analogie zum harmonischen Oszillator führen wir nun **Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren** ein. Der Erzeugungsoperator \hat{a}_j^\dagger erzeugt aus dem N -Teilchenzustand $|N_1, N_2, \dots\rangle$ einen

$(N + 1)$ -Zustand, in dem die Anzahl der Teilchen im (Einteilchen-) Zustand $|j\rangle$ um Eins erhöht ist.

Bemerkung: Die Einteilchenzustände $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots$ sind Abkürzungen für Zustände, die durch mehrere Quantenzahlen charakterisiert werden, zum Beispiel $(\vec{p}_0, s, m_0), (\vec{p}_1, s, m_1), (\vec{p}_2, s, m_2), \dots$. Wir bezeichnen mit $E_0 = 0, E_1, E_2, \dots$ die Energien dieser Einteilchenzustände. Im allgemeinen gibt es keine einfache Beziehung zwischen E_i und E_j . Allerdings hat der N_i -fach besetzte Zustand $|i\rangle$ die Energie $N_i E_i$, dies ist analog zum harmonischen Oszillator, in dem der N_i -te Zustand die Energie (bis auf eine additive Konstante) $N_i \hbar \omega_i$ besitzt. Wir können uns daher unter $|N_1, N_2, \dots\rangle$ ein System von harmonischen Oszillatoren vorstellen, mit Kreisfrequenzen $\omega_1 = E_1/\hbar, \omega_2 = E_2/\hbar, \dots$. Der i -te harmonische Oszillator befindet sich hierbei im Zustand N_i .

Wir definieren

$$\hat{a}_j^\dagger |N_1, N_2, \dots, N_j, \dots\rangle = \sqrt{N_j + 1} |N_1, N_2, \dots, N_j + 1, \dots\rangle$$

Für den adjungierten Operator \hat{a}_j gilt nun

$$\langle N_1, N_2, \dots, N'_j, \dots | \hat{a}_j = \sqrt{N'_j + 1} \langle N_1, N_2, \dots, N'_j + 1, \dots |.$$

Wir haben daher

$$\langle N_1, N_2, \dots, N'_j, \dots | \hat{a}_j |N_1, N_2, \dots, N_j, \dots\rangle = \sqrt{N_j} \delta_{N'_j+1, N_j}.$$

Wir sehen also, daß \hat{a}_j angewandt auf $|N_1, N_2, \dots, n_j, \dots\rangle$ die Besetzungszahl im Zustand $|j\rangle$ um Eins erniedrigt. Es gilt

$$\hat{a}_j |N_1, N_2, \dots, N_j, \dots\rangle = \begin{cases} \sqrt{N_j} |N_1, N_2, \dots, N_j - 1, \dots\rangle, & N_j > 0, \\ 0 & N_j = 0. \end{cases}$$

Dies läßt sich wie folgt zeigen:

$$\begin{aligned} \hat{a}_j |N_1, N_2, \dots, N_j, \dots\rangle &= \sum_{N'_1, N'_2, \dots} |N'_1, N'_2, \dots, N'_j, \dots\rangle \langle N'_1, N'_2, \dots, N'_j, \dots | \hat{a}_j |N_1, N_2, \dots, N_j, \dots\rangle \\ &= \sum_{N'_j=0}^{\infty} \sqrt{N_j} \delta_{N'_j+1, N_j} |N_1, N_2, \dots, N'_j, \dots\rangle \\ &= \begin{cases} \sqrt{N_j} |N_1, N_2, \dots, N_j - 1, \dots\rangle, & N_j > 0, \\ 0 & N_j = 0. \end{cases} \end{aligned}$$

Insbesondere gilt, daß \hat{a}_j angewandt auf einen Zustand mit $N_j = 0$ Null ergibt. Die Erzeugungsoperatoren \hat{a}_j^\dagger und die Vernichtungsoperatoren \hat{a}_j erfüllen die **Vertauschungsrelationen**

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0, \quad [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}.$$

Wir betrachten zunächst $[\hat{a}_i, \hat{a}_j]$. Für $i = j$ gilt $[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0$, da jeder Operator mit sich selbst kommutiert. Für $i \neq j$ und $N_i, N_j > 0$ haben wir (der Fall $N_i = 0$ oder $N_j = 0$ ist trivial)

$$\begin{aligned}\hat{a}_i \hat{a}_j |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots, N_j, \dots\rangle &= \sqrt{N_i} \sqrt{N_j} |N_1, N_2, \dots, N_i - 1, \dots, N_j - 1, \dots\rangle, \\ \hat{a}_j \hat{a}_i |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots, N_j, \dots\rangle &= \sqrt{N_i} \sqrt{N_j} |N_1, N_2, \dots, N_i - 1, \dots, N_j - 1, \dots\rangle.\end{aligned}$$

Es folgt

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0.$$

Analog zeigt man

$$[\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0.$$

Betrachten wir nun $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger]$. Wir starten mit $i \neq j$:

$$\begin{aligned}\hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots, N_j, \dots\rangle &= \sqrt{N_i} \sqrt{N_j + 1} |N_1, N_2, \dots, N_i - 1, \dots, N_j + 1, \dots\rangle, \\ \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots, N_j, \dots\rangle &= \sqrt{N_i} \sqrt{N_j + 1} |N_1, N_2, \dots, N_i - 1, \dots, N_j + 1, \dots\rangle,\end{aligned}$$

und daher $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = 0$ für $i \neq j$. Für $i = j$ finden wir allerdings

$$\begin{aligned}\hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle &= \sqrt{N_i + 1} \sqrt{N_i + 1} |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle, \\ \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle &= \sqrt{N_i} \sqrt{N_i} |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle,\end{aligned}$$

und daher

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger] |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle = ((N_i + 1) - N_i) |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle = |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle.$$

Zusammenfassend ergibt sich für $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger]$

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}.$$

Wir definieren den Grundzustand (oder Vakuumzustand) als den Zustand mit $N_1 = N_2 = \dots = 0$:

$$|0\rangle = |0, 0, \dots\rangle.$$

Mit Hilfe des Vakuumzustandes und den Erzeugungsoperatoren erhalten wir alle Zustände. Die Einteilchenzustände sind gegeben durch

$$|0, \dots, 0, 1, 0, \dots\rangle = \hat{a}_i^\dagger |0\rangle,$$

die Zweiteilchenzustände durch

$$|0, \dots, 0, 2, 0, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_i^\dagger)^2 |0\rangle,$$

$$|0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots\rangle = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger |0\rangle.$$

Allgemein findet man

$$|N_1, N_2, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_1! N_2! \dots}} (\hat{a}_1^\dagger)^{N_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{N_2} \dots |0\rangle.$$

Wir definieren noch den Teilchenzahloperator \hat{N}_i durch

$$\hat{N}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i.$$

Die Zustände $|N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle$ sind Eigenzustände von \hat{N}_i :

$$\hat{N}_i |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle = N_i |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle.$$

\hat{N}_i gibt an, wie viele Teilchen sich im Zustand $|i\rangle$ befinden:

$$\langle N_1, N_2, \dots, N_i, \dots | \hat{N}_i | N_1, N_2, \dots, N_i, \dots \rangle = N_i.$$

Der Gesamtteilchenzahloperator \hat{N} ist definiert durch

$$\hat{N} = \sum_i \hat{N}_i.$$

Die Zustände $|N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle$ sind ebenfalls Eigenzustände von \hat{N} :

$$\hat{N} |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle = \left(\sum_i N_i \right) |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle.$$

Da $N_1 + N_2 + \dots = N$ ergibt sich

$$\hat{N} |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle = N |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle.$$

\hat{N} gibt somit die Gesamtteilchenzahl an:

$$\langle N_1, N_2, \dots, N_i, \dots | \hat{N} | N_1, N_2, \dots, N_i, \dots \rangle = N.$$

Betrachten wir nun ein System von N nicht-wechselwirkenden Teilchen. Wir nehmen weiter an, daß die Zustände $|j\rangle$ Eigenzustände des Einteilchen-Hamiltonoperators mit Energieeigenwert E_j sind. In Analogie mit dem harmonischen Oszillator schreiben wir

$$\hat{H}_j = E_j \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j,$$

wobei ein konstanter Term im Hamiltonoperator hier nicht weiter relevant ist, da er nur eine Umdefinition des Energienullpunktes implizieren würde. Der gesamte Hamiltonoperator ist die Summe der N Einteilchen-Hamiltonoperatoren. Wir erhalten somit

$$\hat{H} = \sum_j \hat{H}_j = \sum_j E_j \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j.$$

Betrachten wir nun etwas allgemeiner einen Operator \hat{O} , der als Summe von N (identischen) Einteilchenoperatoren gegeben ist:

$$\hat{O} = \sum_{k=1}^N \hat{O}_k.$$

Der Index k gibt hierbei nur an, auf welches Teilchen \hat{O}_k wirkt. Es sei

$$O_{ij} = {}_k \langle i | \hat{O}_k | j \rangle_k,$$

so daß

$$\hat{O}_k = \sum_{i,j} O_{ij} |i\rangle_k \langle j|_k.$$

Für den Gesamtoperator gilt also

$$\hat{O} = \sum_{i,j} O_{ij} \sum_{k=1}^N |i\rangle_k \langle j|_k.$$

Wir betrachten nun

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^N |i\rangle_k \langle j|_k |N_1, \dots, N_i, \dots, N_j, \dots\rangle = \\ \sum_{k=1}^N |i\rangle_k \langle j|_k \frac{1}{\sqrt{N! N_1! \dots N_i! \dots N_j! \dots}} \sum_{\sigma \in S_N} |n_{\sigma(1)}\rangle_1 \otimes \dots \otimes |n_{\sigma(N)}\rangle_N. \end{aligned}$$

Jeder Term der Summe über σ enthält N_j -mal den Einteilchenzustand $|j\rangle$ und N_i -mal den Einteilchenzustand $|i\rangle$. Der Operator

$$\sum_{k=1}^N |i\rangle_k \langle j|_k$$

ersetzt einen Zustand $|j\rangle$ durch $|i\rangle$, da sich in jedem Term der Summe über σ N_j Zustände $|j\rangle$ befinden, geschieht dies N_j -mal in jedem Term der Summe über σ . Wir erhalten also

$$\sum_{k=1}^N |i\rangle_k \langle j|_k |N_1, \dots, N_i, \dots, N_j, \dots\rangle = \frac{N_j}{\sqrt{N! N_1! \dots N_i! \dots N_j! \dots}} \sum_{\sigma \in S_N} |n'_{\sigma(1)}\rangle_1 \otimes \dots \otimes |n'_{\sigma(N)}\rangle_N,$$

wobei nun in der Sequenz n'_1, n'_2, \dots der Wert j nun $(N_j - 1)$ -mal vorkommt und der Wert i nun $(N_i + 1)$ -mal auftritt. Wir erhalten also (bis auf die Normierung) den Zustand $|N_1, \dots, (N_i + 1), \dots, (N_j - 1), \dots\rangle$. Berücksichtigen wir auch noch die Normierung, so finden wir

$$\sum_{k=1}^N |i\rangle_k \langle j|_k |N_1, \dots, N_i, \dots, N_j, \dots\rangle = N_j \frac{\sqrt{N_i + 1}}{\sqrt{N_j}} |N_1, \dots, N_i + 1, \dots, N_j - 1, \dots\rangle$$

$$= \sqrt{N_i+1}\sqrt{N_j}|N_1, \dots, N_i+1, \dots, N_j-1, \dots\rangle.$$

Dies ist aber identisch zu

$$\sum_{k=1}^N |i\rangle_k \langle j|_k |N_1, \dots, N_i, \dots, N_j, \dots\rangle = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j |N_1, \dots, N_i, \dots, N_j, \dots\rangle.$$

Wir erhalten die Relation

$$\sum_{k=1}^N |i\rangle_k \langle j|_k = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j.$$

Somit ergibt sich für \hat{O}

$$\hat{O} = \sum_{i,j} O_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j.$$

Wir können also jeden Operator, der durch eine Summe von identischen Einteilchenoperatoren gegeben ist, in die obige Form bringen.

Einteilchenoperatoren beschreiben noch keine Wechselwirkung zwischen Teilchen. Zur Beschreibung von Wechselwirkungen benötigen wir mindestens Zweiteilchenoperatoren. Sei nun \hat{O} ein Zweiteilchenoperator, zum Beispiel

$$\hat{O} = \frac{1}{2} \sum_{r=1}^N \sum_{s=1, s \neq r}^N \hat{O}_{rs},$$

wobei die Indizes r und s die Teilchen bezeichnen, auf die der Operator wirkt. Der Fall $r = s$ entspricht einem Einteilchenoperator und ist daher ausgeschlossen. Aus Symmetriegründen gilt $\hat{O}_{rs} = \hat{O}_{sr}$, so daß sich die Summe auch wie folgt schreiben läßt:

$$\hat{O} = \sum_{r=1}^{N-1} \sum_{s=r+1}^N \hat{O}_{rs}.$$

Wir schreiben für die Matrixelemente

$$O_{ij,kl} = (\langle i|_r \otimes \langle j|_s) \hat{O}_{rs} (|k\rangle_r \otimes |l\rangle_s).$$

Somit

$$\hat{O} = \frac{1}{2} \sum_{r \neq s} \sum_{i,j,k,l} O_{ij,kl} |i\rangle_r |j\rangle_s \langle k|_r \langle l|_s.$$

Es ist nun

$$\sum_{r \neq s} |i\rangle_r |j\rangle_s \langle k|_r \langle l|_s = \sum_{r \neq s} |i\rangle_r \langle k|_r |j\rangle_s \langle l|_s$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{r,s} |i\rangle_r \langle k|_r |j\rangle_s \langle l|_s - \sum_r |i\rangle_r \langle k|_r |j\rangle_r \langle l|_r \\
&= \sum_{r,s} |i\rangle_r \langle k|_r |j\rangle_s \langle l|_s - \delta_{kj} \sum_r |i\rangle_r \langle l|_r \\
&= \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l - \delta_{kj} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_l \\
&= \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l - \hat{a}_i^\dagger [\hat{a}_k, \hat{a}_j^\dagger] \hat{a}_l \\
&= \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l.
\end{aligned}$$

Somit erhalten wir

$$\hat{O} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} O_{ij,kl} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l.$$

Wir können somit auch Zweiteilchenoperatoren durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausdrücken. Die Verallgemeinerung auf höhere Mehrteilchenoperatoren ist offensichtlich.

2.4.2 Fermionen

Wir betrachten nun Fermionen. Auch hier führen wir die Besetzungszahldarstellung ein:

$$\begin{aligned}
|N_1, N_2, \dots\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in S_N} \text{sign}(\sigma) \Psi_{\sigma(1)}(1) \dots \Psi_{\sigma(N)}(N) \\
&= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in S_N} \text{sign}(\sigma) |n_{\sigma(1)}\rangle_1 \otimes \dots \otimes |n_{\sigma(N)}\rangle_N.
\end{aligned}$$

Wir definieren den Antisymmetrisierungsoperator durch

$$\text{Asym}(|n_1\rangle_1 \otimes \dots \otimes |n_N\rangle_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in S_N} \text{sign}(\sigma) |n_{\sigma(1)}\rangle_1 \otimes \dots \otimes |n_{\sigma(N)}\rangle_N.$$

Für Fermionen gilt aufgrund des Pauli-Verbots

$$N_i \in \{0, 1\}.$$

Die Zustände $|N_1, N_2, \dots\rangle$ sind normiert und vollständig:

$$\begin{aligned}
\text{Normierung:} \quad &\langle N_1, N_2, \dots | N'_1, N'_2, \dots \rangle = \delta_{N_1 N'_1} \delta_{N_2 N'_2} \dots, \\
\text{Vollständigkeit:} \quad &\sum_{N_1=0}^1 \sum_{N_2=0}^1 \dots |N_1, N_2, \dots\rangle \langle N_1, N_2, \dots| = \mathbf{1}.
\end{aligned}$$

Wir führen nun ebenfalls **Erzeugungsoperatoren** \hat{a}_j^\dagger und **Vernichtungsoperatoren** \hat{a}_j ein. Hierbei müssen wir beachten, daß eine zweimalige Anwendung von \hat{a}_j^\dagger Null ergeben soll. Desweiteren müssen wir die Reihenfolge beachten. Dies sieht man wie folgt: Es ist

$$\text{Asym}(|n_1\rangle_1 \otimes |n_2\rangle_2 \otimes \dots \otimes |n_N\rangle_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in S_N} \text{sign}(\sigma) |n_{\sigma(1)}\rangle_1 \otimes |n_{\sigma(2)}\rangle_2 \otimes \dots \otimes |n_{\sigma(N)}\rangle_N,$$

und

$$\text{Asym}(|n_2\rangle_1 \otimes |n_1\rangle_2 \otimes \dots \otimes |n_N\rangle_N) = -\frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_N} \text{sign}(\sigma) |n_{\sigma(1)}\rangle_1 \otimes |n_{\sigma(2)}\rangle_2 \otimes \dots \otimes |n_{\sigma(N)}\rangle_N,$$

da $(2, 1, 3, \dots, N)$ eine ungerade Permutation von $(1, 2, 3, \dots, N)$ ist. Somit

$$\text{Asym}(|n_2\rangle_1 \otimes |n_1\rangle_2 \otimes \dots \otimes |n_N\rangle_N) = -\text{Asym}(|n_1\rangle_1 \otimes |n_2\rangle_2 \otimes \dots \otimes |n_N\rangle_N).$$

Wir definieren nun \hat{a}_i^\dagger durch

$$\hat{a}_{n_1}^\dagger \hat{a}_{n_2}^\dagger \dots \hat{a}_{n_N}^\dagger |0\rangle = \text{Asym}(|n_1\rangle_1 \otimes |n_2\rangle_2 \otimes \dots \otimes |n_N\rangle_N).$$

Aufgrund von $\text{Asym}(|n_1\rangle_1 \otimes |n_2\rangle_2 \otimes \dots \otimes |n_N\rangle_N) = -\text{Asym}(|n_2\rangle_1 \otimes |n_1\rangle_2 \otimes \dots \otimes |n_N\rangle_N)$ gilt

$$\left(\hat{a}_{n_1}^\dagger \hat{a}_{n_2}^\dagger + \hat{a}_{n_2}^\dagger \hat{a}_{n_1}^\dagger \right) \hat{a}_{n_3}^\dagger \dots \hat{a}_{n_N}^\dagger |0\rangle = 0,$$

und daher

$$\hat{a}_{n_1}^\dagger \hat{a}_{n_2}^\dagger + \hat{a}_{n_2}^\dagger \hat{a}_{n_1}^\dagger = 0.$$

Wir definieren den Antikommutator durch

$$\{A, B\} = AB + BA.$$

Somit

$$\{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\} = 0.$$

Dies impliziert insbesondere

$$\left(\hat{a}_i^\dagger \right)^2 = 0,$$

so daß das Pauli-Verbot erfüllt ist. Betrachten wir nun die Wirkung von \hat{a}_i^\dagger auf $|N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle$.

Es ist

$$\hat{a}_i^\dagger |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle = \hat{a}_i^\dagger \left(\left(\hat{a}_1^\dagger \right)^{N_1} \left(\hat{a}_2^\dagger \right)^{N_2} \dots \left(\hat{a}_i^\dagger \right)^{N_i} \dots \right) |0\rangle$$

Bemerkung: Wegen $N_i \in \{0, 1\}$ gilt

$$\left(\hat{a}_i^\dagger \right)^{N_i} = \begin{cases} 1, & N_i = 0, \\ \hat{a}_i^\dagger, & N_i = 1. \end{cases}$$

Wir antikommutieren nun den ersten Operator \hat{a}_i^\dagger zur Position i . Es ist

$$\hat{a}_i^\dagger \left(\hat{a}_j^\dagger \right)^{N_j} = (-1)^{N_j} \left(\hat{a}_j^\dagger \right)^{N_j} \hat{a}_i^\dagger,$$

wie man leicht durch Überprüfen der beiden Fälle $N_j = 0$ und $N_j = 1$ sieht. Befindet sich nun bereits ein \hat{a}_i^\dagger an der Position i , so erhalten wir für $N_i = 1$ ein Produkt $(\hat{a}_i^\dagger)^2$, dies ergibt Null. Ist andererseits $N_i = 0$, so erhalten wir einen Zustand mit $N'_i = 1$, die Besetzungszahl N_i wurde also um Eins erhöht. Zusammenfassend ergibt sich

$$\hat{a}_i^\dagger |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle = (1 - N_i) (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} N_j} |N_1, N_2, \dots, N_i + 1, \dots\rangle.$$

Der Vorfaktor $(1 - N_i)$ ist Null für $N_i = 1$, so daß dieser Zustand nicht doppelt besetzt werden kann. Die adjungierte Relation lautet

$$\langle N_1, N_2, \dots, N'_i, \dots | \hat{a}_i = (1 - N'_i) (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} N_j} \langle N_1, N_2, \dots, N'_i + 1, \dots |,$$

somit ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle N_1, N_2, \dots, N'_i, \dots | \hat{a}_i |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle &= (1 - N'_i) (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} N_j} \delta_{N'_i+1, N_i} \\ &= (2 - N_i) (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} N_j} \delta_{N'_i+1, N_i}. \end{aligned}$$

Wir können nun die Wirkung von \hat{a}_i auf $|N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle$ bestimmen. Hierzu fügen wir wieder einen vollständigen Satz von Zuständen ein und benützen die obige Relation:

$$\begin{aligned} \hat{a}_i |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle &= \sum_{N'_1, N'_2, \dots} |N'_1, N'_2, \dots, N'_i, \dots\rangle \langle N'_1, N'_2, \dots, N'_i, \dots | \hat{a}_i |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle \\ &= \sum_{N'_i=0}^{\infty} (2 - N_i) (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} N_j} \delta_{N'_i+1, N_i} |N_1, N_2, \dots, N'_i, \dots\rangle \\ &= \begin{cases} (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} N_j} |N_1, N_2, \dots, N_i - 1, \dots\rangle, & N_i = 1, \\ 0 & N_i = 0. \end{cases} \end{aligned}$$

Wir können dies auch wie folgt schreiben:

$$\hat{a}_i |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle = N_i (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} N_j} |N_1, N_2, \dots, N_i - 1, \dots\rangle,$$

der Vorfaktor N_i garantiert, daß wir im Falle $N_i = 0$ Null erhalten. Für die Wirkung der fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ergibt sich zusammenfassend

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^\dagger |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle &= (1 - N_i) (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} N_j} |N_1, N_2, \dots, N_i + 1, \dots\rangle, \\ \hat{a}_i |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle &= N_i (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} N_j} |N_1, N_2, \dots, N_i - 1, \dots\rangle. \end{aligned}$$

Die fermionischen Erzeugungsoperatoren \hat{a}_j^\dagger und die fermionischen Vernichtungsoperatoren \hat{a}_j erfüllen die **Vertauschungsrelationen**

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} = 0, \quad \{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\} = 0, \quad \{\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\} = \delta_{ij}.$$

Exemplarisch zeigen wir $\{\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\} = \delta_{ij}$. Sei $i \neq j$. Wir betrachten $i < j$. Der Fall $i > j$ ist analog. Es ist

$$\begin{aligned} \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots, N_j, \dots\rangle &= \\ &= (1 - N_j) (-1)^{\sum_{k=1}^{j-1} N_k} \hat{a}_i |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots, N_j + 1, \dots\rangle \\ &= N_i (-1)^{\sum_{m=1}^{i-1} N_m} (1 - N_j) (-1)^{\sum_{k=1}^{j-1} N_k} |N_1, N_2, \dots, N_i - 1, \dots, N_j + 1, \dots\rangle, \\ \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots, N_j, \dots\rangle &= \\ &= N_i (-1)^{\sum_{m=1}^{i-1} N_m} \hat{a}_j^\dagger |N_1, N_2, \dots, N_i - 1, \dots, N_j + 1, \dots\rangle \\ &= N_i (-1)^{\sum_{m=1}^{i-1} N_m} (1 - N_j) (-1)^{-1 + \sum_{k=1}^{j-1} N_k} \hat{a}_j^\dagger |N_1, N_2, \dots, N_i - 1, \dots, N_j + 1, \dots\rangle, \end{aligned}$$

wobei wir in der letzten Zeile berücksichtigt haben, daß in der Summe über k die Besetzungszahl des Zustandes i nun $N_i - 1$ ist. Wir erhalten

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\} |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle = 0,$$

und somit $\{\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\} = 0$ für $i \neq j$.

Sei nun $i = j$. Es ist

$$\begin{aligned} \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle &= (1 - N_i) (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} N_j} \hat{a}_i |N_1, N_2, \dots, N_i + 1, \dots\rangle \\ &= (1 - N_i) (N_i + 1) |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle, \\ \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle &= N_i (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} N_j} \hat{a}_i^\dagger |N_1, N_2, \dots, N_i - 1, \dots\rangle \\ &= N_i (2 - N_i) |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle \end{aligned}$$

und somit

$$\begin{aligned} \{\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger\} |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle &= (1 + 2N_i - 2N_i^2) |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle \\ &= |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle. \end{aligned}$$

Bei der letzten Umformung haben wir ausgenutzt, daß $N_i^2 = N_i$ für $N_i \in \{0, 1\}$. Somit folgt $\{\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger\} = 1$ Insgesamt ergibt sich

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger\} = \delta_{ij}.$$

Betrachten wir nun wieder einen Operator \hat{O} , der als Summe von N (identischen) Einteilchenoperatoren gegeben ist:

$$\hat{O} = \sum_{k=1}^N \hat{O}_k.$$

Wie bei Bosonen können wir den Operator mit Hilfe der Matrixelemente

$$O_{ij} = {}_k \langle i | \hat{O}_k | j \rangle_k,$$

als

$$\hat{O} = \sum_{i,j} O_{ij} \sum_{k=1}^N |i\rangle_k \langle j|_k.$$

schreiben. Für Fermionen gilt ebenfalls

$$\sum_{k=1}^N |i\rangle_k \langle j|_k = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j.$$

Der Operator auf der linken Seite ersetzt einen Zustand $|j\rangle$ durch $|i\rangle$. Um nicht Null zu erhalten, muß für Fermionen $N_j = 1$ und $N_i = 0$ gelten. Wir finden für die linke Seite (wir nehmen wieder $i < j$ an):

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^N |i\rangle_k \langle j|_k |N_1, \dots, N_i, \dots, N_j, \dots\rangle &= \sum_{k=1}^N |i\rangle_k \langle j|_k \text{Asym}(|n_1\rangle_1 \otimes |n_2\rangle_2 \otimes \dots \otimes |n_N\rangle_N) \\ &= (1 - N_i) N_j \text{Asym}(|n'_1\rangle_1 \otimes |n'_2\rangle_2 \otimes \dots \otimes |n'_N\rangle_N), \end{aligned}$$

wobei in der Sequenz n'_1, n'_2, \dots der Wert j durch i ersetzt wurde. Die Vorfaktoren garantieren, daß wir für $N_j = 0$ oder $N_i = 1$ Null erhalten. Nun ist aber

$$\begin{aligned} \text{Asym}(|n'_1\rangle_1 \otimes |n'_2\rangle_2 \otimes \dots \otimes |n'_N\rangle_N) &= \\ &= \left((\hat{a}_1^\dagger)^{N_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{N_2} \dots (\hat{a}_{i-1}^\dagger)^{N_{i-1}} (\hat{a}_{i+1}^\dagger)^{N_{i+1}} \dots (\hat{a}_{j-1}^\dagger)^{N_{j-1}} \hat{a}_i^\dagger \dots \right) |0\rangle \\ &= (-1)^{\sum_{k=i+1}^{j-1} N_k} \left((\hat{a}_1^\dagger)^{N_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{N_2} \dots (\hat{a}_{i-1}^\dagger)^{N_{i-1}} \hat{a}_i^\dagger (\hat{a}_{i+1}^\dagger)^{N_{i+1}} \dots (\hat{a}_{j-1}^\dagger)^{N_{j-1}} \dots \right) |0\rangle, \end{aligned}$$

wobei wir \hat{a}_i^\dagger in die Position i antikommutiert haben. Wir erhalten also für die linke Seite

$$\sum_{k=1}^N |i\rangle_k \langle j|_k |N_1, \dots, N_i, \dots, N_j, \dots\rangle = (1 - N_i) N_j (-1)^{\sum_{k=i+1}^{j-1} N_k} |N_1, \dots, N_i + 1, \dots, N_j - 1, \dots\rangle.$$

Die Bestimmung der rechten Seite erfolgt analog zu den bereits bei der Diskussion der Antikommutationsrelationen erfolgten Betrachtungen:

$$\begin{aligned}
\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots, N_j, \dots\rangle &= \\
&= N_j (-1)^{\sum_{m=1}^{j-1} N_m} \hat{a}_i^\dagger |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots, N_j - 1, \dots\rangle \\
&= (1 - N_i) N_j (-1)^{\sum_{k=i+1}^{j-1} N_k} |N_1, N_2, \dots, N_i + 1, \dots, N_j - 1, \dots\rangle
\end{aligned}$$

Somit haben wir

$$\sum_{k=1}^N |i\rangle_k \langle j|_k = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j.$$

gezeigt und für den Einteilchenoperator gilt:

$$\hat{O} = \sum_{i,j} O_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j.$$

Dies ist die gleiche Relation wie im bosonischen Fall.

Wir betrachten noch Zweiteilchenoperatoren:

$$\hat{O} = \frac{1}{2} \sum_{r=1}^N \sum_{s=1, s \neq r}^N \hat{O}_{rs},$$

wobei die Indizes r und s wieder die Teilchen bezeichnen, auf die der Operator wirkt. Mit Hilfe der Matrixelemente

$$O_{ij,kl} = (\langle i|_r \otimes \langle j|_s) \hat{O}_{rs} (|k\rangle_r \otimes |l\rangle_s).$$

läßt sich \hat{O} ausdrücken durch

$$\hat{O} = \frac{1}{2} \sum_{r \neq s} \sum_{i,j,k,l} O_{ij,kl} |i\rangle_r |j\rangle_s \langle k|_r \langle l|_s.$$

Wir wollen nun den Operator $\sum_{r \neq s} |i\rangle_r |j\rangle_s \langle k|_r \langle l|_s$ durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausdrücken. Im fermionischen Fall müssen wir nun berücksichtigen, daß die fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren Antikommutationsrelation anstelle von Kommutationsrelationen erfüllen. Wir erhalten

$$\begin{aligned}
\sum_{r \neq s} |i\rangle_r |j\rangle_s \langle k|_r \langle l|_s &= \sum_{r \neq s} |i\rangle_r \langle k|_r |j\rangle_s \langle l|_s \\
&= \sum_{r,s} |i\rangle_r \langle k|_r |j\rangle_s \langle l|_s - \sum_r |i\rangle_r \langle k|_r |j\rangle_r \langle l|_r
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{r,s} |i\rangle_r \langle k|_r |j\rangle_s \langle l|_s - \delta_{kj} \sum_r |i\rangle_r \langle l|_r \\
&= \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l - \delta_{kj} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_l \\
&= \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l - \hat{a}_i^\dagger \{ \hat{a}_k, \hat{a}_j^\dagger \} \hat{a}_l \\
&= -\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k.
\end{aligned}$$

Bemerkung: Für Bosonen als auch Fermionen gilt somit

$$\sum_{r \neq s} |i\rangle_r |j\rangle_s \langle k|_r \langle l|_s = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k,$$

man beachte die Reihung der Operatoren \hat{a}_l und \hat{a}_k ! Somit erhalten wir für einen Zweiteilchenoperator

$$\hat{O} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} O_{ij,kl} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k.$$

Auch für Fermionen läßt sich dies auf höhere Mehrteilchenoperatoren fortsetzen.

2.5 Feldoperatoren

Für die weitere Entwicklung der Theorie können wir Bosonen und Fermionen gemeinsam behandeln, vorausgesetzt wir berücksichtigen das Bosonen Kommutationsrelationen, Fermionen hingegen Antikommutationsrelationen unterliegen.

Bei der Diskussion der Mehrteilchenzustände sind wir zunächst von Einteilchenzuständen $|n\rangle$ ausgegangen. Wir erinnern uns, daß n eine Abkürzung von Quantenzahlen betrachtet bezeichnet, z.B. (\vec{p}, s, m) . Wir haben angenommen, daß die Einteilchenzustände $|n\rangle$ eine vollständige Basis für das Einteilchensystem bilden. Eine typische Basiswahl wären die Eigenzustände des Einteilchen-Hamiltonoperators. Für ein nicht-wechselwirkendes Teilchen mit Spin werden diese Eigenzustände durch die oben bereits genannten Quantenzahlen (\vec{p}, s, m) charakterisiert.

Nun können wir aber auch eine andere Basis für die Einteilchenzustände betrachten. Sei $|\tilde{m}\rangle$ eine weitere (vollständige) Basis der Einteilchenzustände. Für die Umrechnung zwischen den Basen $|\tilde{m}\rangle$ und $|n\rangle$ gilt:

$$|\tilde{m}\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\tilde{m}\rangle.$$

Es sei \hat{a}_n^\dagger der Erzeugungsoperator für ein Teilchen im Zustand $|n\rangle$, und $\hat{a}_{\tilde{m}}^\dagger$ der Erzeugungsoperator für ein Teilchen im Zustand $|\tilde{m}\rangle$. Es gilt

$$\hat{a}_{\tilde{m}}^\dagger = \sum_n \langle n|\tilde{m}\rangle \hat{a}_n^\dagger.$$

Den Zusammenhang für die Vernichtungsoperatoren findet man, indem man die adjungierten Operatoren betrachtet:

$$\hat{a}_{\tilde{m}} = \sum_n \langle \tilde{m}|n\rangle \hat{a}_n.$$

2.5.1 Ortsdarstellung

Wir wählen nun für $|\tilde{m}\rangle$ eine Basis aus Ortseigenzuständen. Besitzen die Teilchen Spin, so werden sie in dieser Basis durch (\vec{x}, s, m) charakterisiert. Wir bezeichnen die Orts- (und Spin-) Eigenzustände mit $|\vec{x}, s, m\rangle$. Da im folgenden der Spin nicht weiter relevant ist, schreiben wir zur Abkürzung einfach $|\vec{x}\rangle$. Es ist

$$\langle \vec{x} | i \rangle = \varphi_i(\vec{x})$$

die Wellenfunktion des i -ten Zustandes in der Basis $|n\rangle$. Wir bezeichnen als **Feldoperatoren** die Operatoren, die ein Teilchen im Zustand $|\vec{x}\rangle$ erzeugen bzw. vernichten. Für diese Operatoren führen wir eine spezielle Notation ein:

$$\hat{\phi}(\vec{x}) = \hat{a}_{\vec{x}}, \quad \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) = \hat{a}_{\vec{x}}^\dagger.$$

Es ist

$$\hat{\phi}(\vec{x}) = \hat{a}_{\vec{x}} = \sum_i \langle \vec{x} | i \rangle \hat{a}_i = \sum_i \varphi_i(\vec{x}) \hat{a}_i.$$

Wir erhalten also

$$\begin{aligned} \hat{\phi}(\vec{x}) &= \sum_i \varphi_i(\vec{x}) \hat{a}_i, \\ \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) &= \sum_i \varphi_i(\vec{x})^* \hat{a}_i^\dagger. \end{aligned}$$

Bemerkung: Der Zusammenhang zwischen dem Feldoperator $\hat{\phi}^\dagger(\vec{x})$ und dem Zustand $|\vec{x}\rangle$ ist wie folgt

$$\hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) |0\rangle = |\vec{x}\rangle.$$

Die Feldoperatoren erfüllen die Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned} \text{Bosonen:} \quad & [\hat{\phi}(\vec{x}), \hat{\phi}(\vec{y})] = 0, \quad [\hat{\phi}^\dagger(\vec{x}), \hat{\phi}^\dagger(\vec{y})] = 0, \quad [\hat{\phi}(\vec{x}), \hat{\phi}^\dagger(\vec{y})] = \delta(\vec{x} - \vec{y}), \\ \text{Fermionen:} \quad & \{\hat{\phi}(\vec{x}), \hat{\phi}(\vec{y})\} = 0, \quad \{\hat{\phi}^\dagger(\vec{x}), \hat{\phi}^\dagger(\vec{y})\} = 0, \quad \{\hat{\phi}(\vec{x}), \hat{\phi}^\dagger(\vec{y})\} = \delta(\vec{x} - \vec{y}). \end{aligned}$$

Diese folgen unmittelbar aus den Vertauschungsrelationen für die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Beispielsweise ergibt sich für Bosonen

$$[\hat{\phi}(\vec{x}), \hat{\phi}(\vec{y})] = \sum_i \sum_j \varphi_i(\vec{x}) \varphi_j(\vec{y}) \underbrace{[\hat{a}_i, \hat{a}_j]}_{=0} = 0$$

und

$$[\hat{\phi}(\vec{x}), \hat{\phi}^\dagger(\vec{y})] = \sum_i \sum_j \varphi_i(\vec{x}) \varphi_j(\vec{y})^* [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \sum_i \varphi_i(\vec{x}) \varphi_i(\vec{y})^* = \sum_i \langle \vec{x} | i \rangle \langle i | \vec{y} \rangle$$

$$= \langle \vec{x} | \vec{y} \rangle = \delta(\vec{x} - \vec{y}).$$

Für Fermionen verläuft die Argumentation völlig analog, man ersetzt nur den Kommutator durch den Antikommutator.

Wir können auch die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren \hat{a}_i^\dagger und \hat{a}_i durch die Feldoperatoren $\hat{\phi}^\dagger(x)$ und $\hat{\phi}(x)$ ausdrücken, wobei wir anstelle der Summation ein Integral verwenden:

$$\begin{aligned}\hat{a}_i &= \int d^3x \varphi_i(\vec{x})^* \hat{\phi}(\vec{x}), \\ \hat{a}_i^\dagger &= \int d^3x \varphi_i(\vec{x}) \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}).\end{aligned}$$

Wir betrachten nun einige typische Operatoren, und drücken sie sowohl durch die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren \hat{a}_i^\dagger und \hat{a}_i , als auch durch die Feldoperatoren $\hat{\phi}^\dagger(x)$ und $\hat{\phi}(x)$ aus. Wir betrachten ein System von N Teilchen. Wir beginnen mit dem Operator für die kinetische Energie. Dies ist ein Einteilchenoperator, gegeben durch

$$\hat{T} = \sum_{k=1}^N \hat{T}_k = \sum_{k=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_k \right),$$

wobei der Index k in Δ_k angibt, daß der Ableitungsoperator auf das k -te Teilchen wirkt. Wir wissen bereits

$$\hat{T} = \sum_{i,j} T_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \quad T_{ij} = {}_k \langle i | \hat{T}_k | j \rangle_k.$$

Wir ersetzen nun die Auf- und Absteigeoperatoren durch die Feldoperatoren und finden

$$\begin{aligned}\hat{T} &= \sum_{i,j} \int d^3x \int d^3y \varphi_i(\vec{x}) \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) T_{ij} \varphi_j(\vec{y})^* \hat{\phi}(\vec{y}) \\ &= \sum_{i,j} \int d^3x \int d^3y \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) \langle \vec{x} | i \rangle \left\langle i \left| \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \right| j \right\rangle \langle j | \vec{y} \rangle \hat{\phi}(\vec{y}) \\ &= \int d^3x \int d^3y \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) \left\langle \vec{x} \left| \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \right| \vec{y} \right\rangle \hat{\phi}(\vec{y}).\end{aligned}$$

Es ist

$$\begin{aligned}\left\langle \vec{x} \left| \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \right| \vec{y} \right\rangle &= \int d^3p \int d^3q \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle \left\langle \vec{p} \left| \frac{\hat{p}^2}{2m} \right| \vec{q} \right\rangle \langle \vec{q} | \vec{y} \rangle \\ &= \int d^3p \int d^3q \frac{\vec{q}^2}{2m} \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \vec{q} \rangle \langle \vec{q} | \vec{y} \rangle = \int d^3p \int d^3q \frac{\vec{q}^2}{2m} \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle \langle \vec{q} | \vec{y} \rangle \delta(\vec{p} - \vec{q}) \\ &= \int d^3p \frac{\vec{p}^2}{2m} \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \vec{y} \rangle = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\vec{p}^2}{2m} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{x}-\vec{y}) \cdot \vec{p}} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_y \right) \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{x}-\vec{y}) \cdot \vec{p}}\end{aligned}$$

$$= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_y \right) \delta(\vec{x} - \vec{y}).$$

Somit

$$\begin{aligned} \hat{T} &= \int d^3x \int d^3y \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_y \delta(\vec{x} - \vec{y}) \right) \hat{\phi}(\vec{y}) \\ &= \int d^3x \int d^3y \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) \delta(\vec{x} - \vec{y}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_y \hat{\phi}(\vec{y}) \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3x \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) \Delta \hat{\phi}(\vec{x}). \end{aligned}$$

Falls die Zustände, auf die der Operator angewandt wird, im Unendlichen hinreichend stark abfallen, können wir partiell integrieren und erhalten

$$\hat{T} = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3x \left(\vec{\nabla} \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) \right) \left(\vec{\nabla} \hat{\phi}(\vec{x}) \right).$$

Betrachten wir als weiteres Beispiel, daß sich N Teilchen in einem äußeren Potential befinden, untereinander aber nicht wechselwirken. In diesem Fall wird die potentielle Energie wieder durch einen Einteilchenoperator beschrieben:

$$\hat{V} = \sum_{k=1}^N \hat{V}_k = \sum_{i,j} V_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \quad V_{ij} = {}_k \langle i | \hat{V}_k | j \rangle_k.$$

Die Operatoren \hat{V}_k sind alle identisch, sie unterscheiden sich nur durch die Teilchen, auf die sie wirken. Wir bezeichnen mit $\hat{V}^{(1)}$ einen dieser Operatoren. Ersetzen wir wieder die Auf- und Absteigeoperatoren durch die Feldoperatoren, so finden wir

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \sum_{i,j} \int d^3x \int d^3y \phi_i(\vec{x}) \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) V_{ij} \phi_j(\vec{y})^* \hat{\phi}(\vec{y}) \\ &= \sum_{i,j} \int d^3x \int d^3y \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) \langle \vec{x} | i \rangle \langle i | \hat{V}^{(1)} | j \rangle \langle j | \vec{y} \rangle \hat{\phi}(\vec{y}) \\ &= \int d^3x \int d^3y \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) \langle \vec{x} | \hat{V}^{(1)} | \vec{y} \rangle \hat{\phi}(\vec{y}) = \int d^3x \int d^3y \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) V^{(1)}(\vec{y}) \delta(\vec{x} - \vec{y}) \hat{\phi}(\vec{y}) \\ &= \int d^3x \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) V^{(1)}(\vec{x}) \hat{\phi}(\vec{x}). \end{aligned}$$

Interessanter ist ein Zweiteilchenoperator, der zum Beispiel die Wechselwirkung zweier Teilchen beschreibt. Wir betrachten

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{r \neq s} \hat{V}_{rs} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} V_{ij,kl} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k, \quad V_{ij,kl} = (\langle i |_r \otimes \langle j |_s) \hat{V}_{rs} (|k \rangle_r \otimes |l \rangle_s).$$

Wir bezeichnen mit $\hat{V}^{(2)}$ einen der Operatoren \hat{V}_{rs} . Wir erhalten nun

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \int d^3x_1 \int d^3x_2 \int d^3y_1 \int d^3y_2 \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}_1) \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}_2) \hat{\phi}(\vec{y}_2) \hat{\phi}(\vec{y}_1)$$

$$\begin{aligned}
& \varphi_i(\vec{x}_1) \varphi_j(\vec{x}_2) V_{ij,kl} \varphi_l(\vec{y}_2)^* \varphi_k(\vec{y}_1)^* \\
= & \frac{1}{2} \int d^3x_1 \int d^3x_2 \int d^3y_1 \int d^3y_2 \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}_1) \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}_2) \hat{\phi}(\vec{y}_2) \hat{\phi}(\vec{y}_1) \\
& V^{(2)}(\vec{y}_1, \vec{y}_2) \delta(\vec{x}_1 - \vec{y}_1) \delta(\vec{x}_2 - \vec{y}_2) \\
= & \frac{1}{2} \int d^3x_1 \int d^3x_2 \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}_1) \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}_2) V^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \hat{\phi}(\vec{x}_2) \hat{\phi}(\vec{x}_1).
\end{aligned}$$

Zu guter Letzt in dieser Aufzählung betrachten wir noch den Teilchenzahloperator \hat{N} . Hier ergibt sich

$$\begin{aligned}
\hat{N} &= \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = \sum_i \int d^3x \int d^3y \varphi_i(\vec{x}) \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) \varphi_i(\vec{y})^* \hat{\phi}(\vec{y}) \\
&= \int d^3x \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\phi}(\vec{x}).
\end{aligned}$$

Als **Dichteoperator** bezeichnen wir den Operator

$$\hat{n} = \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\phi}(\vec{x}).$$

2.5.2 Impulsdarstellung

Im vorherigen Abschnitt haben wir für $|\vec{m}\rangle$ eine Basis von Ortseigenzuständen gewählt. Alternativ können wir den Fall betrachten, in dem $|\vec{m}\rangle$ eine Basis von Impulseigenzuständen bildet. Haben die Teilchen zusätzlich Spin, so werden die Teilchen durch die Quantenzahlen (\vec{p}, s, m) charakterisiert. Wir bezeichnen die Impuls- (und Spin-) Eigenzustände mit $|\vec{p}, s, m\rangle$ und schreiben zur Abkürzung einfach $|\vec{p}\rangle$.

Für die Skalarprodukte zwischen Vektoren der Basis $|\vec{p}\rangle$ und $|i\rangle$ schreiben wir

$$\langle \vec{p} | i \rangle = \varphi_i(\vec{p}).$$

Es sei $\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger$ der Operator, der ein Teilchen im Zustand $|\vec{p}\rangle$ erzeugt, d.h.

$$\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger |0\rangle = |\vec{p}\rangle.$$

und $\hat{a}_{\vec{p}}$ der entsprechende Vernichtungsoperator. Im Gegensatz zur Ortsdarstellung ist es bei der Impulsdarstellung nicht üblich, für diese Operatoren eine spezielle Notation einzuführen. Es gilt

$$\begin{aligned}
\hat{a}_{\vec{p}} &= \sum_i \varphi_i(\vec{p}) \hat{a}_i, \\
\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger &= \sum_i \varphi_i(\vec{p})^* \hat{a}_i^\dagger.
\end{aligned}$$

Die Umkehrung lautet

$$\hat{a}_i = \int d^3p \varphi_i(\vec{p})^* \hat{a}_{\vec{p}}, \quad \hat{a}_i^\dagger = \int d^3p \varphi_i(\vec{p}) \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger.$$

Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für die Impulseigenzustände erfüllen die Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned} \text{Bosonen :} \quad & [\hat{a}_{\vec{p}}, \hat{a}_{\vec{q}}] = 0, \quad [\hat{a}_{\vec{p}}, \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger] = 0, \quad [\hat{a}_{\vec{p}}, \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger] = \delta(\vec{p} - \vec{q}), \\ \text{Fermionen :} \quad & \{\hat{a}_{\vec{p}}, \hat{a}_{\vec{q}}\} = 0, \quad \{\hat{a}_{\vec{p}}, \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger\} = 0, \quad \{\hat{a}_{\vec{p}}, \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger\} = \delta(\vec{p} - \vec{q}). \end{aligned}$$

In der Impulsdarstellung ist der Operator für die kinetische Energie von N Teilchen besonders einfach:

$$\hat{T} = \sum_{k=1}^N \hat{T}_k = \int d^3 p \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}}$$

Befinden sich die N Teilchen in einem externen Potential (ohne Wechselwirkung zwischen den Teilchen) so erhält man mit

$$V^{(1)}(\vec{p}, \vec{q}) = \langle \vec{p} | \hat{V}^{(1)} | \vec{q} \rangle$$

den Ausdruck

$$\hat{V} = \int d^3 p \int d^3 q \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \langle \vec{p} | \hat{V}^{(1)} | \vec{q} \rangle \hat{a}_{\vec{q}} = \int d^3 p \int d^3 q V^{(1)}(\vec{p}, \vec{q}) \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}}.$$

In der Ortsdarstellung ist $\hat{V}^{(1)}$ ein Operator, der nur von \hat{x} abhängt. Es ist daher

$$\begin{aligned} V^{(1)}(\vec{p}, \vec{q}) &= \langle \vec{p} | \hat{V}^{(1)} | \vec{q} \rangle = \int d^3 x \int d^3 y \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \hat{V}^{(1)} | \vec{y} \rangle \langle \vec{y} | \vec{q} \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 x \int d^3 y e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{x} \cdot \vec{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{y} \cdot \vec{q}} V^{(1)}(\vec{y}) \delta(\vec{x} - \vec{y}) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 x e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{x} \cdot (\vec{p} - \vec{q})} V^{(1)}(\vec{x}) \end{aligned}$$

$V^{(1)}(\vec{x})$ bezeichnet den Eigenwert des Operators $\hat{V}^{(1)}$ bezüglich des Zustands $|\vec{x}\rangle$. Es bietet sich an, für $V^{(1)}(\vec{x})$ die Fourierdarstellung einzuführen:

$$V^{(1)}(\vec{x}) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi\hbar)^3} e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}} \tilde{V}^{(1)}(\vec{k}).$$

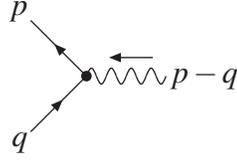
Somit

$$\begin{aligned} V^{(1)}(\vec{p}, \vec{q}) &= \int \frac{d^3 x}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d^3 k}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{x} \cdot (\vec{p} - \vec{q} - \vec{k})} \tilde{V}^{(1)}(\vec{k}) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{V}^{(1)}(\vec{k}) \delta(\vec{p} - \vec{q} - \vec{k}) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{V}^{(1)}(\vec{p} - \vec{q}). \end{aligned}$$

Wir erhalten also

$$\hat{V} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p \int d^3 q \tilde{V}^{(1)}(\vec{p} - \vec{q}) \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}}.$$

Wir können die Wechselwirkung graphisch darstellen:



Für einen Operator, der die paarweise Wechselwirkung zweier Teilchen beschreibt, setzen wir

$$V^{(2)}(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{q}_1, \vec{q}_2) = (\langle \vec{p}_1 | \otimes \langle \vec{p}_2 |) \hat{V}^{(2)} (|\vec{q}_1\rangle \otimes |\vec{q}_2\rangle)$$

und erhalten

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \int d^3 p_1 \int d^3 p_2 \int d^3 q_1 \int d^3 q_2 V^{(2)}(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{q}_1, \vec{q}_2) \hat{a}_{\vec{p}_1}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}_2} \hat{a}_{\vec{q}_1}.$$

Die weitere Argumentation erfolgt analog zum Fall des Einteilchenpotentials. Wir nehmen an, daß der Eigenwert $V^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ des Operators $\hat{V}^{(2)}$ bezüglich des Zustandes $|\vec{x}_1\rangle \otimes |\vec{x}_2\rangle$ nur von der Relativkoordinate $(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$ abhängt:

$$V^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = V^{(2)}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2).$$

Mit der Fourierdarstellung

$$V^{(2)}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)} \tilde{V}^{(2)}(\vec{k})$$

erhalten wir

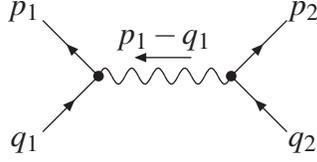
$$\begin{aligned} V^{(2)}(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{q}_1, \vec{q}_2) &= \int \frac{d^3 k}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{V}^{(2)}(\vec{k}) \delta(\vec{p}_1 - \vec{q}_1 - \vec{k}) \delta(\vec{p}_2 - \vec{q}_2 + \vec{k}) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}_1 - \vec{q}_1) \delta(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{q}_1 - \vec{q}_2), \end{aligned}$$

und daher

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p_1 \int d^3 p_2 \int d^3 q_1 \int d^3 q_2 \hat{a}_{\vec{p}_1}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}_2} \hat{a}_{\vec{q}_1} \\ &\quad \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}_1 - \vec{q}_1) \delta(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{q}_1 - \vec{q}_2). \end{aligned}$$

Bemerkung: Aufgrund der Delta-Funktion können wir $\tilde{V}^{(2)}(\vec{p}_1 - \vec{q}_1)$ durch $\tilde{V}^{(2)}(\vec{q}_2 - \vec{p}_2)$ ersetzen.

Auch diesen Term können wir graphisch darstellen:



Die Wechselwirkung hängt nur vom Impulsübertrag $p_1 - q_1$ ab.

Für den Teilchenzahloperator \hat{N} findet man

$$\begin{aligned}\hat{N} &= \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = \sum_i \int d^3 p \int d^3 q \varphi_i(\vec{p}) \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \varphi_i(\vec{q})^* \hat{a}_{\vec{q}} \\ &= \int d^3 p \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}}.\end{aligned}$$

Wir können natürlich auch direkt von der Ortsdarstellung in die Impulsdarstellung wechseln. Wir stellen die wichtigsten Formeln zusammen:

$$\begin{aligned}\hat{\phi}(\vec{x}) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d^3 p e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \hat{a}_{\vec{p}}, & \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d^3 p e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger, \\ \hat{a}_{\vec{p}}, &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d^3 x e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \hat{\phi}(\vec{x}), & \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d^3 x e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}).\end{aligned}$$

2.5.3 Das Heisenbergbild

Betrachten wir nun ein System, in dem der Hamiltonoperator gegeben ist durch

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \int d^3 x \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(\vec{\nabla} \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) \right) \left(\vec{\nabla} \hat{\phi}(\vec{x}) \right) + V^{(1)}(\vec{x}) \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) \hat{\phi}(\vec{x}) \right] \\ &\quad + \frac{1}{2} \int d^3 x_1 \int d^3 x_2 \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}_1) \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}_2) V^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \hat{\phi}(\vec{x}_2) \hat{\phi}(\vec{x}_1).\end{aligned}$$

Nebenbemerkung: In der Impulsdarstellung lautet der Hamiltonoperator

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \int d^3 p \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} + \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p \int d^3 q \tilde{V}^{(1)}(\vec{p} - \vec{q}) \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}} \\ &\quad + \frac{1}{2(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p_1 \int d^3 p_2 \int d^3 q_1 \int d^3 q_2 \delta(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{q}_1 - \vec{q}_2) \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}_1 - \vec{q}_1) \hat{a}_{\vec{p}_1}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}_2} \hat{a}_{\vec{q}_1}.\end{aligned}$$

Bisher haben wir alle Operatoren im Schrödingerbild betrachtet. In diesem Abschnitt diskutieren wir das Heisenbergbild. Zur besseren Unterscheidung verwenden wir nun die Notation \hat{O}_S für

einen Operator im Schrödingerbild. Für Operatoren im Heisenbergbild verwenden wir die Notation \hat{O}_H . Für einen nicht zeitabhängigen Hamiltonoperator lautet der Zusammenhang zwischen dem Heisenberg- und Schrödingerbild

$$\hat{O}_H(\vec{x}, t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \hat{O}_S(\vec{x}) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t},$$

Angewandt auf die Feldoperatoren $\hat{\phi}(\vec{x}) = \hat{\phi}_S(\vec{x})$ und $\hat{\phi}^\dagger(\vec{x}) = \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{x})$ erhalten wir die entsprechenden Feldoperatoren im Heisenbergbild:

$$\hat{\phi}_H^\dagger(\vec{x}, t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{x}) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}, \quad \hat{\phi}_H(\vec{x}, t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \hat{\phi}_S(\vec{x}) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}.$$

Die Operatoren im Heisenbergbild sind zeitabhängig und erfüllen die Bewegungsgleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{O}_H = [\hat{O}_H, \hat{H}].$$

Für ein System, in dem der Hamiltonoperator wie oben gegeben ist, findet man für den Feldoperator im Heisenbergbild

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\phi}_H(\vec{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V^{(1)}(\vec{x}) \right) \hat{\phi}_H(\vec{x}, t) + \int d^3y \hat{\phi}_H^\dagger(\vec{y}, t) V^{(2)}(\vec{x}, \vec{y}) \hat{\phi}_H(\vec{y}, t) \hat{\phi}_H(\vec{x}, t).$$

Dies gilt sowohl für Bosonen als auch für Fermionen. Es ist

$$[\hat{\phi}_H(\vec{x}, t), \hat{H}] = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} [\hat{\phi}_S(\vec{x}), \hat{H}] e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}.$$

Der Hamiltonoperator \hat{H} unseres Beispiels enthält Terme bilinear in den Feldoperatoren, sowie Wechselwirkungsterme, die ein Produkt von vier Feldoperatoren enthalten. Betrachten wir zunächst die bilinearen Terme. Für Bosonen verwenden wir

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}] \hat{C} + \hat{B} [\hat{A}, \hat{C}],$$

für Fermionen verwenden wir

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = \{\hat{A}, \hat{B}\} \hat{C} - \hat{B} \{\hat{A}, \hat{C}\}.$$

Wir führen die Notation

$$[\hat{A}, \hat{B}]_- = [\hat{A}, \hat{B}], \quad [\hat{A}, \hat{B}]_+ = \{\hat{A}, \hat{B}\}$$

ein, dies erlaubt uns beide Fälle gleichzeitig zu behandeln. Für den kinetischen Anteil erhalten wir dann

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3y \left[\hat{\phi}_S(\vec{x}), \left(\vec{\nabla} \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}) \right) \left(\vec{\nabla} \hat{\phi}_S(\vec{y}) \right) \right] = \\ & = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3y \left[\hat{\phi}_S(\vec{x}), \left(\vec{\nabla} \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}) \right) \right]_{\mp} \left(\vec{\nabla} \hat{\phi}_S(\vec{y}) \right) \pm \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3y \left(\vec{\nabla} \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}) \right) \left[\hat{\phi}_S(\vec{x}), \left(\vec{\nabla} \hat{\phi}_S(\vec{y}) \right) \right]_{\mp} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3y \left[\hat{\phi}_S(\vec{x}), \left(\hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}) \right) \right]_{\mp} (\Delta \hat{\phi}_S(\vec{y})) \mp \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3y \left(\Delta \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}) \right) \left[\hat{\phi}_S(\vec{x}), \left(\hat{\phi}_S(\vec{y}) \right) \right]_{\mp} \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3y \delta(\vec{x} - \vec{y}) (\Delta \hat{\phi}_S(\vec{y})) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta \hat{\phi}_S(\vec{x})).
\end{aligned}$$

Ebenso erhält man für den Term, der $V^{(1)}(\vec{x})$ enthält

$$\begin{aligned}
&\int d^3y V^{(1)}(\vec{y}) \left[\hat{\phi}_S(\vec{x}), \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}) \hat{\phi}_S(\vec{y}) \right] = \\
&= \int d^3y V^{(1)}(\vec{y}) \left[\hat{\phi}_S(\vec{x}), \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}) \right]_{\mp} \hat{\phi}_S(\vec{y}) \pm \int d^3y V^{(1)}(\vec{y}) \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}) \left[\hat{\phi}_S(\vec{x}), \hat{\phi}_S(\vec{y}) \right]_{\mp} \\
&= \int d^3y V^{(1)}(\vec{y}) \delta(\vec{x} - \vec{y}) \hat{\phi}_S(\vec{y}) = V^{(1)}(\vec{x}) \hat{\phi}_S(\vec{x}).
\end{aligned}$$

Der Wechselwirkungsterm ist nur von der Notation etwas aufwendiger.

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2} \int d^3y_1 \int d^3y_2 V^{(2)}(\vec{y}_1, \vec{y}_2) \left[\hat{\phi}_S(\vec{x}), \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}_1) \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}_2) \hat{\phi}_S(\vec{y}_2) \hat{\phi}_S(\vec{y}_1) \right] = \\
&= \frac{1}{2} \int d^3y_1 \int d^3y_2 V^{(2)}(\vec{y}_1, \vec{y}_2) \left[\hat{\phi}_S(\vec{x}), \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}_1) \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}_2) \right] \hat{\phi}_S(\vec{y}_2) \hat{\phi}_S(\vec{y}_1) \\
&= \frac{1}{2} \int d^3y_1 \int d^3y_2 V^{(2)}(\vec{y}_1, \vec{y}_2) \left(\left[\hat{\phi}_S(\vec{x}), \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}_1) \right]_{\mp} \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}_2) \pm \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}_1) \left[\hat{\phi}_S(\vec{x}), \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}_2) \right]_{\mp} \right) \\
&\quad \hat{\phi}_S(\vec{y}_2) \hat{\phi}_S(\vec{y}_1) \\
&= \frac{1}{2} \int d^3y_1 \int d^3y_2 V^{(2)}(\vec{y}_1, \vec{y}_2) \left(\delta(\vec{x} - \vec{y}_1) \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}_2) \pm \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}_1) \delta(\vec{x} - \vec{y}_2) \right) \hat{\phi}_S(\vec{y}_2) \hat{\phi}_S(\vec{y}_1) \\
&= \frac{1}{2} \int d^3y_2 V^{(2)}(\vec{x}, \vec{y}_2) \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}_2) \hat{\phi}_S(\vec{y}_2) \hat{\phi}_S(\vec{x}) \pm \frac{1}{2} \int d^3y_1 V^{(2)}(\vec{y}_1, \vec{x}) \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}_1) \hat{\phi}_S(\vec{x}) \hat{\phi}_S(\vec{y}_1) \\
&= \frac{1}{2} \int d^3y V^{(2)}(\vec{x}, \vec{y}) \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}) \hat{\phi}_S(\vec{y}) \hat{\phi}_S(\vec{x}) + \frac{1}{2} \int d^3y V^{(2)}(\vec{y}, \vec{x}) \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}) \hat{\phi}_S(\vec{y}) \hat{\phi}_S(\vec{x}) \\
&= \int d^3y V^{(2)}(\vec{x}, \vec{y}) \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}) \hat{\phi}_S(\vec{y}) \hat{\phi}_S(\vec{x}),
\end{aligned}$$

wobei wir im letzten Schritt $V^{(2)}(\vec{y}, \vec{x}) = V^{(2)}(\vec{x}, \vec{y})$ ausgenutzt haben. Für den Erzeugungsoperator $\hat{\phi}_H^\dagger(\vec{x}, t)$ findet man

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\phi}_H^\dagger(\vec{x}, t) = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - V^{(1)}(\vec{x}) \right) \hat{\phi}_H^\dagger(\vec{x}, t) - \int d^3y \hat{\phi}_H^\dagger(\vec{x}, t) \hat{\phi}_H^\dagger(\vec{y}, t) V^{(2)}(\vec{x}, \vec{y}) \hat{\phi}_H(\vec{y}, t).$$

Auch diese Formel gilt für Bosonen und Fermionen. Hierbei ist zu beachten, daß

$$\left[\hat{\phi}_S^\dagger(\vec{x}), \hat{\phi}_S(\vec{y}) \right]_{\mp} = \mp \left[\hat{\phi}_S(\vec{y}), \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{x}) \right]_{\mp} = \mp \delta(\vec{x} - \vec{y})$$

gilt. So ist beispielsweise

$$\begin{aligned}
& \int d^3y V^{(1)}(\vec{y}) \left[\hat{\phi}_S^\dagger(\vec{x}), \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}) \hat{\phi}_S(\vec{y}) \right] = \\
& = \int d^3y V^{(1)}(\vec{y}) \left[\hat{\phi}_S^\dagger(\vec{x}), \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}) \right]_{\mp} \hat{\phi}_S(\vec{y}) \pm \int d^3y V^{(1)}(\vec{y}) \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}) \left[\hat{\phi}_S^\dagger(\vec{x}), \hat{\phi}_S(\vec{y}) \right]_{\mp} \\
& = - \int d^3y V^{(1)}(\vec{y}) \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}) \left[\hat{\phi}_S(\vec{y}), \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{x}) \right]_{\mp} = - \int d^3y V^{(1)}(\vec{y}) \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{y}) \delta(\vec{x} - \vec{y}) \\
& = -V^{(1)}(\vec{x}) \hat{\phi}_S^\dagger(\vec{x}).
\end{aligned}$$

Der Dichteoperator im Heisenbergbild ist gegeben durch

$$\hat{n}_H = \hat{\phi}_H^\dagger(\vec{x}, t) \hat{\phi}_H(\vec{x}, t).$$

Für die Zeitableitung gilt

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{n}_H = i\hbar \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{\phi}_H^\dagger(\vec{x}, t) \right) \hat{\phi}_H(\vec{x}, t) + \hat{\phi}_H^\dagger(\vec{x}, t) \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{\phi}_H(\vec{x}, t) \right) \right]$$

Verwenden wir nun die hergeleiteten Ausdrücke für die Zeitableitungen der Feldoperatoren, so heben sich viele Terme weg und wir erhalten

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{n}_H = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\Delta \hat{\phi}_H^\dagger(\vec{x}, t) \right) \hat{\phi}_H(\vec{x}, t) - \hat{\phi}_H^\dagger(\vec{x}, t) \left(\Delta \hat{\phi}_H(\vec{x}, t) \right) \right].$$

Dies motiviert die Definition des **Stromdichteoperators**

$$\hat{j}_H = \frac{i\hbar}{2m} \left[\left(\vec{\nabla} \hat{\phi}_H^\dagger(\vec{x}, t) \right) \hat{\phi}_H(\vec{x}, t) - \hat{\phi}_H^\dagger(\vec{x}, t) \left(\vec{\nabla} \hat{\phi}_H(\vec{x}, t) \right) \right].$$

Wir erhalten also

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{n}_H = -\vec{\nabla} \hat{j}_H.$$

Diese Gleichung entspricht einer Kontinuitätsgleichung in der klassischen Physik.

3 Anwendungen

3.1 Bosonen

Wir betrachten ein System von N Bosonen mit Spin Null in einem endlichen Volumen V . Da wir nun ein System in einem endlichen Volumen betrachten, sind die Impulseigenzustände diskret. Wir verwenden die Normierung

$$\langle \vec{p} | \vec{q} \rangle = \delta_{\vec{p}, \vec{q}}$$

und es ist

$$\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{p} \cdot \vec{x}}.$$

Da wir Spin Null annehmen, sind die Zustände durch die Impulsquantenzahlen vollständig charakterisiert. Wir bezeichnen mit

$$|\psi\rangle = |N_1, N_2, \dots\rangle$$

einen Zustand der Besetzungszahldarstellung bezüglich der Impulseigenzustände. Der erste Impulseigenzustand ist also N_1 -fach besetzt, der zweite Impulseigenzustand ist N_2 -fach besetzt, usw.. Es gilt

$$N = N_1 + N_2 + \dots = \sum_{\vec{p}} N_{\vec{p}}.$$

3.1.1 Freie Bosonen

Wir beginnen unsere Betrachtungen mit Fall, daß keine Wechselwirkung zwischen den Bosonen vorliegt. Wir bestimmen zunächst den Erwartungswert des Teilchendichteoperators $\hat{n} = \hat{\phi}^\dagger(\vec{x})\hat{\phi}(\vec{x})$:

$$\begin{aligned} n_\psi &= \langle \psi | \hat{\phi}^\dagger(\vec{x})\hat{\phi}(\vec{x}) | \psi \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}, \vec{q}} e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{q}) \cdot \vec{x}} \langle \psi | \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}} | \psi \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} \langle \psi | \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} N_{\vec{p}} = \frac{N}{V}. \end{aligned}$$

Der Erwartungswert der Teilchendichte ist also ortsunabhängig.

Als nächstes betrachten wir die **Paarverteilungsfunktion** $g(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$. Diese ist durch

$$n_\psi^2 g(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) = \langle \psi | \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}_1)\hat{\phi}^\dagger(\vec{x}_2)\hat{\phi}(\vec{x}_2)\hat{\phi}(\vec{x}_1) | \psi \rangle$$

definiert. Die rechte Seite entspricht dem Erwartungswert, im Zustand $|\psi\rangle$ ein Teilchen am Ort \vec{x}_1 und ein weiteres Teilchen am Ort \vec{x}_2 zu finden. Es ist

$$\langle \psi | \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}_1)\hat{\phi}^\dagger(\vec{x}_2)\hat{\phi}(\vec{x}_2)\hat{\phi}(\vec{x}_1) | \psi \rangle =$$

$$\frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{q}_1, \vec{q}_2} e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_1 - \vec{q}_1) \cdot \vec{x}_1} e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_2 - \vec{q}_2) \cdot \vec{x}_2} \langle \Psi | \hat{a}_{\vec{p}_1}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}_2} \hat{a}_{\vec{q}_1} | \Psi \rangle$$

Wir unterscheiden nun die Fälle $\vec{p}_1 = \vec{p}_2$ und $\vec{p}_1 \neq \vec{p}_2$. Im ersten Fall ist dann auch $\vec{q}_1 = \vec{q}_2$ die einzige Möglichkeit, ein nicht-verschwindendes Matrixelement zu erhalten. Im zweiten Fall ist dann entweder $\vec{p}_1 = \vec{q}_1$ und $\vec{p}_2 = \vec{q}_2$ oder $\vec{p}_1 = \vec{q}_2$ und $\vec{p}_2 = \vec{q}_1$. Wir erhalten somit

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}_1) \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}_2) \hat{\phi}(\vec{x}_2) \hat{\phi}(\vec{x}_1) | \Psi \rangle &= \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p}} \langle \Psi | \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p}} | \Psi \rangle \\ &+ \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p}_1 \neq \vec{p}_2} \langle \Psi | \hat{a}_{\vec{p}_1}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2} \hat{a}_{\vec{p}_1} | \Psi \rangle + \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p}_1 \neq \vec{p}_2} e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)} \langle \Psi | \hat{a}_{\vec{p}_1}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_1} \hat{a}_{\vec{p}_2} | \Psi \rangle. \end{aligned}$$

Wir erinnern uns

$$\begin{aligned} \hat{a}_i |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle &= \sqrt{N_i} |N_1, N_2, \dots, N_i - 1, \dots\rangle, \\ \hat{a}_i^\dagger |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle &= \sqrt{N_i + 1} |N_1, N_2, \dots, N_i + 1, \dots\rangle. \end{aligned}$$

Somit

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}_1) \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}_2) \hat{\phi}(\vec{x}_2) \hat{\phi}(\vec{x}_1) | \Psi \rangle &= \\ \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p}} N_{\vec{p}} (N_{\vec{p}} - 1) + \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p}_1 \neq \vec{p}_2} N_{\vec{p}_1} N_{\vec{p}_2} + \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p}_1 \neq \vec{p}_2} e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)} N_{\vec{p}_1} N_{\vec{p}_2}. \end{aligned}$$

Zu den Summen über $\vec{p}_1 \neq \vec{p}_2$ addieren und subtrahieren wir die Terme $\vec{p}_1 = \vec{p}_2$. Weiter ist

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}_2} e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)} N_{\vec{p}_1} N_{\vec{p}_2} &= \left(\sum_{\vec{p}_1} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}_1 \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)} N_{\vec{p}_1} \right) \left(\sum_{\vec{p}_2} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}_2 \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)} N_{\vec{p}_2} \right) \\ &= \left| \sum_{\vec{p}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p} \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)} N_{\vec{p}} \right|^2. \end{aligned}$$

Somit

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}_1) \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}_2) \hat{\phi}(\vec{x}_2) \hat{\phi}(\vec{x}_1) | \Psi \rangle &= \\ -\frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p}} N_{\vec{p}} (N_{\vec{p}} + 1) + \frac{1}{V^2} \left(\sum_{\vec{p}} N_{\vec{p}} \right)^2 + \frac{1}{V^2} \left| \sum_{\vec{p}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p} \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)} N_{\vec{p}} \right|^2 \\ &= \frac{N^2}{V^2} + \frac{1}{V^2} \left| \sum_{\vec{p}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p} \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)} N_{\vec{p}} \right|^2 - \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p}} N_{\vec{p}} (N_{\vec{p}} + 1). \end{aligned}$$

Wir diskutieren nun verschiedene Spezialfälle. Im ersten Fall nehmen wir an, daß alle Bosonen sich gleichen Zustand $|\vec{p}_0\rangle$ befinden. Es ist also

$$N_{\vec{p}} = N \delta_{\vec{p}, \vec{p}_0}.$$

Es ist dann

$$n_{\Psi}^2 g(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) = \langle \Psi | \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}_1) \hat{\phi}^\dagger(\vec{x}_2) \hat{\phi}(\vec{x}_2) \hat{\phi}(\vec{x}_1) | \Psi \rangle = \frac{1}{V^2} [N^2 + N^2 - N(N+1)] = \frac{N(N-1)}{V^2}.$$

Auch dieser Ausdruck ist ortsunabhängig. Wir können ihn wie folgt interpretieren: Die Wahrscheinlichkeit, das erste Teilchen zu detektieren ist N/V , die Wahrscheinlichkeit dann das zweite Teilchen zu detektieren ist $(N-1)/V$.

Wir betrachten nun einen zweiten Fall, in dem wir annehmen, daß die Impulse gaußförmig um einen Mittelwert \vec{p}_0 verteilt sind. In diesem Fall gehen wir wieder zu kontinuierlichen Impulswerten über und führen eine Besetzungsdichte $n_{\vec{p}}$ im Impulsraum ein (Anzahl der Zustände pro Impulsraumvolumen), für die wir die funktionale Form

$$n_{\vec{p}} = \frac{N}{(\sqrt{2\pi}\sigma)^3} e^{-\frac{(\vec{p}-\vec{p}_0)^2}{2\sigma^2}}$$

annehmen. Es ist

$$\int d^3 p n_{\vec{p}} = N.$$

Für den Übergang von den diskreten Variablen zu den kontinuierlichen Variablen gilt

$$\sum_{\vec{p}} N_{\vec{p}} = \sum_{\vec{p}} (\Delta p)^3 \frac{N_{\vec{p}}}{(\Delta p)^3} = \int d^3 p n_{\vec{p}}.$$

Insbesondere ist

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{p}} N_{\vec{p}}^2 &= \sum_{\vec{p}} (\Delta p)^3 \left(\frac{N_{\vec{p}}}{(\Delta p)^3} \right)^2 (\Delta p)^3 = \sum_{\vec{p}} (\Delta p)^3 n_{\vec{p}}^2 (\Delta p)^3 \\ &\rightarrow \lim_{\Delta p \rightarrow 0} \int d^3 p n_{\vec{p}}^2 (\Delta p)^3 = 0. \end{aligned}$$

Wir erhalten dann

$$n_{\Psi}^2 g(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) = n_{\Psi}^2 + \frac{1}{V^2} \left| \int d^3 p e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)} n_{\vec{p}} \right|^2 - \frac{1}{V^2} \int d^3 p n_{\vec{p}}.$$

Es ist

$$\begin{aligned} \int d^3 p e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)} n_{\vec{p}} &= \frac{N}{(\sqrt{2\pi}\sigma)^3} \int d^3 p e^{-\frac{(\vec{p}-\vec{p}_0)^2}{2\sigma^2} - \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)} \\ &= N e^{-\frac{\sigma^2}{2\hbar^2} (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)^2} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p}_0 \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)} \end{aligned}$$

Für den letzten Term gilt

$$\frac{1}{V^2} \int d^3 p n_{\vec{p}} = \frac{N}{V^2} = \frac{n_{\Psi}}{V}.$$

Dieser Term kann im Limes $V \rightarrow \infty$ vernachlässigt werden. Wir erhalten also

$$n_{\Psi}^2 g(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) = n_{\Psi}^2 \left(1 + e^{-\frac{\sigma^2}{\hbar^2}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)^2} \right) + O\left(\frac{1}{V}\right).$$

Somit gilt im Limes $V \rightarrow \infty$

$$g(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) = 1 + e^{-\frac{\sigma^2}{\hbar^2}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)^2}$$

Wir betrachten nun die Extremfälle $\vec{x}_1 - \vec{x}_2 = 0$ und $|\vec{x}_1 - \vec{x}_2| \rightarrow \infty$. Wir finden

$$\begin{aligned} \lim_{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2| \rightarrow 0} g(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) &= 2, \\ \lim_{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2| \rightarrow \infty} g(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) &= 1. \end{aligned}$$

Wir sehen also, daß für Bosonen die Wahrscheinlichkeit, zwei Teilchen am gleichen Ort zu finden, doppelt so groß ist wie die Wahrscheinlichkeit, diese zwei Teilchen mit einem großen Abstand zu finden.

3.1.2 Wechselwirkende Bosonen

Wir betrachten nun ein Gas von wechselwirkenden Bosonen. Hierbei wollen wir annehmen, daß die Wechselwirkung schwach ist, die Dichte des Gases klein ist und die Temperatur niedrig ist. Die Annahme einer geringen Dichte impliziert, daß wir die simultane Wechselwirkung von drei oder mehr Teilchen vernachlässigen können. Wir betrachten das Gas in einem endlichen Volumen V , so daß wir wieder mit diskreten Impulseigenzuständen arbeiten. Wir nehmen weiter an, daß die Zweiteilchenwechselwirkung nur von der Relativkoordinate $\vec{x}_1 - \vec{x}_2$ abhängt. Der Hamiltonoperator lautet

$$\hat{H} = \sum_{\vec{p}} \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\vec{p}}^{\dagger} \hat{a}_{\vec{p}} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{q}_1, \vec{q}_2} \delta_{\vec{p}_1 + \vec{p}_2, \vec{q}_1 + \vec{q}_2} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}_1 - \vec{q}_1) \hat{a}_{\vec{p}_1}^{\dagger} \hat{a}_{\vec{p}_2}^{\dagger} \hat{a}_{\vec{q}_2} \hat{a}_{\vec{q}_1}.$$

Die Annahme einer tiefen Temperatur impliziert, daß sich die meisten Bosonen im Zustand niedrigster Energie befinden. Dies ist der Zustand $\vec{p} = \vec{0}$. Es bietet sich in diesem Fall an, die Zustände beginnend mit Index 0 durchzunummerieren, d.h.

$$|\Psi\rangle = |N_0, N_1, N_2, \dots\rangle,$$

wobei N_0 die Besetzungszahl des Zustandes $\vec{p} = \vec{0}$ angibt. Dieser ist bei niedrigen Temperaturen makroskopisch besetzt

$$N_0 \approx N,$$

während für alle anderen Besetzungszahlen

$$N_j \ll N, \quad (j \geq 1),$$

gilt. Wir können daher die Wechselwirkung der angeregten Zustände untereinander vernachlässigen und uns auf die Wechselwirkung der angeregten Teilchen mit den kondensierten Teilchen bzw. der Wechselwirkung der kondensierten Teilchen untereinander beschränken. Zu diesem Zweck teilen wir die Summation über alle \vec{p} auf in einen Term $\vec{p} = \vec{0}$ und die verbleibenden Terme. Die Summation über die verbleibenden Terme bezeichnen wir mit einem Apostroph:

$$\sum'_{\vec{p}} = \sum_{\vec{p} \neq \vec{0}}$$

Mit der Notation

$$\hat{a}_0 = \hat{a}_{\vec{0}}, \quad \hat{a}_0^\dagger = \hat{a}_{\vec{0}}^\dagger, \quad \tilde{V}_0^{(2)} = \tilde{V}^{(2)}(\vec{0})$$

ergibt sich für den Hamiltonoperator

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{\vec{p}} \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} + \frac{1}{2V} \tilde{V}_0^{(2)} \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 + \frac{1}{V} \sum'_{\vec{p}} \tilde{V}_0^{(2)} \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_{\vec{p}} + \frac{1}{V} \sum'_{\vec{p}} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} \hat{a}_0 \\ &\quad + \frac{1}{2V} \sum'_{\vec{p}} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{p}}^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 + \frac{1}{2V} \sum'_{\vec{p}} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} \hat{a}_{-\vec{p}} + O(\hat{a}_{\vec{p}}^3) \\ &= \sum_{\vec{p}} \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} + \frac{1}{2V} \tilde{V}_0^{(2)} \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 + \frac{1}{V} \sum'_{\vec{p}} \left(\tilde{V}_0^{(2)} + \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) \right) \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} \\ &\quad + \frac{1}{2V} \sum'_{\vec{p}} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) \left(\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{p}}^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0 + \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} \hat{a}_{-\vec{p}} \right) + O(\hat{a}_{\vec{p}}^3). \end{aligned}$$

Weiter ist intuitiv klar, daß sich für $N = O(10^{23})$ die physikalischen Systeme, die durch die Zustände

$$|N_0, N_1, N_2, \dots\rangle, \quad |N_0 + 1, N_1, N_2, \dots\rangle, \quad |N_0 - 1, N_1, N_2, \dots\rangle$$

beschrieben werden, nicht wesentlich unterscheiden. Es ist daher

$$\begin{aligned} \hat{a}_0 |N_0, N_1, N_2, \dots\rangle &= \sqrt{N_0} |N_0 - 1, N_1, N_2, \dots\rangle \approx \sqrt{N_0} |N_0, N_1, N_2, \dots\rangle, \\ \hat{a}_0^\dagger |N_0, N_1, N_2, \dots\rangle &= \sqrt{N_0 + 1} |N_0 + 1, N_1, N_2, \dots\rangle \approx \sqrt{N_0} |N_0, N_1, N_2, \dots\rangle. \end{aligned}$$

Wir machen daher die Näherung, daß wir die Operatoren \hat{a}_0^\dagger und \hat{a}_0 durch die c-Zahl $\sqrt{N_0}$ ersetzen:

$$\hat{a}_0^\dagger = \hat{a}_0 = \sqrt{N_0}.$$

In dieser Näherung vereinfacht sich der Hamiltonoperator zu

$$\hat{H} = \sum'_{\vec{p}} \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} + \frac{N_0^2}{2V} \tilde{V}_0^{(2)} + \frac{N_0}{V} \sum'_{\vec{p}} \left(\tilde{V}_0^{(2)} + \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) \right) \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}}$$

$$+ \frac{N_0}{2V} \sum'_{\vec{p}} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) \left(\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{p}}^\dagger + \hat{a}_{\vec{p}} \hat{a}_{-\vec{p}} \right).$$

Für die Beziehung zwischen der gesamten Teilchenzahl N und der Besetzungszahl des Zustandes $\vec{p} = \vec{0}$ verwenden wir die Beziehung

$$N = N_0 + \sum'_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}}$$

und behalten nur die Terme, die maximal quadratisch in $\hat{a}_{\vec{p}}, \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger$ sind. Somit

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum'_{\vec{p}} \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} + \frac{N^2}{2V} \tilde{V}_0^{(2)} - \frac{N}{V} \tilde{V}_0^{(2)} \sum'_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} + \frac{N}{V} \sum'_{\vec{p}} \left(\tilde{V}_0^{(2)} + \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) \right) \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} \\ &\quad + \frac{N}{2V} \sum'_{\vec{p}} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) \left(\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{p}}^\dagger + \hat{a}_{\vec{p}} \hat{a}_{-\vec{p}} \right) \\ &= \sum'_{\vec{p}} \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} + \frac{N^2}{2V} \tilde{V}_0^{(2)} + \frac{N}{2V} \sum'_{\vec{p}} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) \left(\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{p}}^\dagger + 2\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} + \hat{a}_{\vec{p}} \hat{a}_{-\vec{p}} \right). \end{aligned}$$

Durch die verwendete Näherung ist der Hamiltonoperator nun bilinear in den Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Er ist allerdings nicht diagonal in diesen Operatoren, d.h. von der Form

$$\text{const} + \sum'_{\vec{p}} C(\vec{p}) \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}}.$$

Zur Diagonalisierung verwenden eine Methode, die unter dem Namen **Bogoliubov-Transformation** bekannt ist. Wir betrachten eine neue Basis von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, die durch

$$\begin{aligned} \hat{b}_{\vec{p}} &= u_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p}} + v_{\vec{p}} \hat{a}_{-\vec{p}}^\dagger, \\ \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger &= u_{\vec{p}}^* \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger + v_{\vec{p}}^* \hat{a}_{-\vec{p}}, \end{aligned}$$

mit den bisherigen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren zusammenhängt. Hierbei sind $u_{\vec{p}}$ und $v_{\vec{p}}$ c-Zahlen. Wir setzen voraus, daß die Koeffizienten symmetrisch sind

$$u_{\vec{p}} = u_{-\vec{p}}, \quad v_{\vec{p}} = v_{-\vec{p}},$$

sowie die zusätzliche Relation

$$|u_{\vec{p}}|^2 - |v_{\vec{p}}|^2 = 1.$$

erfüllen. Unter diesen Voraussetzungen erfüllen die neuen Operatoren $\hat{b}_{\vec{p}}$ und $\hat{b}_{\vec{p}}^\dagger$ ebenfalls kanonische Kommutationsrelationen. Es ist

$$[\hat{b}_{\vec{p}}, \hat{b}_{\vec{q}}] = \left[u_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p}} + v_{\vec{p}} \hat{a}_{-\vec{p}}^\dagger, u_{\vec{q}} \hat{a}_{\vec{q}} + v_{\vec{q}} \hat{a}_{-\vec{q}}^\dagger \right]$$

$$\begin{aligned}
&= u_{\vec{p}}v_{\vec{q}} \left[\hat{a}_{\vec{p}}, \hat{a}_{-\vec{q}}^\dagger \right] + u_{\vec{q}}v_{\vec{p}} \left[\hat{a}_{-\vec{p}}^\dagger, \hat{a}_{\vec{q}} \right] \\
&= u_{\vec{p}}v_{\vec{q}} \delta_{\vec{p},-\vec{q}} - u_{\vec{q}}v_{\vec{p}} \delta_{-\vec{p},\vec{q}} = (u_{\vec{p}}v_{-\vec{p}} - u_{-\vec{p}}v_{\vec{p}}) \delta_{\vec{p},-\vec{q}} \\
&= 0,
\end{aligned}$$

aufgrund von $u_{-\vec{p}} = u_{\vec{p}}$ und $v_{-\vec{p}} = v_{\vec{p}}$. Ebenso zeigt man

$$\left[\hat{b}_{\vec{p}}^\dagger, \hat{b}_{\vec{q}}^\dagger \right] = 0.$$

Betrachten wir nun noch

$$\begin{aligned}
\left[\hat{b}_{\vec{p}}, \hat{b}_{\vec{q}}^\dagger \right] &= \left[u_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p}} + v_{\vec{p}} \hat{a}_{-\vec{p}}^\dagger, u_{\vec{q}}^* \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger + v_{\vec{q}}^* \hat{a}_{-\vec{q}} \right] \\
&= u_{\vec{p}}u_{\vec{q}}^* \delta_{\vec{p},\vec{q}} - v_{\vec{p}}v_{\vec{q}}^* \delta_{-\vec{p},-\vec{q}} = \left(|u_{\vec{p}}|^2 - |v_{\vec{p}}|^2 \right) \delta_{\vec{p},\vec{q}} \\
&= \delta_{\vec{p},\vec{q}},
\end{aligned}$$

wobei wir $|u_{\vec{p}}|^2 - |v_{\vec{p}}|^2 = 1$ verwendet haben. Die Umkehrtransformation lautet

$$\begin{aligned}
\hat{a}_{\vec{p}} &= u_{\vec{p}}^* \hat{b}_{\vec{p}} - v_{\vec{p}} \hat{b}_{-\vec{p}}^\dagger, \\
\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger &= u_{\vec{p}} \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger - v_{\vec{p}}^* \hat{b}_{-\vec{p}}.
\end{aligned}$$

Wir beschränken uns nun auf reelle Koeffizienten $u_{\vec{p}}$ und $v_{\vec{p}}$. Es ist dann

$$\begin{aligned}
\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} &= u_{\vec{p}}^2 \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{\vec{p}} + v_{\vec{p}}^2 \hat{b}_{-\vec{p}} \hat{b}_{-\vec{p}}^\dagger - u_{\vec{p}}v_{\vec{p}} \left(\hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{-\vec{p}}^\dagger + \hat{b}_{-\vec{p}} \hat{b}_{\vec{p}} \right), \\
\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{p}}^\dagger &= u_{\vec{p}}^2 \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{-\vec{p}}^\dagger + v_{\vec{p}}^2 \hat{b}_{-\vec{p}} \hat{b}_{\vec{p}} - u_{\vec{p}}v_{\vec{p}} \left(\hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{\vec{p}} + \hat{b}_{-\vec{p}} \hat{b}_{-\vec{p}}^\dagger \right), \\
\hat{a}_{\vec{p}} \hat{a}_{-\vec{p}} &= u_{\vec{p}}^2 \hat{b}_{\vec{p}} \hat{b}_{-\vec{p}} + v_{\vec{p}}^2 \hat{b}_{-\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger - u_{\vec{p}}v_{\vec{p}} \left(\hat{b}_{\vec{p}} \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger + \hat{b}_{-\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{-\vec{p}} \right).
\end{aligned}$$

Somit ergibt sich für den Hamiltonoperator unter Benutzung von $\tilde{V}^{(2)}(-\vec{p}) = \tilde{V}^{(2)}(\vec{p})$

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{N^2}{2V} \tilde{V}_0^{(2)} + \sum_{\vec{p}}' \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} + \frac{N}{2V} \sum_{\vec{p}}' \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) \left(\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{p}}^\dagger + 2\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} + \hat{a}_{\vec{p}} \hat{a}_{-\vec{p}} \right) \\
&= \frac{N^2}{2V} \tilde{V}_0^{(2)} + \sum_{\vec{p}}' u_{\vec{p}} \left(u_{\vec{p}} \frac{p^2}{2m} + (u_{\vec{p}} - v_{\vec{p}}) \frac{N}{V} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) \right) \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{\vec{p}} \\
&\quad + \sum_{\vec{p}}' v_{\vec{p}} \left(v_{\vec{p}} \frac{p^2}{2m} + (v_{\vec{p}} - u_{\vec{p}}) \frac{N}{V} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) \right) \hat{b}_{\vec{p}} \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \\
&\quad + \sum_{\vec{p}}' \left(-u_{\vec{p}}v_{\vec{p}} \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} (u_{\vec{p}} - v_{\vec{p}})^2 \frac{N}{V} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) \right) \left(\hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{-\vec{p}}^\dagger + \hat{b}_{-\vec{p}} \hat{b}_{\vec{p}} \right).
\end{aligned}$$

Wir können nun die Koeffizienten $u_{\vec{p}}$ und $v_{\vec{p}}$ so wählen, daß die nicht-diagonalen Terme proportional zu

$$\hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{-\vec{p}}^\dagger + \hat{b}_{-\vec{p}} \hat{b}_{\vec{p}}$$

verschwinden. Der Ansatz

$$u_{\vec{p}} = \cosh f(p^2), \quad v_{\vec{p}} = \sinh f(p^2)$$

erfüllt automatisch die bisherigen Nebenbedingungen $u_{\vec{p}} = u_{-\vec{p}}$, $v_{\vec{p}} = v_{-\vec{p}}$ und $u_{\vec{p}}^2 - v_{\vec{p}}^2 = 1$. Wir fordern nun zusätzlich

$$u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2} (u_{\vec{p}} - v_{\vec{p}})^2 \frac{N}{V} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) = 0.$$

Einsetzen liefert

$$u_{\vec{p}}^2 (u_{\vec{p}}^2 - 1) = \frac{1}{4} \frac{\left(\frac{N}{V} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) \right)^2}{\frac{p^2}{2m} \left(\frac{p^2}{2m} + 2 \frac{N}{V} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) \right)}.$$

Lösen der quadratischen Gleichung liefert

$$u_{\vec{p}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\frac{p^2}{2m} + \frac{N}{V} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p})}{\sqrt{\frac{p^2}{2m} \left(\frac{p^2}{2m} + 2 \frac{N}{V} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) \right)}} \right),$$

wobei wir die “+”-Lösung genommen haben. Zur Abkürzung setzen wir

$$E_{\vec{p}} = \sqrt{\frac{p^2}{2m} \left(\frac{p^2}{2m} + 2 \frac{N}{V} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) \right)}.$$

Somit

$$u_{\vec{p}}^2 = \frac{\frac{p^2}{2m} + \frac{N}{V} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) + E_{\vec{p}}}{2E_{\vec{p}}}, \quad v_{\vec{p}}^2 = u_{\vec{p}}^2 - 1 = \frac{\frac{p^2}{2m} + \frac{N}{V} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) - E_{\vec{p}}}{2E_{\vec{p}}},$$

und

$$u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} = \frac{\frac{N}{V} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p})}{2E_{\vec{p}}}.$$

Für den Hamiltonoperator erhalten wir somit unter Verwendung von

$$\hat{b}_{\vec{p}} \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger = \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{\vec{p}} + 1$$

das Ergebnis

$$\hat{H} = \frac{N^2}{2V} \tilde{V}_0^{(2)} + \sum_{\vec{p}}' \left(v_{\vec{p}}^2 \frac{p^2}{2m} + v_{\vec{p}} (v_{\vec{p}} - u_{\vec{p}}) \frac{N}{V} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) \right)$$

$$\begin{aligned}
& + \sum'_{\vec{p}} \left(\left(u_{\vec{p}}^2 + v_{\vec{p}}^2 \right) \frac{p^2}{2m} + (u_{\vec{p}} - v_{\vec{p}})^2 \frac{N}{V} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) \right) \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{\vec{p}} \\
= & \frac{N^2}{2V} \tilde{V}_0^{(2)} + \frac{1}{2} \sum'_{\vec{p}} \left(E_{\vec{p}} - \frac{p^2}{2m} - \frac{N}{V} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) \right) + \sum'_{\vec{p}} E_{\vec{p}} \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{\vec{p}}
\end{aligned}$$

Dieser Hamiltonoperator ist nun diagonal. Der Ausdruck

$$E_0 = \frac{N^2}{2V} \tilde{V}_0^{(2)} + \frac{1}{2} \sum'_{\vec{p}} \left(E_{\vec{p}} - \frac{p^2}{2m} - \frac{N}{V} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) \right)$$

ist eine c-Zahl und beschreibt die Grundzustandsenergie, der Ausdruck

$$\sum'_{\vec{p}} E_{\vec{p}} \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{\vec{p}}$$

eine Summe harmonischer Oszillatoren mit der Energie $E_{\vec{p}}$. Wir bezeichnen die durch die Operatoren $\hat{b}_{\vec{p}}^\dagger$ und $\hat{b}_{\vec{p}}$ erzeugten bzw. vernichteten Zustände als **Quasiteilchen** mit Impuls \vec{p} . Der Operator $\hat{b}_{\vec{p}}^\dagger$ erzeugt ein Quasiteilchen, der Operator $\hat{b}_{\vec{p}}$ vernichtet ein Quasiteilchen. Wir können nun den Grundzustand des wechselwirkenden Systems angeben, dies ist der Zustand $|\psi_0\rangle$, der von allen $\hat{b}_{\vec{p}}$ annihilert wird:

$$\hat{b}_{\vec{p}} |\psi_0\rangle = 0 \quad \text{für alle } \vec{p} \neq \vec{0}.$$

Dies ist nicht der Zustand, in dem sich alle Teilchen im Zustand $\vec{p} = \vec{0}$ befinden. Letzterer ist der Grundzustand des nicht-wechselwirkenden Systems. Die Wechselwirkung modifiziert den Grundzustand. Wir betrachten dies kurz etwas genauer. Die Zahl der angeregten Quasiteilchen im Zustand $|\psi_0\rangle$ ist klarerweise Null:

$$\sum'_{\vec{p}} \langle \psi_0 | \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{\vec{p}} | \psi_0 \rangle = 0.$$

Allerdings impliziert dies nicht, daß auch die Zahl der angeregten Teilchen (nicht Quasiteilchen) in diesem Zustand Null ist. Man findet

$$\begin{aligned}
\sum'_{\vec{p}} \langle \psi_0 | \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} | \psi_0 \rangle &= \sum'_{\vec{p}} \langle \psi_0 | u_{\vec{p}}^2 \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{\vec{p}} + v_{\vec{p}}^2 \hat{b}_{\vec{p}} \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger - u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} \left(\hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{-\vec{p}}^\dagger + \hat{b}_{-\vec{p}} \hat{b}_{\vec{p}} \right) | \psi_0 \rangle \\
&= \sum'_{\vec{p}} v_{\vec{p}}^2 \langle \psi_0 | \hat{b}_{\vec{p}} \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger | \psi_0 \rangle = \sum'_{\vec{p}} v_{\vec{p}}^2.
\end{aligned}$$

Für ein Potential der Form

$$V^{(2)}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) = \lambda \delta(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$$

ist

$$\tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) = \lambda.$$

Wir können nun die Zahl der angeregten Teilchen berechnen. Es ist

$$\begin{aligned}
\sum_{\vec{p}}' v_{\vec{p}}^2 &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}}' \frac{\frac{p^2}{2m} + \lambda \frac{N}{V} - \sqrt{\frac{p^2}{2m} \left(\frac{p^2}{2m} + 2\lambda \frac{N}{V} \right)}}{\sqrt{\frac{p^2}{2m} \left(\frac{p^2}{2m} + 2\lambda \frac{N}{V} \right)}} \\
&= \frac{1}{2} \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} 4\pi \int_0^\infty dp p^2 \frac{\frac{p^2}{2m} + \lambda \frac{N}{V} - \sqrt{\frac{p^2}{2m} \left(\frac{p^2}{2m} + 2\lambda \frac{N}{V} \right)}}{\sqrt{\frac{p^2}{2m} \left(\frac{p^2}{2m} + 2\lambda \frac{N}{V} \right)}} \\
&= \frac{1}{2} \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} 4\pi (2m)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty dx x \frac{x^2 + a - x\sqrt{x^2 + 2a}}{\sqrt{x^2 + 2a}} \quad a = \lambda \frac{N}{V} \\
&= \frac{1}{4} \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} 4\pi (2m)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty dy \frac{y + a - \sqrt{y(y + 2a)}}{\sqrt{y + 2a}}.
\end{aligned}$$

Nun ist

$$\int_0^\infty dy \frac{y + a - \sqrt{y(y + 2a)}}{\sqrt{y + 2a}} = \frac{1}{3} (2a)^{\frac{3}{2}}$$

und somit ergibt sich die Zahl N' der angeregten Teilchen zu

$$N' = \sum_{\vec{p}}' v_{\vec{p}}^2 = \frac{V}{3\pi^2\hbar^3} m^{\frac{3}{2}} a^{\frac{3}{2}} = \frac{V}{3\pi^2\hbar^3} m^{\frac{3}{2}} \left(\lambda \frac{N}{V} \right)^{\frac{3}{2}}.$$

Die Anzahl der Teilchen im Zustand $\vec{p} = \vec{0}$ ist dann $N_0 = N - N'$. Im Grenzfall $\lambda \rightarrow 0$ verschwindet die Wechselwirkung und es gilt $N' \rightarrow 0$ und $N_0 \rightarrow N$.

Wir betrachten noch die Eigenschaften der Quasiteilchen für kleine Werte von \vec{p} . Für kleine Werte von \vec{p} ist

$$E_{\vec{p}} = \sqrt{\frac{p^2}{2m} \left(\frac{p^2}{2m} + 2\frac{N}{V} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) \right)} \approx \sqrt{\frac{N}{V} \frac{\tilde{V}_0^{(2)}}{m}} |\vec{p}|.$$

Wir erhalten somit die Dispersionsrelation

$$E_{\vec{p}} = v_{\text{quasi}} |\vec{p}|, \quad v_{\text{quasi}} = \sqrt{\frac{N}{V} \frac{\tilde{V}_0^{(2)}}{m}}.$$

Die Quasiteilchen breiten sich daher mit der Geschwindigkeit v_{quasi} aus. Quasiteilchen mit linearer Dispersionsrelation bezeichnet man als **Phononen**.

3.1.3 Suprafluidität

Wir wollen nun das Phänomen der Suprafluidität diskutieren, d.h. die Eigenschaft bestimmter Flüssigkeiten bei tiefen Temperaturen ohne Reibungsverluste zu strömen. Das Anregungsspektrum von He^4 wird bei tiefen Temperaturen und kleinen Werten für die Impulse der angeregten Moden durch eine lineare Dispersionsrelation beschrieben:

$$E_{\vec{p}} = v_{\text{phonon}} |\vec{p}|.$$

Wir betrachten nun den Fall, daß He^4 bei tiefen Temperaturen durch eine Röhre fließt. Wir können diesen Vorgang in zwei Inertialsystemen betrachten: Im System K (Laborsystem) ruht die Röhre, während das Helium mit Geschwindigkeit $-\vec{v}$ durch die Röhre fließt. Das Vorzeichen der Geschwindigkeit ist hierbei Konvention. Im System K' (Ruhesystem der Flüssigkeit) bewegt sich die Röhre mit Geschwindigkeit $+\vec{v}$. Wir bezeichnen mit E und \vec{P} die Gesamtenergie bzw. den Gesamtimpuls des Helium im System K , und mit E' und \vec{P}' die Gesamtenergie bzw. den Gesamtimpuls des Helium im System K' . Es gilt

$$E = E' - \vec{v} \cdot \vec{P}' + \frac{1}{2} M \vec{v}^2, \quad \vec{P} = \vec{P}' - M \vec{v},$$

wobei M die Gesamtmasse des Heliums bezeichnet. Betrachten wir zunächst die Situation im System K . Reibung wird mikroskopisch durch Stöße der Heliumteilchen mit den Teilchen der Wand beschrieben. Hierbei reduziert sich die (kinetische) Energie des Heliumsystems und es wird Energie auf die Wand übertragen. Für das Heliumsystem gilt daher für eine einzige solche Wechselwirkung

$$\Delta E < 0.$$

Betrachten wir nun die Situation im System K' . Hier ruht das Heliumsystem und wir nehmen zunächst an, daß das Heliumsystem durch den Grundzustand $|\psi_0\rangle$ beschrieben wird, also keine Quasiteilchen angeregt sind. Es ist also

$$E'_i = E'_0, \quad \vec{P}'_i = \vec{0}.$$

Im System K entspricht dies

$$E_i = E'_0 + \frac{1}{2} M \vec{v}^2, \quad \vec{P}_i = -M \vec{v}.$$

Betrachten wir nun Reibungsprozesse im System K' . Im System K' werden durch Reibung im Heliumsystem Quasiteilchen angeregt, die sich mit der Wand mitbewegen, so daß sich im Extremfall das gesamte Helium mit der Wand mitbewegt. Betrachten wir nun einen einzigen Reibungsprozess, bei dem ein Quasiteilchen mit Impuls \vec{p}' angeregt wird. Nach diesem Prozess ist im System K' die Gesamtenergie und der Gesamtimpuls des Heliumsystems gegeben durch

$$E'_f = E'_0 + v_{\text{phonon}} |\vec{p}'|, \quad \vec{P}'_f = \vec{p}'.$$

Dann ist im System K

$$E_f = E_0' + v_{\text{phonon}} |\vec{p}'| - \vec{v} \cdot \vec{p}' + \frac{1}{2} M \vec{v}^2, \quad \vec{P}_f = \vec{p}' - M \vec{v}.$$

Somit ist

$$\Delta E = E_f - E_i = v_{\text{phonon}} |\vec{p}'| - \vec{v} \cdot \vec{p}'.$$

Betrachten wir nun die Fragestellung, wann $\Delta E < 0$ gilt. Die Energiedifferenz ΔE ist am kleinsten für $\vec{v} \parallel \vec{p}'$. Somit

$$\Delta E < 0 \Leftrightarrow |\vec{v}| > v_{\text{phonon}}.$$

Anders ausgedrückt: Für $|\vec{v}| < v_{\text{phonon}}$ ist $\Delta E > 0$ und es treten keine Reibungsverluste auf. Dieses Phänomen bezeichnet man als **Suprafluidität**.

Bemerkung: Wir haben das Auftreten der Suprafluidität für ein idealisiertes System, dessen Anregungsspektrum eine lineare Dispersionsrelation aufweist, diskutiert. Für He^4 treten für größere Werte von \vec{p}' Abweichungen vom linearen Verhalten auf. Dies führt dazu, daß Suprafluidität nur für $|\vec{v}| < v_{\text{crit}}$ auftritt, wobei $v_{\text{crit}} < v_{\text{phonon}}$.

3.2 Fermionen

Wir betrachten ein System von N Fermionen mit Spin $1/2$. Um Verwechslungen mit der Masse m eines Teilchens auszuschließen, notieren wir die Projektion des Spin auf eine Achse mit σ . Für Spin $1/2$ -Fermionen nimmt σ die Werte

$$\sigma \in \left\{ -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\}$$

an. Wir bezeichnen mit $\hat{a}_{\vec{p},\sigma}^\dagger$ und $\hat{a}_{\vec{p},\sigma}$ die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, die ein Fermion mit Impuls \vec{p} und Spinquantenzahl σ erzeugen bzw. vernichten. In einem endlichen Volumen V verwenden wir die Normierung

$$\langle \vec{p}, \sigma | \vec{q}, \tau \rangle = \delta_{\vec{p},\vec{q}} \delta_{\sigma,\tau}.$$

Die Antikommutationsrelationen für die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren lauten

$$\{ \hat{a}_{\vec{p},\sigma}, \hat{a}_{\vec{q},\tau} \} = 0, \quad \{ \hat{a}_{\vec{p},\sigma}^\dagger, \hat{a}_{\vec{q},\tau}^\dagger \} = 0, \quad \{ \hat{a}_{\vec{p},\sigma}, \hat{a}_{\vec{q},\tau}^\dagger \} = \delta_{\vec{p},\vec{q}} \delta_{\sigma,\tau}.$$

Im Ortsraum verwenden wir die Notation

$$\hat{\phi}_\sigma^\dagger(\vec{x}), \quad \hat{\phi}_\sigma(\vec{x})$$

für die Operatoren, die ein Teilchen mit Spinquantenzahl σ am Ort \vec{x} erzeugen bzw. vernichten. Es ist

$$\langle \vec{x}, \sigma | \vec{p}, \tau \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{p} \cdot \vec{x}} \delta_{\sigma,\tau}.$$

3.2.1 Freie Fermionen

Wir betrachten zunächst ein System von N freien Spin 1/2-Fermionen. Im Grundzustand sind die energetisch niedrigsten Zustände besetzt. Da jeder Zustand aufgrund des Pauli-Verbots nur einmal besetzt werden kann, werden nacheinander alle Zustände bis zu einer Impulsobergrenze p_F , die durch die Anzahl der Teilchen N bestimmt ist und **Fermi-Impuls** p_F genannt wird, aufgefüllt. Wir haben also

$$|\psi_0\rangle = \prod_{|\vec{p}| \leq p_F} \prod_{\sigma} \hat{a}_{\vec{p},\sigma}^{\dagger} |0\rangle.$$

Der Erwartungswert des Operators $\hat{a}_{\vec{p},\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\vec{p},\sigma}$ ist

$$N_{\vec{p},\sigma} = \langle \psi_0 | \hat{a}_{\vec{p},\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\vec{p},\sigma} | \psi_0 \rangle = \begin{cases} 1, & |\vec{p}| \leq p_F, \\ 0, & |\vec{p}| > p_F. \end{cases}$$

Für die Gesamtteilchenzahl N erhalten wir somit

$$N = \sum_{\vec{p}} \sum_{\sigma} \langle \psi_0 | \hat{a}_{\vec{p},\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\vec{p},\sigma} | \psi_0 \rangle = 2 \sum_{|\vec{p}| \leq p_F} 1 = \frac{2V}{(2\pi\hbar)^3} \int_{|\vec{p}| \leq p_F} d^3p = \frac{V p_F^3}{3\pi^2 \hbar^3},$$

somit ist der Zusammenhang zwischen Fermi-Impuls und Teilchendichte

$$p_F^3 = 3\pi^2 \hbar^3 \frac{N}{V}.$$

Die **Fermi-Energie** ist durch

$$E_F = \frac{p_F^2}{2m}$$

definiert. Für den Erwartungswert der Teilchendichte im Ortsraum ergibt sich

$$\begin{aligned} n_{\Psi} &= \sum_{\sigma} \langle \psi_0 | \hat{\phi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}) \hat{\phi}_{\sigma}(\vec{x}) | \psi_0 \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\sigma} \sum_{\vec{p}, \vec{q}} e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{q}) \cdot \vec{x}} \langle \psi_0 | \hat{a}_{\vec{p},\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\vec{q},\sigma} | \psi_0 \rangle \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\sigma} \sum_{\vec{p}} \langle \psi_0 | \hat{a}_{\vec{p},\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\vec{p},\sigma} | \psi_0 \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\sigma} \sum_{\vec{p}} N_{\vec{p},\sigma} = \frac{N}{V}. \end{aligned}$$

Der Erwartungswert der Teilchendichte ist also ortsunabhängig.

Wir betrachten noch die **Paarverteilungsfunktion** $g_{\sigma_1, \sigma_2}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$. Diese ist durch

$$\left(\frac{n_{\Psi}}{2}\right)^2 g_{\sigma_1, \sigma_2}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) = \langle \Psi | \hat{\phi}_{\sigma_1}^{\dagger}(\vec{x}_1) \hat{\phi}_{\sigma_2}^{\dagger}(\vec{x}_2) \hat{\phi}_{\sigma_2}(\vec{x}_2) \hat{\phi}_{\sigma_1}(\vec{x}_1) | \Psi \rangle$$

definiert, wobei der zusätzliche Faktor 1/2 die Spinfreiheitsgrade berücksichtigt. Es ist

$$\langle \Psi | \hat{\phi}_{\sigma_1}^{\dagger}(\vec{x}_1) \hat{\phi}_{\sigma_2}^{\dagger}(\vec{x}_2) \hat{\phi}_{\sigma_2}(\vec{x}_2) \hat{\phi}_{\sigma_1}(\vec{x}_1) | \Psi \rangle =$$

$$\frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{q}_1, \vec{q}_2} e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_1 - \vec{q}_1) \cdot \vec{x}_1} e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_2 - \vec{q}_2) \cdot \vec{x}_2} \langle \Psi | \hat{a}_{\vec{p}_1, \sigma_1}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2, \sigma_2}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}_2, \sigma_2} \hat{a}_{\vec{q}_1, \sigma_1} | \Psi \rangle$$

Wir betrachten zunächst den Fall $\sigma_1 \neq \sigma_2$. Um ein nicht-verschwindendes Skalarprodukt zu erhalten muß $\vec{p}_1 = \vec{q}_1$ und $\vec{p}_2 = \vec{q}_2$ sein. Wir haben in diesem Fall

$$\begin{aligned} \left(\frac{n_\Psi}{2}\right)^2 g_{\sigma_1, \sigma_2}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) &= \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}_2} \langle \Psi | \hat{a}_{\vec{p}_1, \sigma_1}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2, \sigma_2}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2, \sigma_2} \hat{a}_{\vec{p}_1, \sigma_1} | \Psi \rangle \\ &= \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}_2} \langle \Psi | \hat{a}_{\vec{p}_2, \sigma_2}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2, \sigma_2} \hat{a}_{\vec{p}_1, \sigma_1}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_1, \sigma_1} | \Psi \rangle. \end{aligned}$$

Wir erinnern uns

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle = N_i |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle.$$

Daher

$$\begin{aligned} \left(\frac{n_\Psi}{2}\right)^2 g_{\sigma_1, \sigma_2}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) &= \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}_2} N_{\vec{p}_1, \sigma_1} N_{\vec{p}_2, \sigma_2} = \frac{1}{V^2} N_{\sigma_1} N_{\sigma_2} \\ &= \frac{1}{V^2} \cdot \frac{N}{2} \cdot \frac{N}{2} = \left(\frac{n_\Psi}{2}\right)^2. \end{aligned}$$

Somit ist für $\sigma_1 \neq \sigma_2$

$$g_{\sigma_1, \sigma_2}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) = 1,$$

und damit unabhängig vom Abstand.

Betrachten wir nun $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma$. Es muß nun entweder $\vec{p}_1 = \vec{q}_1$ und $\vec{p}_2 = \vec{q}_2$ gelten, oder $\vec{p}_1 = \vec{q}_2$ und $\vec{p}_2 = \vec{q}_1$ gelten. Außerdem gilt aufgrund der beiden Vernichtungsoperatoren (bzw. äquivalent hierzu aufgrund der beiden Erzeugungsoperatoren) automatisch $\vec{p}_1 \neq \vec{p}_2$. Wir finden

$$\begin{aligned} \left(\frac{n_\Psi}{2}\right)^2 g_{\sigma, \sigma}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) &= \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}_2} \langle \Psi | \hat{a}_{\vec{p}_1, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2, \sigma} \hat{a}_{\vec{p}_1, \sigma} | \Psi \rangle \\ &\quad + \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}_2} e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)} \langle \Psi | \hat{a}_{\vec{p}_1, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_1, \sigma} \hat{a}_{\vec{p}_2, \sigma} | \Psi \rangle \\ &= \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}_2} \left(1 - e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)}\right) \langle \Psi | \hat{a}_{\vec{p}_2, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2, \sigma} \hat{a}_{\vec{p}_1, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_1, \sigma} | \Psi \rangle \\ &= \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}_2} \left(1 - e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)}\right) N_{\vec{p}_1, \sigma} N_{\vec{p}_2, \sigma} \\ &= \left(\frac{n_\Psi}{2}\right)^2 - \left| \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)} N_{\vec{p}, \sigma} \right|^2. \end{aligned}$$

Wir berechnen den zweiten Term, indem wir die Summation durch eine Integration ersetzen:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)} N_{\vec{p}, \sigma} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)} N_{\vec{p}, \sigma} \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)} \theta(p_F - |\vec{p}|) \\
&= \frac{2\pi}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{p_F} dp \int_{-1}^1 du p^2 e^{-\frac{i}{\hbar} p |\vec{x}_1 - \vec{x}_2| u} \\
&= \frac{2}{(2\pi\hbar)^2 |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} \int_0^{p_F} dp p \frac{1}{2i} \left[e^{\frac{i}{\hbar} p |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} - e^{-\frac{i}{\hbar} p |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} \right] \\
&= \frac{2}{(2\pi\hbar)^2 |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} \int_0^{p_F} dp p \sin\left(\frac{p |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}{\hbar}\right) \\
&= \frac{1}{2\pi^2 |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|^3} \left[\sin\left(\frac{p_F |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}{\hbar}\right) - \frac{p_F |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}{\hbar} \cos\left(\frac{p_F |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}{\hbar}\right) \right] \\
&= \frac{3n_{\Psi}}{2} \cdot \frac{\sin\left(\frac{p_F |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}{\hbar}\right) - \frac{p_F |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}{\hbar} \cos\left(\frac{p_F |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}{\hbar}\right)}{\left(\frac{p_F |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}{\hbar}\right)^3}.
\end{aligned}$$

Somit

$$g_{\sigma, \sigma}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) = 1 - 9 \left[\frac{\sin(\alpha) - \alpha \cos(\alpha)}{\alpha^3} \right]^2$$

mit

$$\alpha = \frac{p_F |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}{\hbar}.$$

Für kleine Werte α ist

$$\sin(\alpha) - \alpha \cos(\alpha) = \frac{1}{3} \alpha^3 + O(\alpha^5),$$

und daher

$$\lim_{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2| \rightarrow 0} g_{\sigma, \sigma}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) = 0.$$

Für große Werte α gilt dagegen

$$\lim_{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2| \rightarrow \infty} g_{\sigma, \sigma}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) = 1.$$

3.2.2 Wechselwirkende Fermionen

Wir betrachten nun ein Elektronengas, welches mittels der Coulombabstoßung wechselwirkt. Für das Coulombpotential

$$V^{(2)}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) = \frac{e^2}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}$$

lautet die Fouriertransformierte

$$\tilde{V}^{(2)}(\vec{p}) = \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{\vec{p}^2}.$$

Wir betrachten den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \sum_{\vec{p}, \sigma} \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\vec{p}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}, \sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{q}_1, \vec{q}_2, \sigma_1, \sigma_2 \\ \vec{p}_1 - \vec{q}_1 \neq \vec{0}}} \delta_{\vec{p}_1 + \vec{p}_2, \vec{q}_1 + \vec{q}_2} \tilde{V}^{(2)}(\vec{p}_1 - \vec{q}_1) \hat{a}_{\vec{p}_1, \sigma_1}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2, \sigma_2}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}_2, \sigma_2} \hat{a}_{\vec{q}_1, \sigma_1},$$

wobei wir $\vec{p}_1 - \vec{q}_1 = \vec{0}$ in der Summe ausschließen. Das Coulombpotential $\tilde{V}^{(2)}(\vec{p})$ divergiert für $\vec{p} = \vec{0}$. Man bezeichnet die Singularität bei $\vec{p} = \vec{0}$ als eine **Infrarotsingularität**. Die Vorschrift, den Term $\vec{p}_1 - \vec{q}_1 = \vec{0}$ in der Summe nicht zu berücksichtigen stellt ein **Regularisierungsschema** dar. Ein Regularisierungsschema ist notwendig, um mit wohldefinierten endlichen Ausdrücken arbeiten zu können. Würden wir auch noch Feldoperatoren für das Photonfeld einführen, so läßt sich zeigen, daß sich in physikalischen Observablen alle Infrarotdivergenzen wegheben. In der Ortsdarstellung schreiben wir für den obigen Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \sum_r \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r \right) + \frac{1}{2} \sum_{r \neq s} \hat{V}(\vec{x}_r, \vec{x}_s).$$

Eine wichtige Frage in einem wechselwirkenden System ist die Frage nach der Grundzustandsenergie und der Grundzustandswellenfunktion. Hierbei verwendet man oft die **Hartree-Fock-Näherung**. Im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung nimmt man an, daß der Grundzustand des wechselwirkenden N -Teilchensystems durch eine Slater-Determinante von N (zunächst unbekannt) Einteilchenwellenfunktionen $\varphi_i(j)$ beschrieben wird.

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(1) & \dots & \varphi_1(N) \\ \dots & \dots & \dots \\ \varphi_N(1) & \dots & \varphi_N(N) \end{vmatrix}.$$

Wir bezeichnen mit E_0 die Grundzustandsenergie. Für einen beliebigen Zustand $|\psi\rangle$ gilt

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \geq E_0.$$

Der Erwartungswert des Hamiltonoperators für einen beliebigen Zustand gibt eine obere Schranke für die Grundzustandsenergie an.

Betrachten wir zunächst den Zustand, der durch die Slater-Determinante von Einteilchenwellenfunktionen des freien Systems gegeben ist, wobei alle Zustände mit $|\vec{p}| \leq p_F$ besetzt sind und Zustände mit $|\vec{p}| > p_F$ unbesetzt sind:

$$|\psi\rangle = \prod_{|\vec{p}| \leq p_F} \prod_{\sigma} \hat{a}_{\vec{p},\sigma}^{\dagger} |0\rangle.$$

Für die kinetische Energie dieses Zustandes gilt

$$\begin{aligned} E_{\text{kin}} &= \langle \psi | \hat{H}_{\text{kin}} | \psi \rangle = \sum_{\vec{p},\sigma} \frac{p^2}{2m} \langle 0 | \hat{a}_{\vec{p},\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\vec{p},\sigma} | 0 \rangle \theta(p_F - |\vec{p}|) \\ &= \sum_{\vec{p},\sigma} \frac{p^2}{2m} \theta(p_F - |\vec{p}|) = 2 \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int_{|\vec{p}| \leq p_F} d^3p \frac{p^2}{2m} = \frac{4\pi V}{m(2\pi\hbar)^3} \int_0^{p_F} dp p^4 \\ &= \frac{4\pi V p_F^5}{5m(2\pi\hbar)^3} = \frac{3}{5} E_F N. \end{aligned}$$

Betrachten wir nun die potentielle Energie des Zustandes $|\psi_0\rangle$. Es ist

$$\begin{aligned} E_{\text{pot}} &= \langle \psi | \hat{H}_{\text{pot}} | \psi \rangle \\ &= \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{2V} \sum_{\substack{\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{q}_1, \vec{q}_2, \sigma_1, \sigma_2 \\ \vec{p}_1 - \vec{q}_1 \neq \vec{0}}} \frac{\delta_{\vec{p}_1 + \vec{p}_2, \vec{q}_1 + \vec{q}_2}}{(\vec{p}_1 - \vec{q}_1)^2} \langle \psi | \hat{a}_{\vec{p}_1, \sigma_1}^{\dagger} \hat{a}_{\vec{p}_2, \sigma_2}^{\dagger} \hat{a}_{\vec{q}_2, \sigma_2} \hat{a}_{\vec{q}_1, \sigma_1} | \psi \rangle. \end{aligned}$$

Aufgrund von $\vec{p}_1 - \vec{q}_1 \neq \vec{0}$ erhalten wir ein nicht-verschwindendes Skalarprodukt nur für $\vec{p}_1 = \vec{q}_2$, $\vec{p}_2 = \vec{q}_1$ und $\sigma_1 = \sigma_2$.

$$\begin{aligned} E_{\text{pot}} &= \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{2V} \sum_{\vec{p}_1 \neq \vec{p}_2, \sigma} \frac{1}{(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)^2} \langle \psi | \hat{a}_{\vec{p}_1, \sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\vec{p}_2, \sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\vec{p}_1, \sigma} \hat{a}_{\vec{p}_2, \sigma} | \psi \rangle \\ &= -\frac{4\pi e^2 \hbar^2}{V} \sum_{\vec{p}_1 \neq \vec{p}_2} \frac{1}{(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)^2} \theta(p_F - |\vec{p}_1|) \theta(p_F - |\vec{p}_2|) \\ &= -\frac{4\pi e^2 \hbar^2}{V} \frac{V^2}{(2\pi\hbar)^6} \int d^3p_1 \int d^3p_2 \frac{\theta(p_F - |\vec{p}_1|) \theta(p_F - |\vec{p}_2|)}{(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)^2}. \end{aligned}$$

Es ist

$$\int d^3p_2 \frac{\theta(p_F - |\vec{p}_2|)}{(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)^2} = 4\pi p_F F\left(\frac{|\vec{p}_1|}{p_F}\right),$$

mit

$$F(x) = \frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right|.$$

Somit

$$\begin{aligned}
 E_{\text{pot}} &= -\frac{e^2 V p_F}{4\pi^4 \hbar^4} \int_{|\vec{p}_1| \leq p_F} d^3 p_1 F\left(\frac{|\vec{p}_1|}{p_F}\right) \\
 &= -\frac{e^2 V p_F^4}{\pi^3 \hbar^4} \int_0^1 dx x^2 F(x) = -\frac{e^2 V p_F^4}{4\pi^3 \hbar^4} = -\frac{3e^2 p_F}{4\pi \hbar} N.
 \end{aligned}$$

Insgesamt ergibt sich für die Energie

$$E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = \frac{3}{5} E_F N - \frac{3e^2 p_F}{4\pi \hbar} N.$$

Diese Energie ist eine obere Schranke für die Grundzustandsenergie E_0 des wechselwirkenden Systems:

$$E_0 \leq E.$$

Im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung betrachtet man nun Variationen der Einteilchenwellenfunktionen $\varphi_i(\vec{x}_j)$, so daß E minimiert wird. Der N -Teilchenzustand ist im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung weiterhin durch eine Slater-Determinante von N Einteilchenwellenfunktionen gegeben. Bei der Variation der Einteilchenwellenfunktionen $\varphi_i(\vec{x}_j)$ ist zu beachten, daß die Einteilchenwellenfunktionen $\varphi_i(\vec{x}_j)$ auf Eins normiert bleiben sollen:

$$\int d^3 x |\varphi_i(\vec{x})|^2 = 1.$$

Es handelt sich daher um ein Minimierungsproblem mit Nebenbedingungen. Für die Nebenbedingungen führen wir Lagrangeparameter E_i ein und betrachten das Funktional

$$E[\varphi_1^*, \dots, \varphi_N^*, \varphi_1, \dots, \varphi_N] = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle - \sum_{i=1}^N E_i \left(\int d^3 x \varphi_i^*(\vec{x}) \varphi_i(\vec{x}) - 1 \right).$$

Der Zustand $|\Psi\rangle$ ist hierbei durch eine Slater-Determinante gegeben. Für Slater-Determinanten ist die folgende Formel hilfreich (für eine bessere Übersicht lassen wir die Spinsummation implizit):

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle &= \frac{1}{N!} \int d^3 x_1 \dots d^3 x_N \begin{vmatrix} \varphi_1^*(\vec{x}_1) & \dots & \varphi_1^*(\vec{x}_N) \\ \dots & \dots & \dots \\ \varphi_N^*(\vec{x}_1) & \dots & \varphi_N^*(\vec{x}_N) \end{vmatrix} \hat{H} \begin{vmatrix} \varphi_1(\vec{x}_1) & \dots & \varphi_1(\vec{x}_N) \\ \dots & \dots & \dots \\ \varphi_N(\vec{x}_1) & \dots & \varphi_N(\vec{x}_N) \end{vmatrix} \\
 &= \int d^3 x_1 \dots d^3 x_N \varphi_1^*(\vec{x}_1) \dots \varphi_N^*(\vec{x}_N) \hat{H} \begin{vmatrix} \varphi_1(\vec{x}_1) & \dots & \varphi_1(\vec{x}_N) \\ \dots & \dots & \dots \\ \varphi_N(\vec{x}_1) & \dots & \varphi_N(\vec{x}_N) \end{vmatrix}.
 \end{aligned}$$

Diese Formel ergibt sich durch Entwickeln der ersten Determinante und Umbenennen der Integrationsvariablen. Es ist somit

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle &= \sum_{i=1}^N \int d^3x \varphi_i^*(\vec{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \varphi_i(\vec{x}) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \int d^3x \int d^3y \varphi_i^*(\vec{x}) \varphi_j^*(\vec{y}) \hat{V}(\vec{x}, \vec{y}) [\varphi_i(\vec{x}) \varphi_j(\vec{y}) - \varphi_j(\vec{x}) \varphi_i(\vec{y})]. \end{aligned}$$

Wir suchen einen Zustand, der die Energie minimiert. Es muß also gelten

$$\frac{\delta E [\varphi_1^*, \dots, \varphi_N^*, \varphi_1, \dots, \varphi_N]}{\delta \varphi_i^*(\vec{x})} = 0.$$

Führen wir die Funktionalableitungen aus, so erhalten wir

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \varphi_i(\vec{x}) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \int d^3y \varphi_j^*(\vec{y}) \hat{V}(\vec{x}, \vec{y}) [\varphi_i(\vec{x}) \varphi_j(\vec{y}) - \varphi_j(\vec{x}) \varphi_i(\vec{y})] - E_i \varphi_i(\vec{x}) = 0.$$

Diese Gleichungen bezeichnet man als **Hartree-Fock-Gleichungen**. Sie bilden ein gekoppeltes System von N Gleichungen für N Einteilchenwellenfunktionen und N Lagrangeparameter E_i . Verschwindet der Wechselwirkungsterm, so sieht man sofort, daß die Lagrangeparameter E_i den Energieeigenwerten der freien Einteilchenwellenfunktionen $\varphi_i(\vec{x})$ entsprechen.

3.2.3 Supraleitung

Wir wollen nun noch die Grundzüge der Supraleitung betrachten. Die Theorie der Supraleitung wurde 1957 von J. Bardeen, L. Cooper und J. Schrieffer aufgestellt und ist seitdem unter der Abkürzung BCS-Theorie bekannt.

In der supraleitenden Phase fließen Elektronen widerstandsfrei in einem Leiter. Wir wollen dieses Phänomen nun quantenmechanisch erklären. Die wesentlichen Punkte der Argumentation sind wie folgt:

- Die effektive Wechselwirkung zwischen Elektronen in einem Metall ist anziehend.
- Der Grundzustand besteht aus Cooper-Paaren.
- Angeregte Zustände des Elektronensystems weisen eine Energielücke zum Grundzustand auf.

Wir betrachten ein Metall, daß bei tiefen Temperaturen supraleitend wird. In einem Metall sind die (Valenz-) Elektronen frei beweglich. Die Atomrümpfe bilden ein Gitter. In diesem Gitter können Gitterschwingungen auftreten. Diese bezeichnet man als Phononen. Wir betrachten nun die Wechselwirkung der Elektronen untereinander. Hier ist zunächst die Coulombwechselwirkung zu nennen. Diese ist für zwei Elektronen abstoßend. Der Hamiltonoperator, der diese Wechselwirkung beschreibt ist gegeben durch

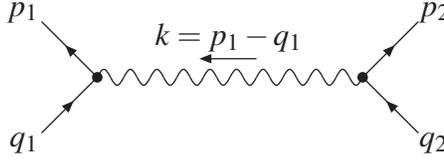
$$\hat{H}_{\text{Coulomb}} = \frac{1}{2V} \sum_{\substack{\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{q}_1, \vec{q}_2, \sigma_1, \sigma_2 \\ \vec{p}_1 - \vec{q}_1 \neq 0}} \delta_{\vec{p}_1 + \vec{p}_2, \vec{q}_1 + \vec{q}_2} \tilde{V}_{\text{Coulomb}}^{(2)}(\vec{p}_1 - \vec{q}_1) \hat{a}_{\vec{p}_1, \sigma_1}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2, \sigma_2}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}_2, \sigma_2} \hat{a}_{\vec{q}_1, \sigma_1},$$

mit

$$\tilde{V}_{\text{Coulomb}}^{(2)}(\vec{p}) = \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{\vec{p}^2}.$$

Wir können diese Wechselwirkung durch den Austausch eines Photons beschreiben.

Nun befinden sich die Elektronen nicht im Vakuum, sondern in einem Metallgitter. Die elektromagnetische Wechselwirkung zwischen Elektronen und Atomrümpfen läßt sich durch eine effektive Elektron-Phonon-Wechselwirkung beschreiben. Wechselwirkt nun ein Elektron mit einem Phonon, so kann dieses Phonon wieder mit einem anderen Elektron wechselwirken. Dies führt zu einer effektiven Elektron-Elektron-Wechselwirkung, die durch einen Phonon-Austausch beschrieben werden kann. Wir werden diese effektive Wechselwirkung später herleiten, hier geben wir nur das Ergebnis an. Für die Kinematik verwenden wir die folgende Notation:



Wir bezeichnen mit $E_{\vec{p}}^e$ die kinetische Energie eines Elektrons relativ zur Fermi-Energie:

$$E_{\vec{p}}^e = \frac{p^2}{2m} - E_F,$$

und mit $E_{\vec{p}}^{\text{phonon}}$ die Energie eines Phonons mit Impuls \vec{p} . Weiter bezeichnen wir mit

$$g_{\vec{q},\vec{k}}$$

die Kopplung eines einlaufenden Elektrons mit Impuls \vec{q} an ein einlaufendes Phonon mit Impuls \vec{k} . Das auslaufende Elektron hat dann Impuls $\vec{q} + \vec{k}$. Für die effektive Wechselwirkung ergibt sich

$$\hat{H}_{\text{Phonon}} = \frac{1}{2V} \sum_{\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{q}_1, \vec{q}_2, \sigma_1, \sigma_2} \delta_{\vec{p}_1 + \vec{p}_2, \vec{q}_1 + \vec{q}_2} \tilde{V}_{\text{Phonon}}^{(2)} \hat{a}_{\vec{p}_1, \sigma_1}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2, \sigma_2}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}_2, \sigma_2} \hat{a}_{\vec{q}_1, \sigma_1},$$

mit

$$\tilde{V}_{\text{Phonon}}^{(2)} = 2g_{\vec{q}_1, \vec{k}} g_{\vec{q}_2, -\vec{k}} \frac{E_{\vec{k}}^{\text{phonon}}}{\left(E_{\vec{p}_1}^e - E_{\vec{q}_1}^e\right)^2 - \left(E_{\vec{k}}^{\text{phonon}}\right)^2}$$

und $\vec{k} = \vec{p}_1 - \vec{q}_1$. Für $\vec{q}_2 = -\vec{q}_1$ folgt aus der Impulserhaltung $\vec{p}_2 = -\vec{p}_1$. Für die Kopplung $g_{\vec{q},\vec{k}}$ läßt sich zeigen

$$g_{-\vec{q}, -\vec{k}} = g_{\vec{q}, \vec{k}}^*$$

somit ergibt sich für $\vec{q}_2 = -\vec{q}_1$

$$\tilde{V}_{\text{Phonon}}^{(2)} = 2 \left| g_{\vec{q}_1, \vec{k}} \right|^2 \frac{E_{\vec{k}}^{\text{phonon}}}{\left(E_{\vec{p}_1}^e - E_{\vec{q}_1}^e \right)^2 - \left(E_{\vec{k}}^{\text{phonon}} \right)^2}.$$

Für $(E_{\vec{p}_1}^e - E_{\vec{q}_1}^e)^2 < E_{\vec{k}}^{\text{phonon}}$ ist $\tilde{V}_{\text{Phonon}}^{(2)} < 0$, und beschreibt somit eine attraktive Wechselwirkung. Weiter läßt sich zeigen, daß die Phonon-Wechselwirkung in diesem Bereich gegenüber der Photon-Wechselwirkung dominiert, so daß sich insgesamt eine effektive anziehende Wechselwirkung zwischen den Elektronen ergibt. Im weiteren bezeichnen wir mit

$$\tilde{V}_{\text{eff}}^{(2)} = \tilde{V}_{\text{Coulomb}}^{(2)} + \tilde{V}_{\text{Phonon}}^{(2)}$$

das effektive Potential.

Wir betrachten nun die Implikationen einer attraktiven Wechselwirkung zwischen den Elektronen. Hierzu diskutieren wir die folgende vereinfachte Situation: wir greifen uns zwei Elektronen heraus und betrachten die Wechselwirkung zwischen diesen beiden Elektronen. Wir vernachlässigen die Wechselwirkung mit allen übrigen Elektronen, berücksichtigen aber, daß die übrigen Elektronen alle Zustände bis zum Fermi-Impuls p_F besetzen, so daß für die beiden Elektronen nur Zustände mit

$$|\vec{p}| > p_F$$

erlaubt sind. Die Schrödingergleichung für das Zwei-Elektronensystem lautet

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta_1 + \Delta_2) + V_{\text{eff}}^{(2)}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \right] \Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = (E + 2E_F) \Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2),$$

wobei E die Energie des Zwei-Elektronensystems relativ zur Fermi-Energie E_F angibt. Der Spin der Elektronen ist für die folgende Diskussion nicht relevant und wird vernachlässigt. Im Schwerpunktsystem der beiden Elektronen hängt die Wellenfunktion nur von der Relativkoordinate $(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$ ab und hat daher eine Fourierdarstellung

$$\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\vec{p} \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)} \tilde{\Psi}(\vec{p}).$$

Aufgrund des Pauli-Verbots gilt

$$\tilde{\Psi}(\vec{p}) = 0 \quad \text{für } |\vec{p}| \leq p_F.$$

Aus der Schrödingergleichung ergibt sich

$$\frac{p^2}{m} \tilde{\Psi}(\vec{p}) + \int \frac{d^3 q}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{V}_{\text{eff}}^{(2)}(\vec{p} - \vec{q}) \tilde{\Psi}(\vec{q}) = (E + 2E_F) \tilde{\Psi}(\vec{p}).$$

Lösungen der Schrödingergleichung mit $E > 0$ bezeichnet man als Streuzustände, Lösungen mit $E < 0$ als gebundene Zustände. Wir interessieren uns für die Frage, ob gebundene Zustände existieren. Diese wären energetisch günstiger als die möglichen Zustände in einer freien Theorie. Zur Diskussion dieser Frage betrachten wir die folgende Vereinfachung: Wir ersetzen $\tilde{V}_{\text{eff}}^{(2)}(\vec{p}-\vec{q})$ durch eine Funktion $\tilde{V}_{\text{eff}}^{(2)}(\vec{p},\vec{q})$ und nehmen an

$$\tilde{V}_{\text{eff}}^{(2)}(\vec{p},\vec{q}) = \begin{cases} -\tilde{V}_0^{(2)}, & E_F < \frac{p^2}{2m} < E_F + \Delta E \quad \text{und} \quad E_F < \frac{q^2}{2m} < E_F + \Delta E, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Somit

$$\left(\frac{p^2}{m} - E - 2E_F\right) \tilde{\Psi}(\vec{p}) = \tilde{V}_0^{(2)} \int \frac{d^3q}{(2\pi\hbar)^3} \theta\left(\frac{q^2}{2m} - E_F\right) \theta\left(E_F + \Delta E - \frac{q^2}{2m}\right) \tilde{\Psi}(\vec{q}).$$

Die rechte Seite ist von \vec{p} unabhängig. Wir bezeichnen den Ausdruck auf der rechten Seite mit

$$C = \tilde{V}_0^{(2)} \int \frac{d^3q}{(2\pi\hbar)^3} \theta\left(\frac{q^2}{2m} - E_F\right) \theta\left(E_F + \Delta E - \frac{q^2}{2m}\right) \tilde{\Psi}(\vec{q}).$$

Somit

$$\tilde{\Psi}(\vec{p}) = \frac{C}{\frac{p^2}{m} - E - 2E_F}$$

und

$$C = \tilde{V}_0^{(2)} \int \frac{d^3q}{(2\pi\hbar)^3} \theta\left(\frac{q^2}{2m} - E_F\right) \theta\left(E_F + \Delta E - \frac{q^2}{2m}\right) \frac{C}{\frac{q^2}{m} - E - 2E_F}$$

bzw.

$$1 = \tilde{V}_0^{(2)} \int \frac{d^3q}{(2\pi\hbar)^3} \theta\left(\frac{q^2}{2m} - E_F\right) \theta\left(E_F + \Delta E - \frac{q^2}{2m}\right) \frac{1}{\frac{q^2}{m} - E - 2E_F}.$$

Gebundene Zustände existieren, falls diese Gleichung eine Lösung für $E < 0$ hat. Wir können das Integral auf der rechten Seite ausführen und erhalten

$$\begin{aligned} & \tilde{V}_0^{(2)} \int \frac{d^3q}{(2\pi\hbar)^3} \theta\left(\frac{q^2}{2m} - E_F\right) \theta\left(E_F + \Delta E - \frac{q^2}{2m}\right) \frac{1}{\frac{q^2}{m} - E - 2E_F} = \\ & = \frac{4\pi\tilde{V}_0^{(2)}}{(2\pi\hbar)^3} \int dq q^2 \theta\left(\frac{q^2}{2m} - E_F\right) \theta\left(E_F + \Delta E - \frac{q^2}{2m}\right) \frac{1}{\frac{q^2}{m} - E - 2E_F} \\ & = \frac{4\pi\sqrt{2}m^{\frac{3}{2}}\tilde{V}_0^{(2)}}{(2\pi\hbar)^3} \int_{E_F}^{E_F+\Delta E} dE_q \frac{\sqrt{E_q}}{2E_q - E - 2E_F}. \end{aligned}$$

Wir interessieren uns für die Region $\Delta E \ll E_F$. In diesem Bereich können wir den Zähler $\sqrt{E_q}$ durch $\sqrt{E_F}$ approximieren. Wir erhalten somit

$$1 = \frac{\sqrt{2}m^{\frac{3}{2}}\tilde{V}_0^{(2)}\sqrt{E_F}}{2\pi^2\hbar^3} \ln\left(\frac{2\Delta E - E}{-E}\right)$$

Wir erinnern uns an den Zusammenhang zwischen Gesamtteilchenzahl und Fermi-Energie:

$$\frac{N}{V} = \frac{2\sqrt{2}m^{\frac{3}{2}}E_F^{\frac{3}{2}}}{3\pi^2\hbar^3}.$$

Hieraus ergibt sich die Dichte der Zustände pro Energieeinheitsintervall an der Fermi-Kante zu

$$\rho(E_F) = \frac{dN}{dE_F V} = \frac{\sqrt{2}m^{\frac{3}{2}}\sqrt{E_F}}{\pi^2\hbar^3}.$$

Unsere Formel vereinfacht sich somit zu

$$1 = \frac{\rho(E_F)\tilde{V}_0^{(2)}}{2} \ln\left(\frac{2\Delta E - E}{-E}\right).$$

Auflösen nach E liefert

$$E = -2\Delta E \frac{e^{-\frac{2}{\rho(E_F)\tilde{V}_0^{(2)}}}}{1 - e^{-\frac{2}{\rho(E_F)\tilde{V}_0^{(2)}}}}.$$

Für $\rho(E_F)\tilde{V}_0^{(2)} \ll 1$ erhalten wir somit

$$E = -2\Delta E e^{-\frac{2}{\rho(E_F)\tilde{V}_0^{(2)}}}.$$

Wir sehen also, daß ein gebundener Zustand existiert. Bemerkenswert ist, daß ein gebunder Zustand selbst für ein infinitesimal kleines attraktives Potential $\tilde{V}_0^{(2)}$ besteht. Betrachtet man reine Zweikörperprobleme in der Quantenmechanik, so bilden sich üblicherweise gebundene Zustände nur, falls die Tiefe des attraktiven Potential eine bestimmte Schwelle übersteigt. Wir bezeichnen den gebundend Zustand der beiden Elektronen als ein **Cooper-Paar**.

In der obigen Diskussion haben wir den Spin der beiden Elektronen vernachlässigt. Aus der Lösung für die Wellenfunktion folgt $\tilde{\Psi}(-\vec{p}) = \tilde{\Psi}(\vec{p})$, somit ist die Wellenfunktion $\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ symmetrisch unter der Vertauschung $1 \leftrightarrow 2$. Dies impliziert, daß die Spinwellenfunktion antisymmetrisch unter der Vertauschung $1 \leftrightarrow 2$ sein muß. Die beiden Elektronen haben somit entgegengesetzten Spin.

Ein Cooper-Paar wird somit von dem Operator

$$\hat{a}_{\vec{p},\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{p},\downarrow}^\dagger$$

erzeugt und von dem Operator

$$\hat{a}_{-\vec{p},\downarrow}\hat{a}_{\vec{p},\uparrow}$$

vernichtet. Bardeen, Cooper und Schrieffer schlugen vor, daß der Grundzustand aus Cooper-Paaren besteht. Sie verwendeten den Ansatz

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{\vec{p}} \left(u_{\vec{p}} + v_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p},\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{p},\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle,$$

mit der Nebenbedingung

$$|u_{\vec{p}}|^2 + |v_{\vec{p}}|^2 = 1.$$

Die Nebenbedingung stellt sicher, daß die Wellenfunktion auf Eins normiert ist

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle &= \prod_{\vec{p}, \vec{p}'} \left\langle 0 \left| \left(u_{\vec{p}}^* + v_{\vec{p}}^* \hat{a}_{-\vec{p},\downarrow} \hat{a}_{\vec{p},\uparrow} \right) \left(u_{\vec{p}'} + v_{\vec{p}'} \hat{a}_{\vec{p}',\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{p}',\downarrow}^\dagger \right) \right| 0 \right\rangle \\ &= \prod_{\vec{p}, \vec{p}'} u_{\vec{p}}^* u_{\vec{p}'} + \prod_{\vec{p}} |v_{\vec{p}}|^2 = \prod_{\vec{p}} \left(|u_{\vec{p}}|^2 + |v_{\vec{p}}|^2 \right) = 1. \end{aligned}$$

Es ist

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | \hat{a}_{-\vec{p},\downarrow} \hat{a}_{\vec{p},\uparrow} | \Psi_0 \rangle &= \prod_{\vec{q}, \vec{q}'} \left\langle 0 \left| \left(u_{\vec{q}}^* + v_{\vec{q}}^* \hat{a}_{-\vec{q},\downarrow} \hat{a}_{\vec{q},\uparrow} \right) \hat{a}_{-\vec{p},\downarrow} \hat{a}_{\vec{p},\uparrow} \left(u_{\vec{q}'} + v_{\vec{q}'} \hat{a}_{\vec{q}',\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{q}',\downarrow}^\dagger \right) \right| 0 \right\rangle \\ &= u_{\vec{p}}^* v_{\vec{p}} \prod_{\vec{q} \neq \vec{p}, \vec{q}' \neq \vec{p}} \left\langle 0 \left| \left(u_{\vec{q}}^* + v_{\vec{q}}^* \hat{a}_{-\vec{q},\downarrow} \hat{a}_{\vec{q},\uparrow} \right) \left(u_{\vec{q}'} + v_{\vec{q}'} \hat{a}_{\vec{q}',\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{q}',\downarrow}^\dagger \right) \right| 0 \right\rangle \\ &= u_{\vec{p}}^* v_{\vec{p}}, \\ \langle \Psi_0 | \hat{a}_{\vec{p},\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{p},\downarrow}^\dagger | \Psi_0 \rangle &= v_{\vec{p}}^* u_{\vec{p}} = \left(u_{\vec{p}}^* v_{\vec{p}} \right)^*. \end{aligned}$$

Wir betrachten nun den folgenden effektiven Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{p}, \sigma} E_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}, \sigma} + \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}, \vec{q}} \tilde{V}_{\text{eff}}^{(2)}(\vec{p}, \vec{q}) \hat{a}_{\vec{p}, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{p}, \downarrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{q}, \downarrow} \hat{a}_{\vec{q}, \uparrow},$$

wobei $E_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2m} - E_F$. Hierbei haben wir angenommen, daß die Wechselwirkung zwischen Cooper-Paaren erfolgt, d.h zwischen Paaren von Elektronen mit Impuls \vec{p} und $(-\vec{p})$ und entgegengesetzten Spin. Der Wechselwirkungsterm besteht aus einem Produkt von vier fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Dieses Produkt kann ebenfalls als ein Produkt aus einen Erzeugungsoperator und einen Vernichtungsoperator für ein Cooper-Paar betrachtet werden. Wir betrachten nun die “**Mean-field**”- Näherung für ein Produkt von zwei Operatoren. Seien \hat{A} und \hat{B} zwei Operatoren und $\langle \hat{A} \rangle$ und $\langle \hat{B} \rangle$ zwei komplexe Zahlen, die die Wirkung der Operatoren auf den Zustand $|\Psi_0\rangle$ annähernd beschreiben

$$\hat{A}|\Psi_0\rangle \approx \langle \hat{A} \rangle |\Psi_0\rangle, \quad \hat{B}|\Psi_0\rangle \approx \langle \hat{B} \rangle |\Psi_0\rangle,$$

Es ist

$$\begin{aligned}\hat{A}\hat{B} &= [\langle\hat{A}\rangle + (\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)] [\langle\hat{B}\rangle + (\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle)] \\ &= \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle + \langle\hat{A}\rangle(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle) + (\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)\langle\hat{B}\rangle + (\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle).\end{aligned}$$

Diese Gleichung ist noch exakt. In der ‘‘Mean-Field’’-Naherung vernachlassigt man nun den vierten Term. Man erhalt.

$$\begin{aligned}\hat{A}\hat{B} &\approx \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle + \langle\hat{A}\rangle(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle) + (\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)\langle\hat{B}\rangle \\ &= \langle\hat{A}\rangle\hat{B} + \langle\hat{B}\rangle\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle.\end{aligned}$$

Wir wenden dies nun auf

$$\hat{A} = \sum_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p},\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{p},\downarrow}^\dagger, \quad \hat{B} = \sum_{\vec{q}} \hat{a}_{-\vec{q},\downarrow} \hat{a}_{\vec{q},\uparrow}$$

an. Es ist

$$\begin{aligned}\langle\hat{A}\rangle &= \sum_{\vec{p}} \langle\Psi_0 | \hat{a}_{\vec{p},\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{p},\downarrow}^\dagger | \Psi_0 \rangle = \sum_{\vec{p}} v_{\vec{p}}^* u_{\vec{p}} = \left(\sum_{\vec{p}} u_{\vec{p}}^* v_{\vec{p}} \right)^*, \\ \langle\hat{B}\rangle &= \sum_{\vec{p}} \langle\Psi_0 | \hat{a}_{-\vec{p},\downarrow} \hat{a}_{\vec{p},\uparrow} | \Psi_0 \rangle = \sum_{\vec{p}} u_{\vec{p}}^* v_{\vec{p}}.\end{aligned}$$

Wir erhalten

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{\vec{p},\sigma} E_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{p},\sigma} + \frac{1}{V} \sum_{\vec{p},\vec{q}} \tilde{V}_{\text{eff}}^{(2)}(\vec{p},\vec{q}) \left(u_{\vec{p}}^* v_{\vec{p}} \right)^* \hat{a}_{-\vec{q},\downarrow} \hat{a}_{\vec{q},\uparrow} + \frac{1}{V} \sum_{\vec{p},\vec{q}} \tilde{V}_{\text{eff}}^{(2)}(\vec{p},\vec{q}) \left(u_{\vec{q}}^* v_{\vec{q}} \right) \hat{a}_{\vec{p},\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{p},\downarrow}^\dagger \\ &\quad - \frac{1}{V} \sum_{\vec{p},\vec{q}} \tilde{V}_{\text{eff}}^{(2)}(\vec{p},\vec{q}) \left(u_{\vec{p}}^* v_{\vec{p}} \right)^* \left(u_{\vec{q}}^* v_{\vec{q}} \right).\end{aligned}$$

Der letzte Term ist eine Konstante. Wir setzen nun

$$\Delta_{\vec{p}} = -\frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \tilde{V}_{\text{eff}}^{(2)}(\vec{p},\vec{q}) u_{\vec{q}}^* v_{\vec{q}}.$$

Man bezeichnet $\Delta_{\vec{p}}$ als **Gap-Funktion**. Die Bedeutung dieser Bezeichnung wird spater klar werden. Mit $\tilde{V}_{\text{eff}}^{(2)}(\vec{p},\vec{q})^* = \tilde{V}_{\text{eff}}^{(2)}(\vec{q},\vec{p})$ und

$$C_0 = -\frac{1}{V} \sum_{\vec{p},\vec{q}} \tilde{V}_{\text{eff}}^{(2)}(\vec{p},\vec{q}) \left(u_{\vec{p}}^* v_{\vec{p}} \right)^* \left(u_{\vec{q}}^* v_{\vec{q}} \right) = \sum_{\vec{p}} \Delta_{\vec{p}} u_{\vec{p}} v_{\vec{p}}^*$$

ergibt sich

$$\hat{H} = C_0 + \sum_{\vec{p},\sigma} E_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{p},\sigma} - \sum_{\vec{p}} \Delta_{\vec{p}}^* \hat{a}_{-\vec{p},\downarrow} \hat{a}_{\vec{p},\uparrow} - \sum_{\vec{p}} \Delta_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p},\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{p},\downarrow}^\dagger.$$

Dieser Hamiltonoperator ist quadratisch in den Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, allerdings ist er nicht diagonal. Zur Diagonalisierung verwendet man wieder eine Bogoliubov-Transformation, diesmal für fermionische Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Wir definieren eine neue Basis von fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren durch

$$\begin{pmatrix} \hat{b}_{\bar{p},\uparrow} \\ \hat{b}_{-\bar{p},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\bar{p}} & -v_{\bar{p}} \\ v_{\bar{p}}^* & u_{\bar{p}}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{a}_{\bar{p},\uparrow} \\ \hat{a}_{-\bar{p},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}.$$

Hierbei sind $u_{\bar{p}}$ und $v_{\bar{p}}$ c-Zahlen. Es ist

$$\begin{aligned} \hat{b}_{\bar{p},\downarrow} &= v_{-\bar{p}} \hat{a}_{-\bar{p},\uparrow}^\dagger + u_{-\bar{p}} \hat{a}_{\bar{p},\downarrow}, \\ \hat{b}_{\bar{p},\uparrow}^\dagger &= u_{\bar{p}}^* \hat{a}_{\bar{p},\uparrow}^\dagger - v_{\bar{p}}^* \hat{a}_{-\bar{p},\downarrow}. \end{aligned}$$

Wir setzen voraus, daß die Koeffizienten die Relation

$$|u_{\bar{p}}|^2 + |v_{\bar{p}}|^2 = 1.$$

erfüllen. Dann lautet die Umkehrtransformation

$$\begin{pmatrix} \hat{a}_{\bar{p},\uparrow} \\ \hat{a}_{-\bar{p},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\bar{p}}^* & v_{\bar{p}} \\ -v_{\bar{p}}^* & u_{\bar{p}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{b}_{\bar{p},\uparrow} \\ \hat{b}_{-\bar{p},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}$$

Die neuen Operatoren $\hat{b}_{\bar{p},\sigma}$ und $\hat{b}_{\bar{p},\sigma}^\dagger$ erfüllen ebenfalls kanonische Antikommutationsrelationen.

$$\begin{aligned} \{\hat{b}_{\bar{p},\uparrow}, \hat{b}_{\bar{q},\uparrow}\} &= \left\{ u_{\bar{p}} \hat{a}_{\bar{p},\uparrow} - v_{\bar{p}} \hat{a}_{-\bar{p},\downarrow}^\dagger, u_{\bar{q}} \hat{a}_{\bar{q},\uparrow} - v_{\bar{q}} \hat{a}_{-\bar{q},\downarrow}^\dagger \right\} \\ &= -u_{\bar{p}} v_{\bar{q}} \left\{ \hat{a}_{\bar{p},\uparrow}, \hat{a}_{-\bar{q},\downarrow}^\dagger \right\} - u_{\bar{q}} v_{\bar{p}} \left\{ \hat{a}_{-\bar{p},\downarrow}^\dagger, \hat{a}_{\bar{q},\uparrow} \right\} \\ &= 0, \\ \{\hat{b}_{\bar{p},\uparrow}, \hat{b}_{\bar{q},\downarrow}\} &= \left\{ u_{\bar{p}} \hat{a}_{\bar{p},\uparrow} - v_{\bar{p}} \hat{a}_{-\bar{p},\downarrow}^\dagger, v_{-\bar{q}} \hat{a}_{-\bar{q},\uparrow}^\dagger + u_{-\bar{q}} \hat{a}_{\bar{q},\downarrow} \right\} \\ &= u_{\bar{p}} v_{-\bar{q}} \left\{ \hat{a}_{\bar{p},\uparrow}, \hat{a}_{-\bar{q},\uparrow}^\dagger \right\} - u_{-\bar{q}} v_{\bar{p}} \left\{ \hat{a}_{-\bar{p},\downarrow}^\dagger, \hat{a}_{\bar{q},\downarrow} \right\} \\ &= u_{\bar{p}} v_{-\bar{q}} \delta_{\bar{p},-\bar{q}} - u_{-\bar{q}} v_{\bar{p}} \delta_{-\bar{p},\bar{q}} \\ &= u_{\bar{p}} v_{\bar{p}} - u_{\bar{p}} v_{\bar{p}} = 0, \\ \{\hat{b}_{\bar{p},\uparrow}, \hat{b}_{\bar{q},\uparrow}^\dagger\} &= \left\{ u_{\bar{p}} \hat{a}_{\bar{p},\uparrow} - v_{\bar{p}} \hat{a}_{-\bar{p},\downarrow}^\dagger, u_{\bar{q}}^* \hat{a}_{\bar{q},\uparrow}^\dagger - v_{\bar{q}}^* \hat{a}_{-\bar{q},\downarrow} \right\} \\ &= u_{\bar{p}} u_{\bar{q}}^* \left\{ \hat{a}_{\bar{p},\uparrow}, \hat{a}_{\bar{q},\uparrow}^\dagger \right\} + v_{\bar{p}} v_{\bar{q}}^* \left\{ \hat{a}_{-\bar{p},\downarrow}^\dagger, \hat{a}_{-\bar{q},\downarrow} \right\} \\ &= u_{\bar{p}} u_{\bar{q}}^* \delta_{\bar{p},\bar{q}} + v_{\bar{p}} v_{\bar{q}}^* \delta_{-\bar{p},-\bar{q}} \\ &= \left(|u_{\bar{p}}|^2 + |u_{\bar{p}}|^2 \right) \delta_{\bar{p},\bar{q}} = \delta_{\bar{p},\bar{q}}, \\ \{\hat{b}_{\bar{p},\uparrow}, \hat{b}_{\bar{q},\downarrow}^\dagger\} &= \left\{ u_{\bar{p}} \hat{a}_{\bar{p},\uparrow} - v_{\bar{p}} \hat{a}_{-\bar{p},\downarrow}^\dagger, v_{-\bar{q}}^* \hat{a}_{-\bar{q},\uparrow}^\dagger + u_{-\bar{q}}^* \hat{a}_{\bar{q},\downarrow}^\dagger \right\} \\ &= 0. \end{aligned}$$

Wir erhalten für den Hamiltonoperator

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= C_0 + \sum_{\vec{p}, \sigma} E_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}, \sigma} - \sum_{\vec{p}} \Delta_{\vec{p}}^* \hat{a}_{-\vec{p}, \downarrow} \hat{a}_{\vec{p}, \uparrow} - \sum_{\vec{p}} \Delta_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p}, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{p}, \downarrow}^\dagger \\
&= C_0 + \sum_{\vec{p}} \left[2E_{\vec{p}} |v_{\vec{p}}|^2 + \Delta_{\vec{p}}^* u_{\vec{p}}^* v_{\vec{p}} + \Delta_{\vec{p}} u_{\vec{p}} v_{\vec{p}}^* \right] \\
&\quad + \sum_{\vec{p}} \left\{ \left[E_{\vec{p}} \left(|u_{\vec{p}}|^2 - |v_{\vec{p}}|^2 \right) + \Delta_{\vec{p}}^* u_{\vec{p}}^* v_{\vec{p}} + \Delta_{\vec{p}} u_{\vec{p}} v_{\vec{p}}^* \right] \left(\hat{b}_{\vec{p}, \uparrow}^\dagger \hat{b}_{\vec{p}, \uparrow} + \hat{b}_{-\vec{p}, \downarrow}^\dagger \hat{b}_{-\vec{p}, \downarrow} \right) \right. \\
&\quad \left. + \left[2E_{\vec{p}} u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} - \Delta_{\vec{p}} u_{\vec{p}}^2 + \Delta_{\vec{p}}^* v_{\vec{p}}^2 \right] \hat{b}_{\vec{p}, \uparrow}^\dagger \hat{b}_{-\vec{p}, \downarrow}^\dagger + \left[2E_{\vec{p}} u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} - \Delta_{\vec{p}} u_{\vec{p}}^2 + \Delta_{\vec{p}}^* v_{\vec{p}}^2 \right]^* \hat{b}_{-\vec{p}, \downarrow} \hat{b}_{\vec{p}, \uparrow} \right\}.
\end{aligned}$$

Wir bestimmen die Koeffizienten $u_{\vec{p}}$ und $v_{\vec{p}}$ so, daß die nicht-diagonalen Terme verschwinden. Wir fordern daher

$$2E_{\vec{p}} u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} - \Delta_{\vec{p}} u_{\vec{p}}^2 + \Delta_{\vec{p}}^* v_{\vec{p}}^2 = 0.$$

Dies ist eine quadratische Gleichung für $v_{\vec{p}}/u_{\vec{p}}$. Wir erhalten

$$\frac{v_{\vec{p}}}{u_{\vec{p}}} = \frac{1}{\Delta_{\vec{p}}^*} \left(-E_{\vec{p}} + \sqrt{E_{\vec{p}}^2 + |\Delta_{\vec{p}}|^2} \right),$$

wobei wir das $+$ -Vorzeichen für die Wurzel genommen haben. Der Ausdruck in Klammern ist eine reelle Zahl. Die Koeffizienten $u_{\vec{p}}$ und $v_{\vec{p}}$ sind im Allgemeinen komplexe Zahlen. Wir können jedoch $u_{\vec{p}}$ reell wählen, dann ist die Phase von $v_{\vec{p}}$ gegeben durch

$$\arg(u_{\vec{p}}) = 0, \quad \arg(v_{\vec{p}}) = \arg(\Delta_{\vec{p}}).$$

Berücksichtigt man noch $|u_{\vec{p}}|^2 + |v_{\vec{p}}|^2 = 1$, so ergibt sich

$$\begin{aligned}
|u_{\vec{p}}|^2 &= \frac{1}{1 + \left| \frac{v_{\vec{p}}}{u_{\vec{p}}} \right|^2} = \frac{1}{2} \frac{|\Delta_{\vec{p}}|^2}{E_{\vec{p}}^2 + |\Delta_{\vec{p}}|^2 - 2E_{\vec{p}} \sqrt{E_{\vec{p}}^2 + |\Delta_{\vec{p}}|^2}} \\
&= \frac{\sqrt{E_{\vec{p}}^2 + |\Delta_{\vec{p}}|^2} + E_{\vec{p}}}{2\sqrt{E_{\vec{p}}^2 + |\Delta_{\vec{p}}|^2}} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{E_{\vec{p}}}{\sqrt{E_{\vec{p}}^2 + |\Delta_{\vec{p}}|^2}} \right), \\
|v_{\vec{p}}|^2 &= 1 - |u_{\vec{p}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{E_{\vec{p}}}{\sqrt{E_{\vec{p}}^2 + |\Delta_{\vec{p}}|^2}} \right),
\end{aligned}$$

Weiter ist

$$u_{\vec{p}}^* v_{\vec{p}} = |u_{\vec{p}}|^2 \frac{v_{\vec{p}}}{u_{\vec{p}}} = \frac{\Delta_{\vec{p}}}{2\sqrt{E_{\vec{p}}^2 + |\Delta_{\vec{p}}|^2}}.$$

Somit vereinfacht sich der Hamiltonoperator zu

$$\hat{H} = E_0 + \sum_{\vec{p}} \sqrt{E_{\vec{p}}^2 + |\Delta_{\vec{p}}|^2} \left(\hat{b}_{\vec{p},\uparrow}^\dagger \hat{b}_{\vec{p},\uparrow} + \hat{b}_{-\vec{p},\downarrow}^\dagger \hat{b}_{-\vec{p},\downarrow} \right)$$

mit

$$E_0 = \sum_{\vec{p}} \left(E_{\vec{p}} - \frac{1}{2} \sqrt{E_{\vec{p}}^2 + |\Delta_{\vec{p}}|^2} \right).$$

Dieser Hamiltonoperator ist nun diagonal. Die Operatoren $\hat{b}_{\vec{p},\sigma}^\dagger$ und $\hat{b}_{\vec{p},\sigma}$ erzeugen bzw. vernichten Anregungszustände (oder Quasiteilchen). Für die Energie dieser Quasiteilchen gilt

$$E_{\vec{p}}^{\text{quasi}} = \sqrt{E_{\vec{p}}^2 + |\Delta_{\vec{p}}|^2} \geq |\Delta_{\vec{p}}|.$$

Ist $\Delta_{\vec{p}} \neq 0$, so muß mindestens die Energie $|\Delta_{\vec{p}}|$ aufgebracht werden, um ein Quasiteilchen zu erzeugen. $|\Delta_{\vec{p}}|$ gibt daher die mindestens zu überwindende Energielücke an, daher nennt man $\Delta_{\vec{p}}$ Gap-Funktion (engl. "gap", Lücke).

Bemerkung: Die Koeffizienten $u_{\vec{p}}$ und $v_{\vec{p}}$ aus dem Ansatz für die Bogoliubov-Transformation sind identisch mit den Koeffizienten $u_{\vec{p}}$ und $v_{\vec{p}}$ aus dem BCS-Ansatz für den Grundzustand. Wir können dies nun überprüfen. Im Rahmen der Diagonalisierung des Hamiltonoperators ist der Grundzustand $|\Psi_0\rangle$ durch die Eigenschaft

$$\hat{b}_{\vec{p},\sigma} |\Psi_0\rangle = 0$$

definiert. Der BCS-Ansatz lautete

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{\vec{p}} \left(u_{\vec{p}} + v_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p},\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{p},\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle.$$

Es gilt

$$\begin{aligned} \hat{b}_{\vec{p},\uparrow} |\Psi_0\rangle &= \left(u_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p},\uparrow} - v_{\vec{p}} \hat{a}_{-\vec{p},\downarrow}^\dagger \right) \prod_{\vec{q}} \left(u_{\vec{q}} + v_{\vec{q}} \hat{a}_{\vec{q},\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{q},\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \\ &= \left(u_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p},\uparrow} - v_{\vec{p}} \hat{a}_{-\vec{p},\downarrow}^\dagger \right) \left(u_{\vec{p}} + v_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p},\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{p},\downarrow}^\dagger \right) \prod_{\vec{q} \neq \vec{p}} \left(u_{\vec{q}} + v_{\vec{q}} \hat{a}_{\vec{q},\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{q},\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \\ &= \left(u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p},\uparrow} \hat{a}_{\vec{p},\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{p},\downarrow}^\dagger - u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} \hat{a}_{-\vec{p},\downarrow}^\dagger \right) \prod_{\vec{q} \neq \vec{p}} \left(u_{\vec{q}} + v_{\vec{q}} \hat{a}_{\vec{q},\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{q},\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \\ &= \left(u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} - u_{\vec{p}} v_{\vec{p}} \right) \hat{a}_{-\vec{p},\downarrow}^\dagger \prod_{\vec{q} \neq \vec{p}} \left(u_{\vec{q}} + v_{\vec{q}} \hat{a}_{\vec{q},\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{q},\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \\ &= 0, \\ \hat{b}_{-\vec{p},\downarrow} |\Psi_0\rangle &= \left(v_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p},\uparrow}^\dagger + u_{\vec{p}} \hat{a}_{-\vec{p},\downarrow} \right) \prod_{\vec{q}} \left(u_{\vec{q}} + v_{\vec{q}} \hat{a}_{\vec{q},\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\vec{q},\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(v_{\bar{p}} \hat{a}_{\bar{p},\uparrow}^\dagger + u_{\bar{p}} \hat{a}_{-\bar{p},\downarrow} \right) \left(u_{\bar{p}} + v_{\bar{p}} \hat{a}_{\bar{p},\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\bar{p},\downarrow}^\dagger \right) \prod_{\bar{q} \neq \bar{p}} \left(u_{\bar{q}} + v_{\bar{q}} \hat{a}_{\bar{q},\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\bar{q},\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \\
&= \left(u_{\bar{p}} v_{\bar{p}} \hat{a}_{\bar{p},\uparrow}^\dagger + u_{\bar{p}} v_{\bar{p}} \hat{a}_{-\bar{p},\downarrow} \hat{a}_{\bar{p},\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\bar{p},\downarrow}^\dagger \right) \prod_{\bar{q} \neq \bar{p}} \left(u_{\bar{q}} + v_{\bar{q}} \hat{a}_{\bar{q},\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\bar{q},\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \\
&= \left(u_{\bar{p}} v_{\bar{p}} - u_{\bar{p}} v_{\bar{p}} \right) \hat{a}_{\bar{p},\uparrow}^\dagger \prod_{\bar{q} \neq \bar{p}} \left(u_{\bar{q}} + v_{\bar{q}} \hat{a}_{\bar{q},\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\bar{q},\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \\
&= 0.
\end{aligned}$$

Wir betrachten noch die Gap-Funktion etwas genauer. Es ist

$$\Delta_{\bar{p}} = -\frac{1}{V} \sum_{\bar{q}} \tilde{V}_{\text{eff}}^{(2)}(\bar{p}, \bar{q}) u_{\bar{q}}^* v_{\bar{q}} = -\frac{1}{2V} \sum_{\bar{q}} \frac{\tilde{V}_{\text{eff}}^{(2)}(\bar{p}, \bar{q}) \Delta_{\bar{q}}}{\sqrt{E_{\bar{q}}^2 + |\Delta_{\bar{q}}|^2}}.$$

Geht man von Summen zu Integralen über, so erhält man

$$\Delta_{\bar{p}} = -\frac{1}{2(2\pi\hbar)^3} \int d^3q \frac{\tilde{V}_{\text{eff}}^{(2)}(\bar{p}, \bar{q}) \Delta_{\bar{q}}}{\sqrt{E_{\bar{q}}^2 + |\Delta_{\bar{q}}|^2}}.$$

Kennt man $\tilde{V}_{\text{eff}}^{(2)}$, so läßt sich die Gap-Funktion numerisch aus dieser Gleichung bestimmen. Ist $\tilde{V}_{\text{eff}}^{(2)}$ einfach genug, so ist auch eine analytische Lösung möglich. Als ein Beispiel hierzu betrachten wir wieder das effektive Potential

$$\tilde{V}_{\text{eff}}^{(2)}(\bar{p}, \bar{q}) = \begin{cases} -\tilde{V}_0^{(2)}, & 0 < E_{\bar{p}} < \Delta E \quad \text{und} \quad 0 < E_{\bar{q}} < \Delta E, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Wir nehmen weiter an, daß $\Delta_{\bar{p}}$ im Bereich $0 < E_{\bar{p}} < E_F$ konstant ist und setzen $\Delta = \Delta_{\bar{p}}$. Wir interessieren uns für den Fall, wo die drei Größen Δ , ΔE und E_F wie folgt geordnet sind:

$$\Delta \ll \Delta E \ll E_F.$$

Es ergibt sich

$$\begin{aligned}
\Delta &= \frac{4\sqrt{2}\pi m^{\frac{3}{2}} \tilde{V}_0^{(2)} \Delta}{2(2\pi\hbar)^3} \int_{E_F}^{E_F + \Delta E} dE \frac{\sqrt{E}}{\sqrt{(E - E_F)^2 + \Delta^2}} \\
&\approx \frac{4\sqrt{2}\pi m^{\frac{3}{2}} E_F^{\frac{1}{2}} \tilde{V}_0^{(2)} \Delta}{2(2\pi\hbar)^3} \int_0^{\Delta E} \frac{dE}{\sqrt{E^2 + \Delta^2}} \\
&= \frac{1}{4} \rho(E_F) \tilde{V}_0^{(2)} \Delta \ln \left(\frac{\Delta E + \sqrt{\Delta E^2 + \Delta^2}}{\Delta} \right) \approx \frac{1}{4} \rho(E_F) \tilde{V}_0^{(2)} \Delta \ln \left(2 \frac{\Delta E}{\Delta} \right)
\end{aligned}$$

und somit

$$\Delta = 2\Delta E e^{-\frac{4}{\rho(E_F)\tilde{V}_0^{(2)}}}.$$

Wir erhalten also einen endlichen positiven Wert für Δ , selbst für ein infinitesimales attraktives Potential $\tilde{V}_0^{(2)}$.

Wir können nun den widerstandslosen Stromfluss in einem Supraleiter erklären. Wir betrachten einen metallischen Supraleiter bei tiefen Temperaturen in zwei Inertialsystemen: Im System K (Laborsystem) ruht der Leiter, die Elektronen bewegen sich mit der Geschwindigkeit $-\vec{v}$ durch den Leiter. Im System K' (Ruhesystem der Elektronen) bewegt sich das Gitter der Atomrümpfe mit Geschwindigkeit $+\vec{v}$. Wir bezeichnen mit E und \vec{P} die Gesamtenergie bzw. den Gesamtimpuls der Elektronen im System K , und mit E' und \vec{P}' die Gesamtenergie bzw. den Gesamtimpuls der Elektronen im System K' . Es gilt

$$E = E' - \vec{v} \cdot \vec{P}' + \frac{1}{2}M\vec{v}^2, \quad \vec{P} = \vec{P}' - M\vec{v},$$

wobei M die Gesamtmasse der Elektronen bezeichnet. Betrachten wir die Situation im System K' . Hier ruht das Elektronensystem und wir nehmen zunächst an, daß das Elektronensystem durch den Grundzustand $|\psi_0\rangle$ beschrieben wird, also keine Quasiteilchen angeregt sind. Es ist also

$$E'_i = E'_0, \quad \vec{P}'_i = \vec{0}.$$

Im System K entspricht dies

$$E_i = E'_0 + \frac{1}{2}M\vec{v}^2, \quad \vec{P}_i = -M\vec{v}.$$

Der elektrische Widerstand basiert auf Stößen mit Rumpfatomen oder Verunreinigungen. Im System K' entspricht dies einer Anregung eines Quasiteilchens. Betrachten wir nun einen einzigen Stoßprozess, bei dem ein Quasiteilchen mit Impuls \vec{p}' angeregt wird. Nach diesem Prozess ist im System K' die Gesamtenergie und der Gesamtimpuls des Elektronensystems gegeben durch

$$E'_f = E'_0 + E_{\vec{p}'}^{\text{quasi}}, \quad \vec{P}'_f = \vec{p}'.$$

Dann ist im System K

$$E_f = E'_0 + E_{\vec{p}'}^{\text{quasi}} - \vec{v} \cdot \vec{p}' + \frac{1}{2}M\vec{v}^2, \quad \vec{P}_f = \vec{p}' - M\vec{v}.$$

Somit ist

$$\Delta E = E_f - E_i = E_{\vec{p}'}^{\text{quasi}} - \vec{v} \cdot \vec{p}'.$$

$\vec{v} \cdot \vec{p}'$ ist maximal für $\vec{p}' \parallel \vec{v}$. Elektrischer Widerstand tritt auf, falls Prozesse mit $\Delta E < 0$ möglich sind. Für

$$|\vec{v}| < \frac{E_{\vec{p}'}^{\text{quasi}}}{|\vec{p}'|} = \frac{\sqrt{\left(\frac{p'^2}{2m} - E_F\right)^2 + |\Delta_{\vec{p}'}|^2}}{|\vec{p}'|}$$

ist dies allerdings nicht möglich. Man überzeugt sich leicht, daß diese Gleichung endliche Driftgeschwindigkeiten erlaubt. So ist

$$\lim_{|\vec{p}'| \rightarrow p_F} \frac{\sqrt{\left(\frac{p'^2}{2m} - E_F\right)^2 + |\Delta_{\vec{p}'}|^2}}{|\vec{p}'|} = \frac{|\Delta_{p_F}|}{p_F},$$

$$\lim_{|\vec{p}'| \rightarrow \infty} \frac{\sqrt{\left(\frac{p'^2}{2m} - E_F\right)^2 + |\Delta_{\vec{p}'}|^2}}{|\vec{p}'|} \geq \lim_{|\vec{p}'| \rightarrow \infty} \frac{|\vec{p}'|}{2m}.$$

Daher fließt der Strom in einem Supraleiter bei kleinen Driftgeschwindigkeiten widerstandsfrei.

3.3 Streuprozesse

3.3.1 Der Wirkungsquerschnitt

Wir betrachten nun Streuprozesse. Experimentell ist die Situation häufig wie folgt: Man betrachtet Teilchen von Typ A , die sich in einem Bündel (engl. "bunch") der Länge l_A in Richtung der positiven z -Achse bewegen. Desweiteren betrachtet man Teilchen von Typs B , die sich in einem Bündel der Länge l_B in Richtung der negativen z -Achse bewegen. Wir bezeichnen mit ρ_A und ρ_B die Teilchenzahldichten in den jeweiligen Bündeln. Weiter sei mit F die Überlappfläche der beiden Bündel in der Transversalebene bezeichnet. Wir erwarten, daß die Gesamtzahl der Streueignisse proportional zu ρ_A, l_A, ρ_B, l_B und F ist. Der **Wirkungsquerschnitt** ist definiert durch

$$\sigma = \frac{\text{Anzahl der Streueignisse}}{\rho_A l_A \rho_B l_B F}.$$

Bei den Streueignissen können wir auch nur die Ereignisse betrachten, die genau n Teilchen mit den Impulsen $\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_n$ im Endzustand haben. Dies definiert den **differentiellen Wirkungsquerschnitt**

$$\frac{d\sigma}{d^3 p_1 \dots d^3 p_n}.$$

3.3.2 Die S-Matrix

Wenden wir uns nun der theoretischen Beschreibung zu. Wir betrachten einen Streuprozess mit zwei einlaufenden Teilchen und n auslaufenden Teilchen. Für $t \rightarrow -\infty$ sind die beiden einlaufenden Teilchen räumlich weit getrennt, ebenso wollen wir annehmen, daß für $t \rightarrow \infty$ die n auslaufenden Teilchen räumlich weit getrennt sind. Dies erlaubt uns, den Anfangszustand bei $t = -\infty$ als ein Produkt von zwei freien Einteilchenwellenfunktionen anzunehmen. Ebenso können wir für den Endzustand bei $t = \infty$ ein Produkt von n freien Einteilchenwellenfunktionen annehmen. Zur korrekten Herleitung des Flußfaktors nehmen wir weiter an, daß die beiden einlaufenden

Teilchen durch Wellenpakete beschrieben werden, d.h. der Einteilchenzustand eines einlaufenden Teilchens ist eine Überlagerung

$$|\phi\rangle = \int \frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3} \phi(\vec{k}) |\vec{k}\rangle$$

von Impulseigenzuständen $|\vec{k}\rangle$, wobei die Gewichtsfunktion $\phi(\vec{k})$ ein Maximum bei \vec{p} hat. Mit der Normierung

$$\langle \vec{p} | \vec{q} \rangle = \delta^3(\vec{p} - \vec{q})$$

und der Bedingung

$$\int d^3k \left| \frac{\phi(\vec{k})}{(2\pi\hbar)^3} \right|^2 = 1,$$

ergibt sich

$$\langle \phi | \phi \rangle = 1.$$

Für $t \rightarrow -\infty$ beschreiben wir den Anfangszustand durch zwei räumlich separierte Wellenpakete. Berücksichtigen wir noch, daß der Peak des einen Wellenpaketes gegenüber dem Peak des anderen Wellenpaketes in der Transversalebene um einen Vektor \vec{b} verschoben sein kann, so ergibt sich der Anfangszustand zu

$$|\phi_A \phi_B\rangle_{\text{in}} = \int \frac{d^3k_A}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d^3k_B}{(2\pi\hbar)^3} \phi_A(\vec{k}_A) \phi_B(\vec{k}_B) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{b} \cdot \vec{k}_B} |\vec{k}_A \vec{k}_B\rangle_{\text{in}}.$$

Man nennt $|\vec{b}|$ den Stoßparameter (engl. "impact parameter").

Ebenso können wir für $t \rightarrow \infty$ den Endzustand durch n räumlich separierte Teilchen beschreiben. Hier ist es technisch einfacher, nicht mit Wellenpaketen, sondern direkt mit Impulseigenzuständen zu arbeiten. Unser Endzustand wird also beschrieben durch

$${}_{\text{out}} \langle \vec{p}_1 \vec{p}_2 \dots \vec{p}_n |.$$

Die zeitliche Evolution eines (Schrödinger-) Zustandes ist gegeben durch

$$|\Psi, t\rangle = T \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H} \right) |\Psi, t_0\rangle,$$

wobei T den Zeitordnungsoperator bezeichnet. Wir interessieren uns für ${}_{\text{out}} \langle \vec{p}_1 \vec{p}_2 \dots \vec{p}_n | \vec{k}_A \vec{k}_B \rangle_{\text{in}}$. Nun ist $|\vec{k}_A \vec{k}_B\rangle_{\text{in}}$ bei $t = -\infty$ definiert, während ${}_{\text{out}} \langle \vec{p}_1 \vec{p}_2 \dots \vec{p}_n |$ bei $t = \infty$ definiert ist. Mit Hilfe

des Evolutionsoperators können wir die beiden Zustände zu einem gemeinsamen t_0 evolvieren und dann das Skalarprodukt berechnen. Wir erhalten also

$$\text{out}\langle\vec{p}_1\vec{p}_2\dots\vec{p}_n|\vec{k}_A\vec{k}_B\rangle_{\text{in}} = \left\langle\vec{p}_1\vec{p}_2\dots\vec{p}_n\left|T\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dt\hat{H}\right)\right|\vec{k}_A\vec{k}_B\right\rangle.$$

Wir definieren den **\hat{S} -Operator** durch

$$\hat{S} = T\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dt\hat{H}\right)$$

und die **S-Matrix** durch

$$\left\langle\vec{p}_1\vec{p}_2\dots\vec{p}_n|\hat{S}|\vec{k}_A\vec{k}_B\right\rangle = \text{out}\langle\vec{p}_1\vec{p}_2\dots\vec{p}_n|\vec{k}_A\vec{k}_B\rangle_{\text{in}}.$$

Falls die Teilchen nicht wechselwirken, so ist \hat{S} der Einsoperator. Selbst im Fall einer wechselwirkenden Theorie kann es vorkommen, daß zwei aufeinander geschossene Teilchen sich nicht treffen und aneinander vorbeifliegen. Um den wechselwirkenden Teil zu isolieren definieren wir den \hat{T} -Operator durch

$$\hat{S} = \mathbf{1} + i(2\pi\hbar)^4\delta^4\left(k_A + k_B - \sum_f p_f\right)\hat{T}.$$

Von besonderem Interesse sind die Matrixelemente von \hat{T} :

$$i\mathcal{A}(k_A k_B \rightarrow p_1 p_2 \dots p_n) = \langle\vec{p}_1\vec{p}_2\dots\vec{p}_n|i\hat{T}|\vec{k}_A\vec{k}_B\rangle$$

Wir interessieren uns für die Wahrscheinlichkeit

$$P = \left(\prod_f \int d^3 p_f\right) |\text{out}\langle\vec{p}_1\vec{p}_2\dots\vec{p}_n|\Phi_A\Phi_B\rangle_{\text{in}}|^2.$$

Der Anfangszustand hängt noch vom Stoßparameter \vec{b} ab. Um den Wirkungsquerschnitt zu erhalten, integrieren wir über alle Stoßparameter:

$$\sigma = \int d^2 b P(\vec{b}).$$

Wir erhalten

$$\frac{d\sigma}{d^3 p_1 d^3 p_2 \dots} = \int d^2 b \left(\prod_{i=A,B} \int \frac{d^3 k_i}{(2\pi\hbar)^3} \Phi_i(\vec{k}_i) \int \frac{d^3 k'_i}{(2\pi\hbar)^3} \Phi_i^*(\vec{k}'_i) \right) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{b}\cdot(\vec{k}_B-\vec{k}'_B)} \text{out}\langle\vec{p}_1\vec{p}_2\dots\vec{p}_n|k_A k_B\rangle_{\text{in}} \text{out}\langle\vec{p}_1\vec{p}_2\dots\vec{p}_n|k'_A k'_B\rangle_{\text{in}}^*.$$

Da wir uns nicht für den trivialen Fall keiner Wechselwirkung interessieren, können wir den Einsoperator des \hat{S} -Operators ignorieren und wir ersetzen

$$\begin{aligned} \text{out} \langle \vec{p}_1 \vec{p}_2 \dots \vec{p}_n | k_A k_B \rangle_{\text{in}} &= (2\pi\hbar)^4 \delta^4(k_A + k_B - \sum_f p_f) i\mathcal{A}(k_A k_B \rightarrow p_1 p_2 \dots p_n), \\ \text{out} \langle \vec{p}_1 \vec{p}_2 \dots \vec{p}_n | k'_A k'_B \rangle_{\text{in}} &= (2\pi\hbar)^4 \delta^4(k'_A + k'_B - \sum_f p_f) i\mathcal{A}(k'_A k'_B \rightarrow p_1 p_2 \dots p_n). \end{aligned}$$

Wir benutzen die zweite Deltafunktion und $\delta^2(k_B^\perp - k_B^{\perp'})$ um alle sechs k' -Integrale auszuführen. Wir erhalten

$$\begin{aligned} &\int \frac{d^3 k'_A}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d^3 k'_B}{(2\pi\hbar)^3} (2\pi\hbar)^2 \delta^2(k_B^\perp - k_B^{\perp'}) (2\pi\hbar)^4 \delta^4(k'_A + k'_B - k_A - k_B) = \\ &= c \int dk_A^{z'} \int dk_B^{z'} \delta(E'_A + E'_B - E_A - E_B) \delta(k_A^{z'} + k_B^{z'} - k_A^z - k_B^z) \\ &= c \int dk_A^{z'} \delta(E'_A + E'_B - E_A - E_B) \Big|_{k_B^{z'} = k_A^z + k_B^z - k_A^{z'}} \\ &= \frac{c}{\left| \frac{\partial E_A}{\partial k_A^z} - \frac{\partial E_B}{\partial k_B^z} \right|} = \frac{c}{|v_A - v_B|}. \end{aligned}$$

Die Differenz $|v_A - v_B|$ ist die Relativgeschwindigkeit der beiden Teilchen im Laborsystem. Die Wellenpakete der beiden Teilchen im Anfangszustand haben ein Maximum bei p_A bzw. p_B . Wir ersetzen in allen Termen, die stetig von k_A und k_B abhängen, die Werte k_A und k_B durch p_A und p_B . Wir erhalten

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d^3 p_1 d^3 p_2 \dots} &= c \frac{|\mathcal{A}(p_A p_B \rightarrow p_1 p_2 \dots p_n)|^2}{|v_A - v_B|} \\ &\int \frac{d^3 k_A}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d^3 k_B}{(2\pi\hbar)^3} |\Phi_A(\vec{k}_A)|^2 |\Phi_B(\vec{k}_B)|^2 (2\pi\hbar)^4 \delta^4(k_A + k_B - \sum_f p_f). \end{aligned}$$

Wir können diese Formel noch weiter vereinfachen, da realistische Detektoren keine kleine Variationen der einlaufenden und auslaufenden Teilchen auflösen können. Wir können daher $\delta(k_A + k_B - \sum_f p_f)$ durch $\delta(p_A + p_B - \sum_f p_f)$ ersetzen und erhalten

$$\frac{d\sigma}{d^3 p_1 d^3 p_2 \dots} = (2\pi\hbar)^6 \frac{c}{|v_A - v_B|} |\mathcal{A}(p_A p_B \rightarrow p_1 p_2 \dots p_n)|^2 (2\pi\hbar)^4 \delta^4(p_A + p_B - \sum_f p_f).$$

Diese Formel hängt nicht mehr von der Form der Wellenpakete ab.

Bemerkung: Die Vorfaktoren hängen von der gewählten Normierung

$$\langle \vec{p} | \vec{q} \rangle = \delta^3(\vec{p} - \vec{q})$$

ab. Andere übliche Normierungen sind

$$\langle \vec{p} | \vec{q} \rangle = (2\pi\hbar)^3 \delta^3(\vec{p} - \vec{q})$$

oder

$$\langle \vec{p} | \vec{q} \rangle = 2 \frac{E_{\vec{p}}}{c} (2\pi\hbar)^3 \delta^3(\vec{p} - \vec{q}),$$

letztere wird bevorzugt in der relativistischen Quantenfeldtheorie verwendet. Auch ist es üblich

$$c = \hbar = 1$$

zu setzen.

3.3.3 Kausalität

Wir betrachten nun einen Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1,$$

wobei \hat{H}_0 eine freie Theorie beschreibt und \hat{H}_1 alle Wechselwirkungsterme enthält. Wir nehmen an, daß der “einfache” Term \hat{H}_0 zeitunabhängig ist und die zu \hat{H}_0 gehörigen Energieeigenwerte und Eigenfunktionen bekannt sind:

$$\hat{H}_0 |\psi_n^0\rangle = E_{n,0} |\psi_n^0\rangle.$$

Hierbei ist n ein Satz von Quantenzahlen, der einen (Mehrteilchen-) Zustand der freien Theorie charakterisiert., d.h. den Grundzustand, alle Einteilchenzustände, alle Zweiteilchenzustände usw..

Für einen Zustand $|\psi\rangle$ der wechselwirkenden Theorie gilt die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle.$$

Mit der Zerlegung von \hat{H} in einen freien Anteil \hat{H}_0 und einen Anteil \hat{H}_1 , der die Wechselwirkung beschreibt, können wir die Schrödingergleichung auch wie folgt schreiben:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_0 \right) |\psi\rangle = \lambda \hat{H}_1 |\psi\rangle.$$

Wir betrachten nun den Differentialoperator auf der linken Seite. Er enthält explizit die Ableitung nach der Zeit t . Darüberhinaus enthält \hat{H}_0 üblicherweise in der Ortsdarstellung Ableitungen nach den Ortskoordinaten. Aus der Theorie der partiellen Differentialgleichungen und der Elektrodynamik ist die Methode der Greenschen Funktionen bekannt. Wir bestimmen nun die Greensche “Funktion” für diesen Differentialoperator, d.h. wir suchen $\hat{G}_0(t, t')$ so daß gilt

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_0 \right) \hat{G}_0(t, t') = \mathbf{1} \cdot \delta(t - t').$$

Hierbei bezeichnet $\mathbf{1}$ den Einsoperator im Hilbertraum. Beschränken wir uns auf Einteilchenzustände, so ist in der Ortsdarstellung

$$\mathbf{1} = \delta^3(\vec{x} - \vec{x}').$$

Bemerkung: Die Greensche ‘‘Funktion’’ $\hat{G}_0(t, t')$ ist ein Operator im Hilbertraum, und wir bezeichnen $\hat{G}_0(t, t')$ von nun an als Greenschen Operator.

Mit Hilfe des Greenschen Operators knnen wir fr den Zustand des wechselwirkenden Systems schreiben

$$|\psi, t\rangle = |\psi^0, t\rangle + \lambda \int_{-\infty}^{\infty} dt' \hat{G}_0(t, t') \hat{H}_1(t') |\psi, t'\rangle,$$

wobei $|\psi^0\rangle$ ein Zustand des freien Systems ist. (Im Rahmen der Theorie der partiellen Differentialgleichungen ist $|\psi^0\rangle$ eine homogene Lsung.) Man berprft leicht, da $|\psi, t\rangle$ die Differentialgleichung erfllt:

$$\begin{aligned} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_0\right) |\psi, t\rangle &= \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_0\right) |\psi^0, t\rangle + \lambda \int_{-\infty}^{\infty} dt' \delta(t - t') \hat{H}_1(t') |\psi, t'\rangle \\ &= \lambda \hat{H}_1(t) |\psi, t\rangle. \end{aligned}$$

Wie in der Elektrodynamik, so gibt es auch in diesem Fall nicht nur eine Lsung fr den Greenschen Operator. Je nach Wahl der Randbedingungen erhalten wir unterschiedliche Greensche Operatoren. Wir bezeichnen

$$\hat{G}_0^+(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \theta(t - t') e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t - t')}$$

als **retardierten Greenschen Operator** und

$$\hat{G}_0^-(t, t') = \frac{i}{\hbar} \theta(t' - t) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t - t')}$$

als **avancierten Greenschen Operator**. Betrachten wir nun die Situation, da der Strterm zum Zeitpunkt t_0 ‘‘eingeschaltet’’ wird. Die Kausalitt impliziert, da dies nur den Zustand $|\psi, t\rangle$ fr $t \geq t_0$ beeinflusst, aber nicht den Zustand $|\psi, t\rangle$ fr $t < t_0$. Dies wird durch die Verwendung des retardierten Greenschen Operators sichergestellt:

$$|\psi, t\rangle = |\psi^0, t\rangle + \lambda \int_{-\infty}^{\infty} dt' \hat{G}_0^+(t, t') \hat{H}_1(t') |\psi, t'\rangle.$$

Da der Greensche Operator nur von der Differenz $t - t'$ abhngt, schreiben wir $\hat{G}_0^+(t, t') = \hat{G}_0^+(t - t')$ und betrachten die Fourierdarstellung

$$\hat{G}_0^+(t) = \int \frac{dE}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \hat{G}_0^+(E).$$

Fr den retardierten Greenschen Operator ist hierbei der Integrationsweg infinitesimal in die obere komplexe Halbebene verschoben: $E \rightarrow E + i\delta$ mit $\delta > 0$. Diese Vorschrift vermeidet Pole entlang des Integrationsweges. Fr die Umkehrtransformation gilt dann

$$\hat{G}_0^+(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\delta)t} \hat{G}_0^+(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\delta-\hat{H}_0)t}$$

Hierbei bewirkt der infinitesimale Imaginärteil daß der Integrand an der oberen Integrationsgrenze verschwindet. Man schreibt oft

$$\hat{G}_0^+(E) = (E + i\delta - \hat{H}_0)^{-1}$$

und bezeichnet $\hat{G}_0^+(E)$ als **Resolvente**.

Nehmen wir nun für den Moment an, daß auch \hat{H}_1 nicht zeitabhängig ist. Wir können daher Energieeigenzustände der wechselwirkenden Theorie betrachten:

$$|\psi, t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} |\psi\rangle.$$

Wir suchen eine Lösung von

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle.$$

Wir können diese Gleichung auch wie folgt schreiben:

$$(E - \hat{H}_0) |\psi\rangle = \lambda \hat{H}_1 |\psi\rangle.$$

Für $|\psi\rangle$ gilt dann

$$|\psi\rangle = |\psi^0\rangle + \lambda (E + i\delta - \hat{H}_0)^{-1} \hat{H}_1 |\psi\rangle.$$

Diese Gleichung wird auch als **Lippmann-Schwinger-Gleichung** bezeichnet. Die iterative Lösung lautet

$$|\psi\rangle = |\psi^0\rangle + \lambda (E + i\delta - \hat{H}_0)^{-1} \hat{H}_1 |\psi^0\rangle + \lambda^2 (E + i\delta - \hat{H}_0)^{-1} \hat{H}_1 (E + i\delta - \hat{H}_0)^{-1} \hat{H}_1 |\psi^0\rangle + O(\lambda^3).$$

Kehren wir nun zur zeitabhängigen Situation zurück. Hier hatten wir die Gleichung

$$|\psi, t\rangle = |\psi^0, t\rangle + \lambda \int_{-\infty}^{\infty} dt' \hat{G}_0^+(t, t') \hat{H}_1(t') |\psi, t'\rangle.$$

Auch diese Gleichung können wir iterativ als Potenzreihe in λ lösen:

$$\begin{aligned} |\psi, t\rangle &= |\psi^0, t\rangle + \lambda \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \hat{G}_0^+(t, t_1) \hat{H}_1(t_1) |\psi^0, t_1\rangle \\ &\quad + \lambda^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \hat{G}_0^+(t, t_1) \hat{H}_1(t_1) \hat{G}_0^+(t_1, t_2) \hat{H}_1(t_2) |\psi^0, t_2\rangle + O(\lambda^3) \\ &= |\psi^0, t\rangle - \frac{i\lambda}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt_1 e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t_1)} \hat{H}_1(t_1) |\psi^0, t_1\rangle \\ &\quad - \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t_1)} \hat{H}_1(t_1) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t_1-t_2)} \hat{H}_1(t_2) |\psi^0, t_2\rangle + O(\lambda^3). \end{aligned}$$

Vergleichen wir diese Gleichung mit der zeitunabhängigen Lösung, so finden wir, daß die korrekte Vorschrift zur Vermeidung der Pole durch $\hat{H}_0 \rightarrow \hat{H}_0 - i\delta$ gegeben ist.

3.3.4 Störungstheorie

Es empfiehlt sich, vom Schrödingerbild ins Wechselwirkungsbild zu wechseln. Wir definieren zunächst den Zeitevolutionsoperator für das ungestörte Problem:

$$\hat{U}_0 = T \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}_0 \right) = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 (t - t_0) \right).$$

Das zweite Gleichheitszeichen folgt, da wir \hat{H}_0 als zeitunabhängig vorausgesetzt haben. Wir setzen nun

$$\begin{aligned} |\psi, t\rangle_I &= \hat{U}_0(t)^\dagger |\psi, t\rangle, \\ (\hat{H}_1)_I(t) &= \hat{U}_0(t)^\dagger \hat{H}_1 \hat{U}_0(t) \end{aligned}$$

$|\psi, t\rangle_I$ ist der Zustandsvektor im Wechselwirkungsbild, $(\hat{H}_1)_I$ ist der Operator \hat{H}_1 im Wechselwirkungsbild. Im Wechselwirkungsbild gilt für die Zeitentwicklung von $|\psi, t\rangle_I$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t\rangle_I = \lambda (\hat{H}_1)_I(t) |\psi, t\rangle_I.$$

Diese Gleichung hat die Lösung

$$|\psi, t\rangle_I = T \exp \left(-\frac{i\lambda}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 (\hat{H}_1)_I(t_1) \right) |\psi, t_0\rangle_I$$

Diesen Ausdruck können wir für kleines λ entwickeln und finden

$$\begin{aligned} |\psi, t\rangle_I &= |\psi, t_0\rangle_I - \frac{i\lambda}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 (\hat{H}_1)_I(t_1) |\psi, t_0\rangle_I - \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \int_{t_0}^t dt_1 (\hat{H}_1)_I(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 (\hat{H}_1)_I(t_2) |\psi, t_0\rangle_I \\ &\quad + O(\lambda^3). \end{aligned}$$

Wir betrachten nun die Berechnung der Matrixelemente des \hat{S} -Operators im Rahmen der Störungstheorie. Wir nehmen an, daß sich das System zum Zeitpunkt $t = t_i$ im Eigenzustand $|\psi_i^0\rangle$ des ungestörten Hamilton-Operators \hat{H}_0 befindet und interessieren uns für die Übergangsamplitude, daß sich das System zum Zeitpunkt $t = t_f$ im Zustand $|\psi_f^0\rangle$ befindet:

$$S_{fi} = \left\langle \psi_f^0 \right|_I T \exp \left(-\frac{i\lambda}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt_1 (\hat{H}_1)_I(t_1) \right) \left| \psi_i^0 \right\rangle_I$$

Nun ist

$$(\hat{H}_1)_I(t_1) = \exp \left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 (t_1 - t_i) \right) \hat{H}_1 \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 (t_1 - t_i) \right)$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{j,k} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t_1 - t_i)\right) |\psi_j^0\rangle \langle \psi_j^0| \hat{H}_1 |\psi_k^0\rangle \langle \psi_k^0| \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t_1 - t_i)\right) \\
&= \sum_{j,k} e^{\frac{i}{\hbar} E_{j,0}(t_1 - t_i)} |\psi_j^0\rangle M_{jk} \langle \psi_k^0| e^{-\frac{i}{\hbar} E_{k,0}(t_1 - t_i)}.
\end{aligned}$$

Hierbei haben wir vor und nach \hat{H}_1 jeweils einen vollständigen Satz von Zuständen eingefügt und in der letzten Zeile

$$M_{jk} = \langle \psi_j^0 | \hat{H}_1 | \psi_k^0 \rangle$$

gesetzt. Mit

$$|\psi_f^0\rangle_I = e^{\frac{i}{\hbar} E_{f,0}(t_f - t_i)} |\psi_f^0\rangle$$

erhalten wir

$$S_{fi} = e^{-\frac{i}{\hbar} E_{f,0}(t_f - t_i)} \left\langle \psi_f^0 \left| T \exp\left(-\frac{i\lambda}{\hbar} \sum_{j,k} \int_{t_i}^{t_f} dt_1 e^{-\frac{i}{\hbar} (E_{k,0} - E_{j,0})(t_1 - t_i)} |\psi_j^0\rangle M_{jk} \langle \psi_k^0|\right) \right| \psi_i^0 \right\rangle.$$

Wir entwickeln nun in λ und schreiben

$$S_{fi} = \sum_{l=0}^{\infty} \lambda^l S_{fi}^{(l)}.$$

Dann ist $S_{fi}^{(l)}$ gegeben durch

$$\begin{aligned}
S_{fi}^{(l)} &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^l \sum_{j_1, j_2, \dots, j_{l-1}} \int_{t_i}^{t_f} dt_l \int_{t_i}^{t_l} dt_{l-1} \dots \int_{t_i}^{t_2} dt_1 \\
&\quad e^{-\frac{i}{\hbar} E_{f,0}(t_f - t_l)} M_{f j_{l-1}} e^{-\frac{i}{\hbar} E_{j_{l-1},0}(t_l - t_{l-1})} M_{j_{l-1} j_{l-2}} \dots e^{-\frac{i}{\hbar} E_{j_1,0}(t_2 - t_1)} M_{j_1 i} e^{-\frac{i}{\hbar} E_{i,0}(t_1 - t_i)}.
\end{aligned}$$

Vergleichen wir diesen Ausdruck mit den Formeln aus dem vorherigen Abschnitt, so finden wir, daß die korrekte Vorschrift zur Vermeidung der Pole durch

$$E_{jk,0} \rightarrow E_{jk,0} - i\delta_k$$

mit $\delta_l > \delta_{l-1} > \dots > \delta_1$ (und $E_{j_l,0} = E_{f,0}$) gegeben ist.

Betrachten wir nun ein Beispiel. Wir betrachten eine Theorie mit zwei Sorten von Teilchen: einmal Spin-1/2 Fermionen (“Elektronen”) mit Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $\hat{a}_{\vec{p},\sigma}^\dagger$ und $\hat{a}_{\vec{p},\sigma}$, sowie Spin-0 Bosonen (“Phononen”) mit Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $\hat{b}_{\vec{p}}^\dagger$ und $\hat{b}_{\vec{p}}$. Der Hamiltonoperator sei durch

$$\hat{H} = \sum_{\vec{p},\sigma} E_{\vec{p}}^e \hat{a}_{\vec{p},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{p},\sigma} + \sum_{\vec{p}} E_{\vec{p}}^{\text{phonon}} \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{\vec{p}} + \frac{1}{V^{\frac{1}{2}}} \sum_{\vec{p},\vec{q},\vec{k},\sigma} g_{\vec{q},\vec{k}} \delta_{\vec{p},\vec{q}+\vec{k}} \hat{a}_{\vec{p},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{q},\sigma} \left(\hat{b}_{-\vec{k}}^\dagger + \hat{b}_{\vec{k}} \right)$$

gegeben. Hierbei gibt $E_{\vec{p}}^e$ die kinetische Energie eines Elektrons mit Impuls \vec{p} an, und $E_{\vec{p}}^{\text{phonon}}$ die kinetische Energie eines Phonons mit Impuls \vec{p} an. Im einfachsten Fall betrachten wir nicht-relativistische Elektronen und akustische Phononen mit kleinem Impuls, dann ist

$$E_{\vec{p}}^e = \frac{p^2}{2m}, \quad E_{\vec{p}}^{\text{phonon}} = v_{\text{phonon}} |\vec{p}|,$$

wobei v_{phonon} die Phonongeschwindigkeit angibt. Die Größe $g_{\vec{q},\vec{k}}$ beschreibt die Kopplung von Elektronen an Phononen. Zerlegen wir den Hamiltonoperator in einen freien Anteil und einen wechselwirkenden Anteil, so ist

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \sum_{\vec{p},\sigma} E_{\vec{p}}^e \hat{a}_{\vec{p},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{p},\sigma} + \sum_{\vec{p}} E_{\vec{p}}^{\text{phonon}} \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{\vec{p}}, \\ \hat{H}_1 &= \frac{1}{V^{1/2}} \sum_{\vec{p},\vec{q},\vec{k},\sigma} g_{\vec{q},\vec{k}} \delta_{\vec{p},\vec{q}+\vec{k}} \hat{a}_{\vec{p},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{q},\sigma} \left(\hat{b}_{-\vec{k}}^\dagger + \hat{b}_{\vec{k}} \right). \end{aligned}$$

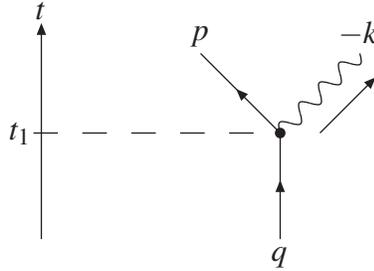
Betrachten wir nun einen Prozess, in dem der Anfangszustand aus einem Elektron mit Impuls \vec{q} und Spin \uparrow besteht, der Endzustand dagegen aus einem Elektron (mit Impuls \vec{p} und Spin \uparrow) und einem Phonon mit Impuls $(-\vec{k})$. (Das Minuszeichen für den Phononimpuls ist Konvention und hat keine tiefere Bedeutung.) Es ist also

$$|i\rangle = \hat{a}_{\vec{q},\uparrow}^\dagger |0\rangle, \quad |f\rangle = \hat{a}_{\vec{p},\uparrow}^\dagger \hat{b}_{-\vec{k}}^\dagger |0\rangle$$

und

$$E_i = E_{\vec{q}}^e, \quad E_f = E_{\vec{p}}^e + E_{-\vec{k}}^{\text{phonon}}.$$

In erster Ordnung in der Störungstheorie betrachten wir für diesen Übergang das folgende Feynmandiagramm:



Für das S -Matrixelement erhalten wir

$$\begin{aligned} S_{fi}^{(1)} &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt_1 e^{-\frac{i}{\hbar} E_f (t_f - t_1)} \langle f | \hat{H}_1 | i \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_i (t_1 - t_i)} \\ &= -\frac{i}{\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} (E_f t_f - E_i t_i)} \int_{t_i}^{t_f} dt_1 e^{\frac{i}{\hbar} (E_f - E_i) t_1} \langle f | \hat{H}_1 | i \rangle. \end{aligned}$$

Es ist

$$\begin{aligned}\langle f | \hat{H}_1 | i \rangle &= \frac{1}{V^{\frac{1}{2}}} \left\langle 0 \left| \hat{b}_{-\vec{k}} \hat{a}_{\vec{p}, \uparrow} \left(\sum_{\vec{p}', \vec{q}', \vec{k}', \sigma} g_{\vec{q}', \vec{k}'} \delta_{\vec{p}', \vec{q}' + \vec{k}'} \hat{a}_{\vec{p}', \sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}', \sigma} (\hat{b}_{-\vec{k}'}^\dagger + \hat{b}_{\vec{k}'}^\dagger) \right) \hat{a}_{\vec{q}, \uparrow}^\dagger \right| 0 \right\rangle \\ &= \frac{1}{V^{\frac{1}{2}}} g_{\vec{q}, \vec{k}} \delta_{\vec{p}, \vec{q} + \vec{k}}.\end{aligned}$$

Somit erhalten wir für $t_i \rightarrow -\infty$ und $t_f \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned}S_{fi}^{(1)} &= -\frac{i}{\hbar V^{\frac{1}{2}}} g_{\vec{q}, \vec{k}} \delta_{\vec{p}, \vec{q} + \vec{k}} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_f t_f - E_i t_i)} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i)t_1} \\ &= -\frac{2\pi i}{V^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{i}{\hbar}E_i(t_f - t_i)} g_{\vec{q}, \vec{k}} \delta_{\vec{p}, \vec{q} + \vec{k}} \delta(E_f - E_i).\end{aligned}$$

Wir sehen also, daß sowohl der räumliche Impuls als auch die Energie erhalten ist. Die Phase $e^{-\frac{i}{\hbar}E_i(t_f - t_i)}$ ist für das Betragsquadrat nicht weiter relevant.

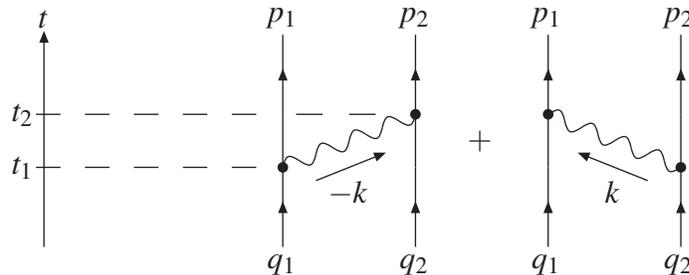
Wir betrachten noch einen zweiten Prozess. Hierbei soll der Anfangszustand aus einem Elektron mit Impuls \vec{q}_1 und Spin \uparrow und einem weiteren Elektron mit Impuls \vec{q}_2 und Spin \downarrow bestehen. Als Endzustand betrachten wir einen Zustand mit einem Elektron mit Impuls \vec{p}_1 und Spin \uparrow und einem weiteren Elektron mit Impuls \vec{p}_2 und Spin \downarrow . Es ist also

$$|i\rangle = \hat{a}_{\vec{q}_1, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}_2, \downarrow}^\dagger |0\rangle, \quad |f\rangle = \hat{a}_{\vec{p}_1, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2, \downarrow}^\dagger |0\rangle$$

und

$$E_i = E_{\vec{q}_1}^e + E_{\vec{q}_2}^e, \quad E_f = E_{\vec{p}_1}^e + E_{\vec{p}_2}^e.$$

Wir erhalten den ersten nicht-trivialen Beitrag in zweiter Ordnung in der Störungstheorie. Dieser Beitrag entspricht den beiden Feynmandiagrammen



Für das S-Matrixelement erhalten wir

$$S_{fi}^{(2)} = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_j \int_{t_i}^{t_f} dt_2 \int_{t_i}^{t_2} dt_1 e^{-\frac{i}{\hbar}E_f(t_f - t_2)} \langle f | \hat{H}_1 | j \rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_j(t_2 - t_1)} \langle j | \hat{H}_1 | i \rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_i(t_1 - t_i)}$$

$$= -\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}(E_f t_f - E_i t_i)}}{\hbar^2} \sum_j \int_{t_i}^{t_f} dt_2 \int_{t_i}^{t_2} dt_1 e^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_j)t_2} \langle f | \hat{H}_1 | j \rangle e^{\frac{i}{\hbar}(E_j - E_i)t_1} \langle j | \hat{H}_1 | i \rangle.$$

Die Zwischenzustände $|j\rangle$ im Zeitraum $t_1 < t < t_2$, die zu nicht verschwindenden Matrixelementen führen sind

$$|ja\rangle = \hat{a}_{\vec{p}_1, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}_2, \downarrow}^\dagger \hat{b}_{-\vec{k}}^\dagger |0\rangle, \quad E_{ja} = E_{\vec{p}_1}^e + E_{\vec{q}_2}^e + E_{-\vec{k}}^{\text{phonon}}$$

und

$$|jb\rangle = \hat{a}_{\vec{q}_1, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2, \downarrow}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}}^\dagger |0\rangle, \quad E_{jb} = E_{\vec{q}_1}^e + E_{\vec{p}_2}^e + E_{\vec{k}}^{\text{phonon}}.$$

Diese beiden Möglichkeiten entsprechen den beiden Feynmandiagrammen. Wir erhalten

$$S_{fi}^{(2)} = -\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}(E_f t_f - E_i t_i)}}{\hbar^2 V} g_{\vec{q}_1, \vec{k}} g_{\vec{q}_2, -\vec{k}} \delta_{\vec{p}_1 + \vec{p}_2, \vec{q}_1 + \vec{q}_2} \int_{t_i}^{t_f} dt_2 \int_{t_i}^{t_2} dt_1 \left[e^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_{ja})t_2} e^{\frac{i}{\hbar}(E_{ja} - E_i)t_1} + e^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_{jb})t_2} e^{\frac{i}{\hbar}(E_{jb} - E_i)t_1} \right],$$

wobei $\vec{k} = \vec{p}_1 - \vec{q}_1$. Wir betrachten den Grenzfall $t_i \rightarrow -\infty$ und $t_f \rightarrow \infty$. Wir führen zunächst die Integration über t_1 aus. Hierbei berücksichtigen wir $E_{ja} \rightarrow E_{ja} - i\delta$ und $E_{jb} \rightarrow E_{jb} - i\delta$, so daß die Randterme bei $t = t_i$ verschwinden. Wir erhalten

$$\begin{aligned} S_{fi}^{(2)} &= \\ &= \frac{ie^{-\frac{i}{\hbar}(E_f t_f - E_i t_i)}}{\hbar V} g_{\vec{q}_1, \vec{k}} g_{\vec{q}_2, -\vec{k}} \delta_{\vec{p}_1 + \vec{p}_2, \vec{q}_1 + \vec{q}_2} \left(\frac{1}{(E_{ja} - E_i)} + \frac{1}{(E_{jb} - E_i)} \right) \int_{t_i}^{t_f} dt_2 e^{\frac{i}{\hbar}(E_f - E_i)t_2} \\ &= \frac{2\pi i}{V} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_f t_f - E_i t_i)} g_{\vec{q}_1, \vec{k}} g_{\vec{q}_2, -\vec{k}} \delta_{\vec{p}_1 + \vec{p}_2, \vec{q}_1 + \vec{q}_2} \frac{E_{ja} + E_{jb} - 2E_i}{(E_{ja} - E_i)(E_{jb} - E_i)} \delta(E_f - E_i). \end{aligned}$$

Für $E_f = E_i$ und $E_{\vec{k}}^{\text{phonon}} = E_{-\vec{k}}^{\text{phonon}}$ erhalten wir

$$\begin{aligned} \frac{E_{ja} + E_{jb} - 2E_i}{(E_{ja} - E_i)(E_{jb} - E_i)} &= \frac{2E_{\vec{k}}^{\text{phonon}}}{\left(E_{\vec{k}}^{\text{phonon}} + E_{\vec{p}_1}^e - E_{\vec{q}_1}^e\right) \left(E_{\vec{k}}^{\text{phonon}} + E_{\vec{q}_1}^e - E_{\vec{p}_1}^e\right)} \\ &= -\frac{2E_{\vec{k}}^{\text{phonon}}}{\left(E_{\vec{p}_1}^e - E_{\vec{q}_1}^e\right)^2 - \left(E_{\vec{k}}^{\text{phonon}}\right)^2} \end{aligned}$$

und somit

$$S_{fi}^{(2)} = -\frac{2\pi i}{V} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_f t_f - E_i t_i)} g_{\vec{q}_1, \vec{k}} g_{\vec{q}_2, -\vec{k}} \frac{2E_{\vec{k}}^{\text{phonon}}}{\left(E_{\vec{p}_1}^e - E_{\vec{q}_1}^e\right)^2 - \left(E_{\vec{k}}^{\text{phonon}}\right)^2} \delta_{\vec{p}_1 + \vec{p}_2, \vec{q}_1 + \vec{q}_2} \delta(E_f - E_i).$$

3.3.5 Effektive Theorien

Im vorherigen Abschnitt haben wir eine Theorie betrachtet, deren Hamiltonoperator durch

$$\hat{H}_{\text{full}} = \sum_{\vec{p},\sigma} E_{\vec{p}}^e \hat{a}_{\vec{p},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{p},\sigma} + \sum_{\vec{p}} E_{\vec{p}}^{\text{phonon}} \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{\vec{p}} + \frac{1}{V^{\frac{1}{2}}} \sum_{\vec{p},\vec{q},\vec{k},\sigma} g_{\vec{q},\vec{k}} \delta_{\vec{p},\vec{q}+\vec{k}} \hat{a}_{\vec{p},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{q},\sigma} (\hat{b}_{-\vec{k}}^\dagger + \hat{b}_{\vec{k}})$$

gegeben war. Diese Theorie beschreibt Elektronen und Phononen. In bestimmten Situationen interessiert man sich nicht weiter für die Phononen und sucht eine effektive Theorie, welche nur Elektronen enthält. Wir fordern, daß die effektive Theorie bis zu einer bestimmten Ordnung in der Störungstheorie die gleiche Physik beschreibt. Beispielsweise können wir eine effektive Theorie suchen, die bis einschließlich $g_{\vec{q},\vec{k}}^2$ mit der obigen Theorie übereinstimmt. Wir betrachten den Ansatz

$$\hat{H}_{\text{effective}} = \sum_{\vec{p},\sigma} E_{\vec{p}}^e \hat{a}_{\vec{p},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\vec{p},\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{p}_1,\vec{p}_2,\vec{q}_1,\vec{q}_2,\sigma_1,\sigma_2} \delta_{\vec{p}_1+\vec{p}_2,\vec{q}_1+\vec{q}_2} \tilde{V}_{\text{Phonon}}^{(2)} \hat{a}_{\vec{p}_1,\sigma_1}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2,\sigma_2}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}_2,\sigma_2} \hat{a}_{\vec{q}_1,\sigma_1},$$

wobei das effektive Potential $\tilde{V}_{\text{Phonon}}^{(2)}$ zunächst noch unbekannt ist. Zur Bestimmung des effektive Potential betrachten wir wieder den Streuprozess, wobei der Anfangszustand aus einem Elektron mit Impuls \vec{q}_1 und Spin \uparrow und einem weiteren Elektron mit Impuls \vec{q}_2 und Spin \downarrow besteht, der Endzustand aus einem Elektron mit Impuls \vec{p}_1 und Spin \uparrow und einem weiteren Elektron mit Impuls \vec{p}_2 und Spin \downarrow besteht. Es ist

$$|i\rangle = \hat{a}_{\vec{q}_1,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}_2,\downarrow}^\dagger |0\rangle, \quad |f\rangle = \hat{a}_{\vec{p}_1,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}_2,\downarrow}^\dagger |0\rangle$$

und

$$E_i = E_{\vec{q}_1}^e + E_{\vec{q}_2}^e, \quad E_f = E_{\vec{p}_1}^e + E_{\vec{p}_2}^e.$$

In der effektiven Theorie erhalten wir in der Störungstheorie

$$\begin{aligned} S_{fi}^{(2,\text{effective})} &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt_1 e^{-\frac{i}{\hbar} E_f (t_f - t_1)} \langle f | \hat{H}_{1,\text{effective}} | i \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_i (t_1 - t_i)} \\ &= -\frac{i}{\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} (E_f t_f - E_i t_i)} \int_{t_i}^{t_f} dt_1 e^{\frac{i}{\hbar} (E_f - E_i) t_1} \langle f | \hat{H}_{1,\text{effective}} | i \rangle \\ &= -\frac{2\pi i}{V} e^{-\frac{i}{\hbar} (E_f t_f - E_i t_i)} \tilde{V}_{\text{Phonon}}^{(2)} \delta_{\vec{p}_1+\vec{p}_2,\vec{q}_1+\vec{q}_2} \delta(E_f - E_i). \end{aligned}$$

Vergleichen wir nun $S_{fi}^{(2,\text{effective})}$ mit $S_{fi}^{(2)}$ aus dem vorherigen Abschnitt, so findet man

$$\tilde{V}_{\text{Phonon}}^{(2)} = 2g_{\vec{q}_1,\vec{k}} g_{\vec{q}_2,-\vec{k}} \frac{E_{\vec{k}}^{\text{phonon}}}{\left(E_{\vec{p}_1}^e - E_{\vec{q}_1}^e\right)^2 - \left(E_{\vec{k}}^{\text{phonon}}\right)^2}.$$

Dieses Wechselwirkungspotential beschreibt die effektive Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen, die durch Phononenaustausch zustande kommt. Wir haben diese Wechselwirkung bereits in der Diskussion der Supraleitung verwendet. Nun haben wir die Wechselwirkung aus \hat{H}_{full} hergeleitet. Mit $\vec{k} = \vec{p}_1 - \vec{q}_1$ ergibt sich für den Nenner

$$\left(E_{\vec{p}_1}^e - E_{\vec{q}_1}^e\right)^2 - \left(E_{\vec{k}}^{\text{phonon}}\right)^2 = \left(\frac{p_1^2}{2m} - \frac{q_1^2}{2m}\right)^2 - v_{\text{phonon}}^2 (p_1^2 + q_1^2 - 2\vec{p}_1 \cdot \vec{q}_1).$$

Für kleine Impulse \vec{p}_1 und \vec{q}_1 dominiert der zweite Term und die Wechselwirkung ist in dieser Region attraktiv.

4 Relativistische Quantenmechanik

Bisher haben wir nur nicht-relativistische Systeme betrachtet, d.h. Systeme in denen alle relevanten Geschwindigkeiten deutlich kleiner als die Lichtgeschwindigkeit sind:

$$|\vec{v}| \ll c$$

Wir wollen nun den Übergang zu relativistischen Systemen betrachten. Dabei beschränken wir uns in dieser Vorlesung auf freie Teilchen. Die Behandlung von relativistischen Systemen mit Wechselwirkungen ist Thema der relativistischen Quantenfeldtheorie, diese wird in einer eigenständigen Vorlesung behandelt.

In der speziellen Relativitätstheorie sind Zeit und Raum durch Lorentztransformationen miteinander verknüpft. Wir verwenden die Notation

$$\begin{aligned}x^\mu &= (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, x, y, z) = (ct, \vec{x}), \\p^\mu &= (p^0, p^1, p^2, p^3) = (E/c, p^x, p^y, p^z) = (E/c, \vec{p}).\end{aligned}$$

Der metrische Tensor ist durch

$$g_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$$

definiert. Der inverse metrische Tensor $g^{\mu\nu}$ ist durch

$$g^{\mu\tau} g_{\tau\nu} = \delta^\mu_\nu$$

definiert und durch

$$g^{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$$

gegeben. Hoch- und Runterziehen von Indizes erfolgt durch

$$a_\mu = g_{\mu\nu} a^\nu, \quad a^\mu = g^{\mu\nu} a_\nu.$$

Man bezeichnet a^μ als einen **kontravarianten Vierervektor** und a_μ als einen **kovarianten Vierervektor**.

In der speziellen Relativitätstheorie betrachtet man Koordinatentransformationen

$$x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu,$$

die den metrischen Tensor invariant lassen:

$$\Lambda^\mu_\sigma g_{\mu\nu} \Lambda^\nu_\tau = g_{\sigma\tau}.$$

In Matrixschreibweise:

$$\Lambda^T g \Lambda = g,$$

Die Menge all dieser Koordinatentransformationen bilden eine Gruppe, die als **Lorentzgruppe** bezeichnet wird. Diese Gruppe besteht aus vier Zusammenhangskomponenten. Die Zusammenhangskomponente, welche die Identität enthält, wird als **eigentliche orthochrone Lorentzgruppe** und ist durch

$$\Lambda^\mu{}_\sigma g_{\mu\nu} \Lambda^\nu{}_\tau = g_{\sigma\tau}, \quad \det \Lambda = 1, \quad \Lambda^0{}_0 \geq 1$$

charakterisiert. Die eigentliche orthochrone Lorentzgruppe wird durch die Generatoren für die drei räumlichen Rotationen und die drei Boosts erzeugt. Die anderen Zusammenhangskomponenten erhält man durch die Anwendung der diskreten Transformationen der Zeitumkehr und der Raumspiegelung.

Unser Ziel ist es nun, die Theorie so zu formulieren, so daß die Transformationseigenschaften unter Lorentztransformationen offensichtlich sind. Dies bedeutet, wir betrachten nur Ausdrücke, die entweder Lorentzinvariant sind, sich wie ein Vierervektor transformieren, oder allgemeiner sich wie ein Tensor r -ter Stufe transformieren. Eine derartige Formulierung der Theorie bezeichnet man als eine kovariante Formulierung.

Sind a^μ und b^μ zwei Vierervektoren, so notieren wir das Minkowskiskalarproduct dieser zweier Vierervektoren mit

$$a \cdot b = a^\mu g_{\mu\nu} b^\nu = a^\mu b_\mu = a_\mu b^\mu = a^0 b^0 - a^1 b^1 - a^2 b^2 - a^3 b^3.$$

Im zweiten, dritten und vierten Ausdruck wurde die Einsteinsche Summenkonvention verwendet.

4.1 Die Klein-Gordon-Gleichung

Wir beginnen unsere Betrachtung mit dem Fall eines freien, aber relativistischen Spin-0 Bosons. Im nicht-relativistischen Fall hatten wir klassisch

$$E = \frac{1}{2m} \vec{p}^2$$

und in der Quantenmechanik

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\vec{p}}^2.$$

Mit der Substitution

$$\hat{H} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \hat{\vec{p}} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

ergibt sich aus

$$\hat{H} |\psi\rangle = \frac{1}{2m} \hat{\vec{p}}^2 |\psi\rangle$$

die Schrödingergleichung für ein freies Spin-0 Teilchen:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta |\psi\rangle.$$

Diese Gleichung ist erster Ordnung in der Zeitableitung, aber zweiter Ordnung in den Ortsableitungen. Sie ist daher nicht Lorentzinvariant.

Wir suchen nun eine Lorentzinvariante Gleichung für ein relativistisches freies Spin-0 Teilchen. In der klassischen speziellen Relativitätstheorie gilt für ein relativistisches Teilchen

$$E^2 = c^2 \vec{p}^2 + c^4 m^2.$$

Dies legt nahe, in der relativistischen Quantenmechanik die Operatorengleichung

$$\hat{H}^2 = c^2 \hat{\vec{p}}^2 + c^4 m^2$$

zu betrachten und diese auf eine Wellenfunktion anzuwenden. Mit den Substitutionen $\hat{H} \rightarrow i\hbar \partial/\partial t$ und $\hat{\vec{p}} \rightarrow \hbar/i \vec{\nabla}$ erhalten wir dann

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} |\Psi\rangle = (-c^2 \hbar^2 \Delta + c^4 m^2) |\Psi\rangle.$$

Formen wir diese Gleichung noch um, so ergibt sich

$$\left(\frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} - \Delta + \frac{c^2 m^2}{\hbar^2} \right) |\Psi\rangle = 0.$$

Mit der Definition des d'Alembert-Operators

$$\square = \frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} - \Delta = \frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \partial_\mu \partial^\mu$$

erhalten wir

$$\left(\square + \frac{c^2 m^2}{\hbar^2} \right) |\Psi\rangle = 0.$$

Diese Gleichung ist Lorentzinvariant und wird als **Klein-Gordon-Gleichung** bezeichnet. Sie beschreibt in der relativistischen Quantenmechanik ein freies Teilchen mit Masse m und Spin 0.

Bemerkung: Es ist üblich, $\hbar = c = 1$ zu setzen, dann vereinfacht sich die Klein-Gordon-Gleichung zu

$$(\square + m^2) |\Psi\rangle = 0.$$

4.1.1 Teilchen und Antiteilchen

Betrachten wir nun Lösungen der Klein-Gordon-Gleichung. Wir setzen zunächst

$$E_{\vec{p}} = +\sqrt{c^2 \vec{p}^2 + c^4 m^2}$$

Betrachten wir $E_{\vec{p}}$ als Funktion von \vec{p} , so hängt $E_{\vec{p}}$ nur vom Betrag $|\vec{p}|$ ab, aber nicht von der Richtung des Impulses \vec{p} . Insbesondere ist $E_{-\vec{p}} = E_{\vec{p}}$. Man verifiziert leicht, daß

$$|\Psi_1\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{\vec{p}} t - \vec{p} \cdot \vec{x})} \quad \text{und} \quad |\Psi_2\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(-E_{\vec{p}} t + \vec{p} \cdot \vec{x})} = e^{+\frac{i}{\hbar}(E_{\vec{p}} t - \vec{p} \cdot \vec{x})}$$

Lösungen der Klein-Gordon-Gleichung sind:

$$\begin{aligned} \left(\square + \frac{c^2 m^2}{\hbar^2}\right) |\psi_1\rangle &= \left(\frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} - \Delta + \frac{c^2 m^2}{\hbar^2}\right) e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{\vec{p}} t - \vec{p} \cdot \vec{x})} = \frac{1}{\hbar^2} \left(-\frac{E_{\vec{p}}^2}{c^2} + \vec{p}^2 + c^2 m^2\right) |\psi_1\rangle \\ &= 0, \\ \left(\square + \frac{c^2 m^2}{\hbar^2}\right) |\psi_2\rangle &= \left(\frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} - \Delta + \frac{c^2 m^2}{\hbar^2}\right) e^{+\frac{i}{\hbar}(E_{\vec{p}} t - \vec{p} \cdot \vec{x})} = \frac{1}{\hbar^2} \left(-\frac{E_{\vec{p}}^2}{c^2} + \vec{p}^2 + c^2 m^2\right) |\psi_2\rangle \\ &= 0. \end{aligned}$$

Die Lösung $|\psi_1\rangle$ beschreibt eine ebene Welle, die sich in Richtung \vec{p} ausbreitet. Diese Lösung haben wir erwartet. Wir bemerken noch, daß die Lösung $|\psi_1\rangle$ eine positive Energie besitzt.

Gegenüber der nicht-relativistischen Quantenmechanik haben wir in der relativistischen Quantenmechanik durch die Verwendung des Operator \hat{H}^2 eine zusätzliche Lösung $|\psi_2\rangle$ hinzubekommen. Diese Lösung hat eine negative Energie. Wir bezeichnen diese Lösung als **Antiteilchenlösung**. Wir können $|\psi_2\rangle$ entweder als eine ebene Welle mit negativer Energie interpretieren, die sich in Richtung \vec{p} im Laufe der Zeit t ausbreitet. Alternativ können wir auch $|\psi_2\rangle$ auch als eine ebene Welle mit positiver Energie interpretieren, die in Richtung $-\vec{p}$ rückwärts in der Zeit t läuft:

$$e^{+\frac{i}{\hbar}(E_{\vec{p}} t - \vec{p} \cdot \vec{x})} = e^{-\frac{i}{\hbar}[E_{\vec{p}}(-t) - (-\vec{p}) \cdot \vec{x}]}.$$

Wir fassen zusammen: Die Klein-Gordon-Gleichung besitzt zu gegebenen Impuls \vec{p} zwei Lösungen, die als **Teilchen** und **Antiteilchen** interpretiert werden.

4.1.2 Die Viererstromdichte für Spin-0 Teilchen

Wir betrachten noch die Änderungen in der Wahrscheinlichkeitsinterpretation. Wir verwenden nun die Notation $|\psi\rangle = \psi(\vec{x}, t)$. In der nicht-relativistischen Quantenmechanik war die Wahrscheinlichkeitsdichte durch

$$\rho(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}, t)^* \psi(\vec{x}, t)$$

definiert, und die Wahrscheinlichkeitsstromdichte durch

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left[\psi(\vec{x}, t)^* \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t) - \left(\vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t)^* \right) \psi(\vec{x}, t) \right]$$

definiert. Diese Größen erfüllen die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) = 0.$$

In der relativistischen Quantenmechanik liegt es nun nahe, eine **Viererstromdichte** durch

$$j^\mu = \frac{i\hbar}{2m} [\psi^* \partial^\mu \psi - (\partial^\mu \psi^*) \psi]$$

zu definieren. Mit $\partial^\mu = (\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\vec{\nabla})$ stimmen die räumlichen Komponenten mit der nicht-relativistischen Version überein:

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi^* (-\vec{\nabla}) \psi - (-\vec{\nabla} \psi^*) \psi \right] = \frac{\hbar}{2mi} \left[\psi^* \vec{\nabla} \psi - (\vec{\nabla} \psi^*) \psi \right].$$

Diese Viererstromdichte ist erhalten. Hierzu bemerken wir zuerst, daß mit ψ auch die komplex-konjugierte Wellenfunktion ψ^* die Klein-Gordon-Gleichung erfüllt:

$$\left(\square + \frac{c^2 m^2}{\hbar^2} \right) \psi(\vec{x}, t)^* = 0.$$

Dann ist

$$\begin{aligned} \partial_\mu j^\mu &= \frac{i\hbar}{2m} \left[(\partial_\mu \psi^*) (\partial^\mu \psi) + \psi^* \square \psi - (\square \psi^*) \psi - (\partial^\mu \psi^*) (\partial_\mu \psi) \right] \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi^* \square \psi - (\square \psi^*) \psi \right] = \frac{i\hbar}{2m} \frac{c^2 m^2}{\hbar^2} \left[-\psi^* \psi + \psi^* \psi \right] \\ &= 0. \end{aligned}$$

Allerdings können wir j^0/c nicht als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretieren:

$$\rho = \frac{1}{c} j^0 = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left[\psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi - \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right) \psi \right].$$

Diese Größe ist nicht positiv definit. Diese sieht man leicht wie folgt: ψ ist Lösung einer Differentialgleichung zweiter Ordnung. Eine Lösung wird durch die Angabe der Randbedingungen

$$\psi(\vec{x}, t_0), \quad \left. \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) \right|_{t_0}$$

spezifiziert. Diese sind frei wählbar. Daher kann ρ jedes Vorzeichen annehmen.

Die korrekte Interpretation in der relativistischen Quantenmechanik ist wie folgt: wir bezeichnen mit q die Ladung eines Teilchens. Dann gibt $q\rho$ die **Ladungsdichte** eines Teilchens an. Die Ladungsdichte kann beide Vorzeichen annehmen, eine negative Ladungsdichte entspricht einem negativ geladenen Teilchen. Wir sehen auch, daß Teilchen und Antiteilchen entgegengesetzte Ladungen haben. Die Ladungen ergeben sich aus

$$q \int d^3x \rho(\vec{x}, t) = \frac{i\hbar q}{2mc^2} \int d^3x \left[\psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi - \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right) \psi \right].$$

Die Zeitableitung angewandt auf ψ ergibt $-iE/\hbar$ für ein Teilchen und $+iE/\hbar$ für ein Antiteilchen.

Für reelle Wellenfunktionen ist $\psi^* = \psi$ und daher

$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left[\psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi - \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right) \psi \right] = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left[\psi \frac{\partial}{\partial t} \psi - \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi \right) \psi \right] = 0.$$

Für geladene Teilchen ist daher notwendigerweise $\psi^* \neq \psi$, nur für neutrale Teilchen besteht die Möglichkeit $\psi^* = \psi$.

4.1.3 Der nicht-relativistische Grenzfall

Wir betrachten noch, wie man den nicht-relativistischen Grenzfall aus der Klein-Gordon-Gleichung erhält. Wir beginnen mit der Klein-Gordon-Gleichung, die wir wie folgt schreiben:

$$\frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} \Psi(x) = \left(\Delta - \frac{c^2 m^2}{\hbar^2} \right) \Psi(x).$$

Dies ist eine Differentialgleichung zweiter Ordnung in der Variablen t . Wir können sie auch als ein System von zwei Differentialgleichungen erster Ordnung in der Variablen t schreiben:

$$\frac{\partial}{c \partial t} \begin{pmatrix} \Psi \\ \frac{1}{c} \dot{\Psi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \Delta - \frac{c^2 m^2}{\hbar^2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi \\ \frac{1}{c} \dot{\Psi} \end{pmatrix}$$

Wir ändern nun die Variablen wie folgt:

$$\phi = \frac{1}{2} \left(\Psi + \frac{i\hbar}{mc^2} \dot{\Psi} \right), \quad \chi = \frac{1}{2} \left(\Psi - \frac{i\hbar}{mc^2} \dot{\Psi} \right).$$

Diese Transformation geht auf Foldy und Wouthuysen zurück. Foldy und Wouthuysen haben eine solche Transformation erstmalig verwendet, um für ein Spin-1/2-Teilchen den nicht-relativistischen Grenzfall aus der Dirac-Gleichung herzuleiten. Der Grundgedanke dieser Transformation läßt sich aber bereits im Spin-0 Fall anhand der Klein-Gordon-Gleichung erklären. Die Idee ist die folgende: Wir möchten ein Teilchen im nicht-relativistischen Grenzfall beschreiben. Für die Energie gilt daher

$$0 \leq E_{\vec{p}} - mc^2 \ll 2mc^2.$$

Wir suchen daher eine effektive Theorie, die nur die relevanten Freiheitsgrade beibehält und irrelevante Freiheitsgrade vernachlässigt. Nehmen wir an, $\Psi(x)$ sei durch eine ebene Welle gegeben:

$$\Psi(x) = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{\vec{p}} t - \vec{p} \cdot \vec{x})}, \quad E_{\vec{p}} = +\sqrt{c^2 \vec{p}^2 + c^4 m^2}.$$

Wir betrachten nun die Funktion $\chi(x)$. Im nicht-relativistischen Grenzfall verschwindet $\chi(x)$:

$$\chi(x) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{E}{mc^2} \right) e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{\vec{p}} t - \vec{p} \cdot \vec{x})} = \frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{\vec{v}^2}{c^2}} \right) e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{\vec{p}} t - \vec{p} \cdot \vec{x})} = O\left(\frac{v^2}{c^2}\right).$$

$\chi(x)$ stellt daher im nicht-relativistischen Grenzfall einen irrelevanten Freiheitsgrad dar.

Wir können das Differentialgleichungssystem auf $\phi(x)$ und $\chi(x)$ umschreiben. Wir finden

$$\frac{\partial}{c \partial t} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{i\hbar}{2mc} \Delta - \frac{imc}{\hbar} & \frac{i\hbar}{2mc} \Delta \\ -\frac{i\hbar}{2mc} \Delta & -\frac{i\hbar}{2mc} \Delta + \frac{imc}{\hbar} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}.$$

Vernachlässigen wir nun $\chi(x)$, so erhalten wir eine Differentialgleichung erster Ordnung in der Variablen t für $\phi(x)$:

$$\frac{\partial}{c \partial t} \phi(x) = \left(\frac{i\hbar}{2mc} \Delta - \frac{imc}{\hbar} \right) \phi(x),$$

bzw.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + mc^2 \right) \phi(x).$$

Dies entspricht einer nicht-relativistischen Schrödingergleichung mit

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(x) = \hat{H} \phi(x), \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + mc^2.$$

4.2 Die Dirac-Gleichung

Wir wollen nun die Wellengleichung für relativistische Spin-1/2 Teilchen aufstellen. Wir suchen eine Gleichung, die Lorentz-kovariant ist, d.h. in allen Koordinatensystemen die gleiche Form hat.

Während die nicht-relativistische Schrödingergleichung erster Ordnung in der Zeitableitung ist, ist die Klein-Gordon-Gleichung zweiter Ordnung in der Zeitableitung. Der Ansatz von Dirac bestand darin, zunächst eine Lorentz-kovariante Gleichung erster Ordnung in der Zeitableitung zu finden. Aufgrund der Lorentz-Kovarianz muß diese Gleichung dann auch erster Ordnung in allen Ortsableitungen sein. Würden höhere Ortsableitungen in einem Koordinatensystem S auftreten, so könnte man mit Hilfe eines Lorentz-Boosts auf ein Koordinatensystem S' transformieren, so daß in S' höhere Zeitableitungen auftreten. Dirac verwendete daher den Ansatz

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \left[\frac{\hbar c}{i} \left(\alpha_1 \frac{\partial}{\partial x^1} + \alpha_2 \frac{\partial}{\partial x^2} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial x^3} \right) + \beta mc^2 \right] |\psi\rangle.$$

Die Koeffizienten α_i können keine Zahlen sein, da dann die Gleichung unter Raumdrehungen nicht invariant wäre. Dirac betrachtete daher die Möglichkeit, daß die Koeffizienten α_i und β $N \times N$ -Matrizen sind. $|\psi\rangle$ ist dann ein N -komponentiger Vektor:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \dots \\ \psi_N \end{pmatrix}.$$

Jede dieser Komponenten sollte die Klein-Gordon-Gleichung erfüllen:

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi_k = (-c^2 \hbar^2 \Delta + c^4 m^2) \psi_k.$$

Andererseits ist

$$\begin{aligned} -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi_k &= \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 \psi_k = \left[\frac{\hbar c}{i} \left(\alpha_1 \frac{\partial}{\partial x^1} + \alpha_2 \frac{\partial}{\partial x^2} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial x^3} \right) + \beta mc^2 \right]^2 \psi_k \\ &= -\hbar^2 c^2 \sum_{i,j=1}^3 \frac{1}{2} (\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i) \frac{\partial^2 \psi_k}{\partial x^i \partial x^j} + \frac{\hbar mc^3}{i} \sum_{i=1}^3 (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) \frac{\partial \psi_k}{\partial x^i} + m^2 c^4 \beta^2 \psi_k. \end{aligned}$$

Vergleichen wir diese beiden Gleichungen, so finden wir, daß

$$\begin{aligned}\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i &= 2\delta_{ij} \mathbf{1}, \\ \alpha_i \beta + \beta \alpha_i &= 0, \\ \beta^2 &= \mathbf{1}\end{aligned}$$

gelten muß. Da

$$\hat{H} = \frac{\hbar c}{i} \left(\alpha_1 \frac{\partial}{\partial x^1} + \alpha_2 \frac{\partial}{\partial x^2} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial x^3} \right) + \beta m c^2$$

hermitisch sein soll, müssen auch α_u und β hermitische Matrizen sein:

$$\alpha_i^\dagger = \alpha_i, \quad \beta^\dagger = \beta.$$

Aus der ersten Antikommutationsrelation $\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 2\delta_{ij} \mathbf{1}$ folgt insbesondere

$$\alpha_i^2 = \mathbf{1}.$$

Keine der Matrizen α_1 , α_2 , α_3 oder β kann proportional zur Einheitsmatrix sein: Wäre dies der Fall, so folgt automatisch aus den Antikommutationsrelationen daß eine andere Matrix die Nullmatrix ist, was im Widerspruch zu

$$\alpha_i^2 = \beta^2 = \mathbf{1}$$

steht. Die letzte Zeile zeigt auch, daß α_i und β invertierbare Matrizen sind

$$\alpha_i^{-1} = \alpha_i, \quad \beta^{-1} = \beta.$$

Desweiteren sieht man, daß alle Eigenwerte der Matrizen α_i und β nur ± 1 auftreten können. Aus $\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0$ folgt

$$\alpha_i = -\beta \alpha_i \beta.$$

Nun kann man zeigen, daß die Spur der Matrizen α_i verschwindet:

$$\text{Tr } \alpha_i = \text{Tr}(\beta^2 \alpha_i) = \text{Tr}(\beta \alpha_i \beta) = -\text{Tr}(\alpha_i)$$

und daher

$$\text{Tr } \alpha_i = 0.$$

Da die Matrix α_i nur die Eigenwerte ± 1 hat, impliziert das Verschwinden der Spur, daß die Dimension N der Matrix α_i gerade sein muß.

Den Fall $N = 2$ können wir ausschließen: Hier gibt es neben der Einheitsmatrix nur drei weitere linear unabhängige hermitische Matrizen (z.B. die Pauli-Matrizen), so daß die Antikommutationsrelationen für die vier Matrizen α_1 , α_2 , α_3 und β nicht erfüllt werden können.

Betrachten wir nun den Fall $N = 4$. Hier kann man zeigen, daß beispielsweise die 4×4 -Matrizen

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

die Bedingungen erfüllen. Hierbei sind σ_1, σ_2 und σ_3 die 2×2 -Pauli-Matrizen

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

0 und 1 stehen für die 2×2 -Matrizen

$$0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad 1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Wir werden später sehen, daß es noch andere Darstellungen gibt.

Wir stellen die Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \left[\frac{\hbar c}{i} \left(\alpha_1 \frac{\partial}{\partial x^1} + \alpha_2 \frac{\partial}{\partial x^2} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial x^3} \right) + \beta mc^2 \right] |\psi\rangle$$

noch etwas um: Wir multiplizieren mit $\frac{1}{c}\beta$ von links und setzen

$$\gamma^0 = \beta, \quad \gamma^i = \beta \alpha_i, \quad i = 1, 2, 3.$$

Wir fassen $\gamma^\mu = (\gamma^0, \gamma^1, \gamma^2, \gamma^3)$ zu einem Vierervektor zusammen. Wir erhalten

$$[i\hbar (\gamma^0 \partial_0 + \gamma^1 \partial_1 + \gamma^2 \partial_2 + \gamma^3 \partial_3) - mc] |\psi\rangle = 0,$$

bzw.

$$(i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu - mc) |\psi\rangle = 0.$$

Diese Gleichung bezeichnet man als **Dirac-Gleichung**. Für die Kontraktion eines Vierervektors a_μ mit den Dirac-Matrizen γ^μ verwendet man oft die ‘‘Feynman-Slash’’-Notation:

$$\not{a} = \gamma^\mu a_\mu.$$

Man findet daher auch für die Dirac-Gleichung die Schreibweise

$$(i\hbar \not{\partial} - mc) |\psi\rangle = 0.$$

Ausgehend von den Antikommutationsrelationen für die Matrizen α_i und β können wir nun die Vertauschungsrelationen für die Matrizen γ^μ herleiten. Man findet

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} \mathbf{1},$$

bzw. etwas kürzer

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}\mathbf{1}.$$

Matrizen, die diese Vertauschungsrelationen erfüllen, erzeugen eine Algebra, die als **Clifford-Algebra** bezeichnet wird. Desweiteren findet man, daß γ^0 hermitisch ist, während die räumlichen Dirac-Matrizen γ^i anti-hermitisch sind. Die Hermitizität von γ^0 folgt unmittelbar aus der Hermitizität von β , für γ^i ergibt sich mit $i \in \{1, 2, 3\}$

$$(\gamma^i)^\dagger = (\beta\alpha_i)^\dagger = \alpha_i^\dagger\beta^\dagger = \alpha_i\beta = -\beta\alpha_i = -\gamma^i.$$

Desweiteren definiert man

$$\gamma_5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \frac{i}{24}\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma}\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\rho\gamma^\sigma,$$

wobei $\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma}$ der vollständig anti-symmetrische Tensor mit $\epsilon_{0123} = +1$ ist. Für γ_5 gilt

$$\{\gamma^\mu, \gamma_5\} = 0.$$

Mit der Wahl

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

findet man

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Diese Darstellung bezeichnet man als die **Standarddarstellung** oder **Dirac-Darstellung**.

Eine alternative Darstellung ist die **Weyl-Darstellung**. In dieser Darstellung sind die Gamma-Matrizen gegeben durch

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_5 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Man verifiziert leicht, daß diese Gamma-Matrizen ebenfalls die Antikommutationsrelationen erfüllen. Die Weyl-Darstellung ist besonders für masselose Teilchen nützlich.

Eine weitere Darstellung ist die **Majorana-Darstellung**. Diese ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \gamma^0 &= i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \gamma^1 &= i \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \gamma^2 &= i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \gamma^3 &= i \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Die Matrix γ_5 ist in der Majorana-Darstellung gegeben durch

$$\gamma_5 = i \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Die Majorana-Darstellung ist vor allem für numerische Rechnungen mittels eines Computers interessant. Da in dieser Darstellung alle Gamma-Matrizen rein imaginär sind, kann ein Großteil der Arithmetik mit reellen Zahlen ausgeführt werden, nur am Schluß wird mit der korrekten Potenz von i multipliziert. Dies ist deutlich schneller als komplexe Arithmetik.

Man kann zeigen, daß alle Darstellungen der Gamma-Matrizen aus einer gegebenen Darstellung mittels unitären Transformationen

$$\tilde{\gamma}^\mu = U \gamma^\mu U^\dagger, \quad U^{-1} = U^\dagger$$

hervorgehen.

4.2.1 Die Viererstromdichte für Spin-1/2 Teilchen

In diesen Abschnitt verwenden wir die Notation $\psi = |\psi\rangle$. Man bezeichnet

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

als einen **Dirac-Spinor**. Der hermitisch konjugierte Spinor ist

$$\psi^\dagger = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*).$$

Für ein Spin-1/2 Teilchen definieren wir die Viererstromdichte

$$j^\mu = (c\rho, \vec{j})$$

mit $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ durch

$$\begin{aligned} \rho &= \psi^\dagger \psi, \\ \vec{j} &= c \psi^\dagger \vec{\alpha} \psi. \end{aligned}$$

Diese Viererstromdichte erfüllt die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0.$$

Dies läßt sich leicht zeigen: Es ist

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = \psi^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi \right) + \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi^\dagger \right) \psi$$

und

$$\begin{aligned} \psi^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi \right) &= \psi^\dagger \left(-c\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} - i\beta \frac{mc^2}{\hbar} \right) \psi, \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi^\dagger \right) \psi &= \psi^\dagger \left(-c\vec{\alpha} \cdot \overleftarrow{\nabla} + i\beta \frac{mc^2}{\hbar} \right) \psi. \end{aligned}$$

Somit ergibt sich

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = -\vec{\nabla} \cdot (c\psi^\dagger \vec{\alpha} \psi) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}.$$

Wir möchten nun den Viererstrom j^μ nicht durch die Matrizen α_i , sondern durch die Gamma-Matrizen γ^μ ausdrücken. Es ist

$$\begin{aligned} j^0 &= c\rho = c\psi^\dagger \psi = c\psi^\dagger \gamma^0 \gamma^0 \psi = c(\psi^\dagger \gamma^0) \gamma^0 \psi, \\ j^i &= c\psi^\dagger \alpha_i \psi = c\psi^\dagger \gamma^0 \gamma^0 \alpha_i \psi = c(\psi^\dagger \gamma^0) \gamma^i \psi. \end{aligned}$$

Wir sehen, daß hierbei immer die Kombination $\psi^\dagger \gamma^0$ auftritt und setzen

$$\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0.$$

Man bezeichnet $\bar{\psi}$ als den **adjungierten Spinor**. Somit erhalten wir für die Viererstromdichte

$$j^\mu = c\bar{\psi} \gamma^\mu \psi$$

und es gilt

$$\partial_\mu j^\mu = 0.$$

Für den adjungierten Spinor gilt die Gleichung

$$\bar{\psi} \left(-i\hbar \overleftarrow{\partial}_\mu \gamma^\mu - mc \right) = 0.$$

Dies sieht man wie folgt: Man zeigt zuerst

$$\gamma^0 (\gamma^\mu)^\dagger \gamma^0 = \gamma^\mu.$$

Für $\mu = 0$ ist

$$\gamma^0 (\gamma^0)^\dagger \gamma^0 = \gamma^0 \gamma^0 \gamma^0 = \gamma^0,$$

für $\mu = i$ gilt

$$\gamma^0 (\gamma^\mu)^\dagger \gamma^0 = \beta (\beta \alpha_i)^\dagger \beta = \beta \alpha_i \beta \beta = \beta \alpha_i = \gamma^i.$$

Wir multiplizieren die Dirac-Gleichung mit γ^0 von links und betrachten dann das hermitisch Konjugierte:

$$\psi^\dagger \left(-i\hbar (\gamma^\mu)^\dagger \overleftarrow{\partial}_\mu - mc \right) \gamma^0 = 0.$$

Wir betrachten die linke Seite:

$$\begin{aligned} \psi^\dagger \left(-i\hbar (\gamma^\mu)^\dagger \overleftarrow{\partial}_\mu - mc \right) \gamma^0 &= \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^0 \left(-i\hbar (\gamma^\mu)^\dagger \overleftarrow{\partial}_\mu - mc \right) \gamma^0 \\ &= \overline{\psi} \left(-i\hbar \gamma^0 (\gamma^\mu)^\dagger \gamma^0 \overleftarrow{\partial}_\mu - mc \right) \\ &= \overline{\psi} \left(-i\hbar \gamma^\mu \overleftarrow{\partial}_\mu - mc \right). \end{aligned}$$

4.2.2 Lösungen der Dirac-Gleichung

Wir betrachten nun Lösungen der Dirac-Gleichung

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

Der Spinor ψ hat vier Komponenten und wir erwarten vier Lösungen, die sich in zwei Lösungen mit positiver Energie (Teilchen, z.B. Elektronen) und negativer Energie (Antiteilchen, z.B. Positronen) entsprechen. Wir erwarten zwei Lösungen mit positiver Energie, die den beiden Spineinstellmöglichkeiten \uparrow und \downarrow entsprechen. Für die beiden Spineinstellmöglichkeiten verwenden wir auch die Notation “+” und “-”. Ebenso erwarten wir zwei Lösungen mit negativer Energie, die ebenfalls den beiden Spineinstellmöglichkeiten \uparrow und \downarrow entsprechen.

Im folgenden sei wieder

$$E_{\vec{p}} = +\sqrt{c^2 \vec{p}^2 + c^4 m^2}.$$

Wir setzen

$$p^\mu = \left(\frac{E_{\vec{p}}}{c}, \vec{p} \right),$$

so daß

$$p \cdot x = p_\mu x^\mu = E_{\vec{p}} t - \vec{p} \cdot \vec{x}.$$

Für Lösungen positiver Energie machen wir den Ansatz

$$\Psi(x) = e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot x} u(p, \lambda),$$

wobei p den Impuls und λ die Spinquantenzahl bezeichnet. Für $u(p, \lambda)$ gilt dann

$$(\not{p} - mc) u(p, \lambda) = 0.$$

Für den adjungierten Spinor gilt dann

$$\bar{\Psi}(x) = \bar{u}(p, \lambda) e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x},$$

wobei $\bar{u}(p, \lambda)$ die Gleichung

$$\bar{u}(p, \lambda) (\not{p} - mc) = 0$$

erfüllt.

Für Lösungen negativer Energie machen wir den Ansatz

$$\Psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x} v(p, \lambda),$$

Für $v(p, \lambda)$ gilt dann

$$(\not{p} + mc) v(p, \lambda) = 0.$$

Für den adjungierten Spinor gilt dann

$$\bar{\Psi}(x) = \bar{v}(p, \lambda) e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot x},$$

wobei $\bar{v}(p, \lambda)$ die Gleichung

$$\bar{v}(p, \lambda) (\not{p} + mc) = 0$$

erfüllt.

Fassen wir kurz zusammen: Wir suchen Spinoren $u(p, \lambda)$, $\bar{u}(p, \lambda)$, $v(p, \lambda)$, $\bar{v}(p, \lambda)$, die die Gleichungen

$$\begin{aligned} (\not{p} - mc) u(p, \lambda) &= 0, & \bar{u}(p, \lambda) (\not{p} - mc) &= 0, \\ (\not{p} + mc) v(p, \lambda) &= 0, & \bar{v}(p, \lambda) (\not{p} + mc) &= 0 \end{aligned}$$

erfüllen. Darüberhinaus fordern wir noch, daß die unabhängigen Lösungen die Orthogonalitätsbedingungen

$$\begin{aligned} \bar{u}(p, \bar{\lambda}) u(p, \lambda) &= 2mc \delta_{\bar{\lambda}\lambda}, \\ \bar{v}(p, \bar{\lambda}) v(p, \lambda) &= -2mc \delta_{\bar{\lambda}\lambda}, \\ \bar{u}(p, \bar{\lambda}) v(p, \lambda) &= \bar{v}(\bar{\lambda}) u(\lambda) = 0, \end{aligned}$$

und die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_{\lambda} u(p, \lambda) \bar{u}(p, \lambda) = \not{p} + mc, \quad \sum_{\lambda} v(p, \lambda) \bar{v}(p, \lambda) = \not{p} - mc$$

erfüllen sollen.

Masseloser Fall: Wir betrachten zunächst den Fall masseloser Teilchen ($m = 0$). In der Hochenergiephysik vernachlässigt man oft bei hohen (Beschleuniger-) Energien die Ruhmassen leichter Elementarteilchen.

Für masselose Teilchen reduzieren sich die Gleichungen auf

$$\begin{aligned} \not{p}u(p, \lambda) &= 0, & \bar{u}(p, \lambda) \not{p} &= 0, \\ \not{p}v(p, \lambda) &= 0, & \bar{v}(p, \lambda) \not{p} &= 0, \end{aligned}$$

es genügt daher, die Gleichungen für $u(p, \lambda)$ und $\bar{u}(p, \lambda)$ zu lösen.

Wir verwenden die Weyl-Darstellung. In der Weyl-Darstellung ist

$$\not{p} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & p^0 + p^3 & p^1 - ip^2 \\ 0 & 0 & p^1 + ip^2 & p^0 - p^3 \\ p^0 - p^3 & -p^1 - ip^2 & 0 & 0 \\ -p^1 + ip^2 & p^0 + p^3 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Es bietet sich an, zum einen Lichtkegelkoordinaten, definiert durch

$$p^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(p^0 + p^3), \quad p^- = \frac{1}{\sqrt{2}}(p^0 - p^3), \quad p^\perp = \frac{1}{\sqrt{2}}(p^1 + ip^2), \quad p^{\perp*} = \frac{1}{\sqrt{2}}(p^1 - ip^2),$$

zu verwenden. Für masslose Teilche ist $p_\mu p^\mu = 0$, in Lichtkegelkoordinaten ist dies äquivalent zu

$$p^+ p^- = p^\perp p^{\perp*}.$$

Zum anderen führen wir die vier-dimensionalen σ^μ -Matrizen ein:

$$\sigma^\mu = (1, -\vec{\sigma}), \quad \bar{\sigma}^\mu = (1, \vec{\sigma}).$$

In der Weyl-Darstellung ist

$$\gamma^\mu = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^\mu \\ \bar{\sigma}^\mu & 0 \end{pmatrix},$$

und somit

$$\not{p} = \begin{pmatrix} 0 & p_\mu \sigma^\mu \\ p_\mu \bar{\sigma}^\mu & 0 \end{pmatrix}.$$

Mit Hilfe der Lichtkegelkoordinaten ergibt sich

$$p_\mu \sigma^\mu = \sqrt{2} \begin{pmatrix} p^+ & p^{\perp*} \\ p^\perp & p^- \end{pmatrix}, \quad p_\mu \bar{\sigma}^\mu = \sqrt{2} \begin{pmatrix} p^- & -p^{\perp*} \\ -p^\perp & p^+ \end{pmatrix}.$$

Es bietet sich auch an, den vier-komponentigen Dirac-Spinor $u(p, \lambda)$ wie folgt zu schreiben:

$$u(p, +) = \begin{pmatrix} |p+\rangle \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u(p, -) = \begin{pmatrix} 0 \\ |p-\rangle \end{pmatrix},$$

wobei $|p+\rangle$ und $|p-\rangle$ jeweils zwei-komponentige Vektoren sind, die als **Weyl-Spinoren** bezeichnet werden. Ebenso setzt man

$$\bar{u}(p, +) = (0, \langle p+|), \quad \bar{u}(p, -) = (\langle p-|, 0).$$

An dieser Stelle soll noch auf eine alternative Notation mit hochgestellten/tiefgestellten gepunkteten/ungepunkteten Indizes, die auf Penrose zurückgeht, verwiesen werden. In der Literatur findet man auch die Notation

$$\begin{aligned} p_A &= |p+\rangle, & p_{\dot{A}} &= \langle p+|, \\ p^{\dot{A}} &= |p-\rangle, & p^A &= \langle p-|. \end{aligned}$$

wobei $A, \dot{A} \in \{1, 2\}$.

Unsere Gleichungen reduzieren sich auf

$$\begin{aligned} p_\mu \bar{\sigma}^\mu |p+\rangle &= 0, & p_\mu \sigma^\mu |p-\rangle &= 0, \\ \langle p+| p_\mu \bar{\sigma}^\mu &= 0, & \langle p-| p_\mu \sigma^\mu &= 0. \end{aligned}$$

Explizit haben wir für die Ket-Spinoren

$$\begin{pmatrix} p^- & -p^{\perp*} \\ -p^\perp & p^+ \end{pmatrix} |p+\rangle = 0, \quad \begin{pmatrix} p^+ & p^{\perp*} \\ p^\perp & p^- \end{pmatrix} |p-\rangle = 0.$$

Wir suchen also Eigenvektoren zum Eigenwert 0. Dies ist ein Problem der linearen Algebra. Als Lösungen für die Ket-Spinoren findet man

$$|p+\rangle = p_A = c_1 \begin{pmatrix} p^{\perp*} \\ p^- \end{pmatrix}, \quad |p-\rangle = p^{\dot{A}} = c_2 \begin{pmatrix} p^- \\ -p^\perp \end{pmatrix},$$

wobei c_1 und c_2 zwei zunächst noch unbestimmte Konstanten sind. Ebenso findet man für die Bra-Spinoren

$$\langle p+| = p_{\dot{A}} = c_3 (p^\perp, p^-), \quad \langle p-| = p^A = c_4 (p^-, -p^{\perp*}).$$

Hierbei sind c_3 und c_4 zwei weitere zunächst unbestimmte Konstanten. Wir reduzieren die Anzahl der unbestimmten Konstanten durch Zusatzforderungen. Zum einen fordern wir Relationen zwischen Weyl-Spinoren mit hochgestellten und tiefgestellten Indizes. Hierzu führen wir den zwei-dimensionalen antisymmetrischen Tensor

$$\epsilon_{AB} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \epsilon_{BA} = -\epsilon_{AB}$$

ein und setzen

$$\epsilon^{AB} = \epsilon^{\dot{A}\dot{B}} = \epsilon_{AB} = \epsilon_{\dot{A}\dot{B}}.$$

Bemerkung: Diese Definition impliziert

$$\epsilon^{AC} \epsilon_{BC} = \delta_B^A, \quad \epsilon^{\dot{A}\dot{C}} \epsilon_{\dot{B}\dot{C}} = \delta_{\dot{B}}^{\dot{A}}.$$

Wir fordern die folgenden Relationen zwischen Weyl-Spinoren mit hochgestellten und tiefgestellten Indizes:

$$\begin{aligned} p^A &= \epsilon^{AB} p_B, & p^{\dot{A}} &= \epsilon^{\dot{A}\dot{B}} p_{\dot{B}}, \\ p_{\dot{B}} &= p^{\dot{A}} \epsilon_{\dot{A}\dot{B}}, & p_B &= p^A \epsilon_{AB}. \end{aligned}$$

Bemerkung: Ein Index wird hochgezogen durch Multiplikation mit ϵ^{AB} bzw. $\epsilon^{\dot{A}\dot{B}}$ von links. Ein Index wird runtergezogen durch Multiplikation mit ϵ_{AB} bzw. $\epsilon_{\dot{A}\dot{B}}$ von rechts.

Fordert man diese Relationen, so folgt

$$c_1 = c_4, \quad c_2 = c_3.$$

Zusätzlich normieren wir die Weyl-Spinoren so, daß

$$\langle p \pm | \gamma^\mu | p \pm \rangle = 2p^\mu$$

gilt. Dies impliziert

$$c_1 c_3 = \frac{\sqrt{2}}{p^-}, \quad c_2 c_4 = \frac{\sqrt{2}}{p^-}.$$

Insgesamt ergibt sich, daß die Spinoren nur bis auf eine Skalierung

$$p_A \rightarrow \lambda p_A, \quad p_{\dot{A}} \rightarrow \frac{1}{\lambda} p_{\dot{A}}$$

bestimmt sind. Diese Skalierungsfreiheit bezeichnet man im Englischen auch als **little group scaling**.

Die allgemeinen Lösungen für die masselosen Weyl-Spinoren sind daher

$$\begin{aligned} |p+\rangle &= p_A = \frac{\lambda_p 2^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{p^-}} \begin{pmatrix} p^{\perp*} \\ p^- \end{pmatrix}, & |p-\rangle &= p^{\dot{A}} = \frac{2^{\frac{1}{4}}}{\lambda_p \sqrt{p^-}} \begin{pmatrix} p^- \\ -p^\perp \end{pmatrix}, \\ \langle p+| &= p_{\dot{A}} = \frac{2^{\frac{1}{4}}}{\lambda_p \sqrt{p^-}} (p^\perp, p^-), & \langle p-| &= p^A = \frac{\lambda_p 2^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{p^-}} (p^-, -p^{\perp*}). \end{aligned}$$

Die Standardwahl für λ_p ist $\lambda_p = 1$.

Bemerkung: In der Herleitung der Lösungen für Weyl-Spinoren haben wir nicht die Relation

$$\bar{u}(p, \lambda) = u(p, \lambda)^\dagger \gamma^0$$

bzw. die hierzu äquivalenten Beziehungen

$$p_A^\dagger = p_{\dot{A}}, \quad p^{A\dagger} = p^{\dot{A}}$$

verwendet. Für reelle Impulse (p^0, p^1, p^2, p^3) und $\lambda_p = e^{i\varphi}$ ($\varphi \in \mathbb{R}$) eine Phase sieht man leicht, daß diese Beziehungen erfüllt sind.

Wir wählen von nun an $\lambda_p = 1$. Wir definieren **Spinorprodukte** durch

$$\begin{aligned} \langle pq \rangle &= \langle p- | q+ \rangle = p^A q_A = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{p^-} \sqrt{q^-}} (p^- q^{\perp*} - q^- p^{\perp*}), \\ [qp] &= \langle q+ | p- \rangle = q_{\dot{A}} p^{\dot{A}} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{p^-} \sqrt{q^-}} (p^- q^\perp - q^- p^\perp), \end{aligned}$$

wobei wir im letzten Ausdruck $\lambda_p = \lambda_q = 1$ verwendet haben. Es gilt

$$\langle pq \rangle [qp] = 2pq.$$

Die Spinorprodukte sind antisymmetrisch:

$$\langle qp \rangle = -\langle pq \rangle, \quad [pq] = -[qp].$$

Falls p^μ und q^μ reell sind, gilt

$$[qp] = \langle pq \rangle^* \text{sign}(p^0) \text{sign}(q^0).$$

Massiver Fall: Wir betrachten nun den Fall $m \neq 0$. Zunächst eine Vorbemerkung zur Notation: Die zweikomponentigen Weyl-Spinoren definieren eindeutig Dirac-Spinoren durch die folgende Vorschrift:

$$\begin{aligned} |p+\rangle &\rightarrow \begin{pmatrix} |p+\rangle \\ 0 \end{pmatrix}, & \langle p+| &\rightarrow (0, \langle p+|), \\ |p-\rangle &\rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ |p-\rangle \end{pmatrix}, & \langle p-| &\rightarrow (\langle p-|, 0). \end{aligned}$$

Wir verwenden daher die Notation $|p\pm\rangle$ und $\langle p\pm|$ auch für vierkomponentige Dirac-Spinoren.

Es sei nun p ein Vierervektor mit $p^2 = m^2$ und q ein beliebiger lichtartiger Vierervektor (d.h. $q^2 = 0$). Mit Hilfe von q können wir zu p einen lichtartigen Vierervektor p^b assoziieren:

$$p^b = p - \frac{p^2}{2p \cdot q} q.$$

Man überzeugt sich leicht, daß p^b lichtartig ist:

$$(p^b)^2 = \left(p - \frac{p^2}{2p \cdot q} q \right) \left(p - \frac{p^2}{2p \cdot q} q \right) = p^2 - \frac{p^2}{2p \cdot q} (2p \cdot q) = 0.$$

Wir setzen

$$\begin{aligned} u(p, +) &= \frac{1}{\langle p^b + |q-\rangle} (\not{p} + mc) |q-\rangle, & v(p, -) &= \frac{1}{\langle p^b + |q-\rangle} (\not{p} - mc) |q-\rangle, \\ u(p, -) &= \frac{1}{\langle p^b - |q+\rangle} (\not{p} + mc) |q+\rangle, & v(p, +) &= \frac{1}{\langle p^b - |q+\rangle} (\not{p} - mc) |q+\rangle. \end{aligned}$$

Für die adjungierten Spinoren setzen wir

$$\begin{aligned} \bar{u}(p, +) &= \frac{1}{\langle q- | p^b + \rangle} \langle q- | (\not{p} + mc), & \bar{v}(p, -) &= \frac{1}{\langle q- | p^b + \rangle} \langle q- | (\not{p} - mc), \\ \bar{u}(p, -) &= \frac{1}{\langle q+ | p^b - \rangle} \langle q+ | (\not{p} + mc), & \bar{v}(p, +) &= \frac{1}{\langle q+ | p^b - \rangle} \langle q+ | (\not{p} - mc). \end{aligned}$$

Man überzeugt sich leicht, daß diese Spinoren die Dirac-Gleichung, die Orthogonalitätsrelationen und die Vollständigkeitsrelationen erfüllen. Darüberhinaus gilt

$$\bar{u}(p, \bar{\lambda}) \gamma^\mu u(p, \lambda) = 2p^\mu \delta_{\bar{\lambda}\lambda}, \quad \bar{v}(p, \bar{\lambda}) \gamma^\mu v(p, \lambda) = 2p^\mu \delta_{\bar{\lambda}\lambda}.$$

Im masselosen Fall reduzieren sich diese Spinoren auf

$$\begin{aligned} u(p, +) &= v(p, -) = |p+\rangle, & \bar{u}(p, +) &= \bar{v}(p, -) = \langle p+ |, \\ u(p, -) &= v(p, +) = |p-\rangle, & \bar{u}(p, -) &= \bar{v}(p, +) = \langle p- |, \end{aligned}$$

und sind unabhängig von den Referenzspinoren $|q+\rangle$ und $\langle q+ |$.

4.2.3 Kovarianz der Dirac-Gleichung

Wir betrachten nun die Eigenschaften der Dirac-Gleichung unter Lorentztransformationen. Wir möchten zeigen, daß die Dirac-Gleichung Lorentzinvariant ist. Hierzu betrachten wir zwei Inertialsysteme S und S' , die durch eine Lorentztransformation verknüpft sind:

$$x' = \Lambda x.$$

Im System S sei eine Wellenfunktion $\psi(x)$ gegeben, die die Dirac-Gleichung

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

erfüllt. Für den Beweis der Lorentz-Kovarianz müssen wir

- (i) eine Vorschrift angeben, die es uns erlaubt $\psi'(x')$ aus $\psi(x)$ zu berechnen,
- (ii) zeigen, daß $\psi'(x')$ die Gleichung

$$\left(i\hbar\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x'^\mu} - mc \right) \psi'(x') = 0$$

erfüllt.

Die Matrizen γ'^μ erfüllen hierbei die gleichen Relationen wie die Matrizen γ^μ , sie stehen daher mittels einer unitären Transformation mit den Matrizen γ^μ in Verbindung:

$$\gamma'^\mu = U\gamma^\mu U^\dagger.$$

Wir können daher annehmen, daß im System S und S' die gleich Darstellung der Gamma-Matrizen gewählt wurde. Sollte dies nicht der Fall sein, führt die Transformation

$$\psi'(x) = U\psi(x), \quad \gamma'^\mu = U\gamma^\mu U^\dagger$$

die eine Darstellung in die andere über.

Wir setzen von nun an $\gamma'^\mu = \gamma^\mu$ voraus. Wir suchen eine Transformation $S(\Lambda)$, die linear in ψ und ψ' ist:

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

Hierbei ist $S(\Lambda)$ eine 4×4 -Matrix, die auf die Komponenten von $\psi(x)$ wirkt. Für die Umkehrtransformation gilt zum einen

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

zum anderen

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

daher folgt

$$S^{-1}(\Lambda) = S(\Lambda^{-1}).$$

Die wesentliche Aufgabe besteht darin, $S(\Lambda)$ zu finden. Ist $S(\Lambda)$ bekannt, so folgt mit

$$\frac{\partial}{\partial x'^\mu} = \frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu} \frac{\partial}{\partial x^\nu} = (\Lambda^{-1})^\nu{}_\mu \frac{\partial}{\partial x^\nu}$$

die Beziehung

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

Die Dirac-Gleichung ist Lorentz-kovariant, falls

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

bzw. (durch Umstellung und Umbenennung)

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

gilt.

Bemerkung: $S(\Lambda)$ ist eine 4×4 -Matrix, die auf die Dirac-Indices wirkt, Λ ist eine 4×4 -Matrix, die auf die Lorentz-Indices wirkt.

Wir bestimmen nun $S(\Lambda)$. Wir betrachten zunächst infinitesimale Lorentztransformationen der eigentlichen orthochronen Lorentzgruppe:

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \delta^\mu{}_\nu - i\alpha\omega^\mu{}_\nu,$$

mit infinitesimalen α und antisymmetrischen $\omega^{\mu\nu}$:

$$\omega^{\nu\mu} = -\omega^{\mu\nu}.$$

Aufgrund der Antisymmetrie gibt es sechs unabhängige $\omega^{\mu\nu}$, die den drei Boosts und den drei räumlichen Rotationen entsprechen. Man bezeichnet die $\omega^{\mu\nu}$ auch als **Generatoren** der Lie-Algebra der Lorentzgruppe. Wir entwickeln $S(\Lambda)$ und $S^{-1}(\Lambda)$ in eine Potenzreihe in α :

$$S(\Lambda) = \mathbf{1} - \frac{i}{4}\sigma_{\mu\nu}(-i\alpha)\omega^{\mu\nu} + O(\alpha^2), \quad S^{-1}(\Lambda) = \mathbf{1} + \frac{i}{4}\sigma_{\mu\nu}(-i\alpha)\omega^{\mu\nu} + O(\alpha^2).$$

In erster Ordnung in α muß gelten:

$$\omega^\mu{}_\nu\gamma^\nu = \frac{i}{4}(\sigma_{\rho\sigma}\gamma^\mu - \gamma^\mu\sigma_{\rho\sigma})\omega^{\rho\sigma},$$

bzw.

$$\omega^{\rho\sigma}g^\mu{}_\rho g_{\sigma\nu}\gamma^\nu = \frac{i}{4}(\sigma_{\rho\sigma}\gamma^\mu - \gamma^\mu\sigma_{\rho\sigma})\omega^{\rho\sigma}.$$

Die Antisymmetrie $\omega^{\nu\mu} = -\omega^{\mu\nu}$ impliziert $\sigma_{\nu\mu} = -\sigma_{\mu\nu}$. Daher folgt

$$[\gamma^\mu, \sigma_{\rho\sigma}] = 2i(g^\mu{}_\rho\gamma_\sigma - g^\mu{}_\sigma\gamma_\rho).$$

Wir suchen also 4×4 -Matrizen (mit Dirac-Indices), die diese Vertauschungsrelation erfüllen. Man verifiziert leicht, daß

$$\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma_\mu, \gamma_\nu]$$

eine Lösung ist. Fordert man zusätzlich, daß $\det S(\Lambda) = 1$ gelten soll, so impliziert dies

$$\det S(\Lambda) = 1 - \frac{\alpha}{4}\text{Tr}(\sigma_{\mu\nu})\omega^{\mu\nu} + O(\alpha^2) = 1$$

und daher

$$\text{Tr}(\sigma_{\mu\nu}) = 0.$$

Es läßt sich zeigen, daß mit der Zusatzforderung $\det S(\Lambda) = 1$ die Lösung für $\sigma_{\mu\nu}$ eindeutig ist.

Wir betrachten nun endliche Lorentztransformationen. Wir bezeichnen mit

$$(\omega^a)^\mu_\nu \in \left\{ (\omega^1)^\mu_\nu, (\omega^2)^\mu_\nu, (\omega^3)^\mu_\nu, (\omega^4)^\mu_\nu, (\omega^5)^\mu_\nu, (\omega^6)^\mu_\nu \right\}$$

die sechs Generatoren der eigentlichen orthochronen Lorentzgruppe (3 Boosts, 3 Rotationen). So ist beispielsweise der Generator für eine Drehung um die z -Achse gegeben durch

$$\omega^\mu_\nu = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Eine endliche Lorentztransformation der eigentlichen orthochronen Lorentzgruppe wird durch sechs Parameter $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5, \alpha_6)$ spezifiziert und ist gegeben durch

$$\Lambda^\mu_\nu = \exp\left(-i \sum_{a=1}^6 \alpha_a (\omega^a)^\mu_\nu\right).$$

Es gilt dann

$$S(\Lambda) = \exp\left(-\frac{1}{4} \sum_{a=1}^6 \alpha_a \sigma_{\mu\nu} (\omega^a)^{\mu\nu}\right).$$

Wir betrachten noch eine endliche Drehung um eine Achse. Als Beispiel diskutieren wir eine Drehung um die z -Achse. Es ist

$$\omega^\mu_\nu = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} U^\dagger, \quad U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

und somit

$$\Lambda(\alpha)^\mu_\nu = \exp(-i\alpha\omega^\mu_\nu) = U \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{+i\alpha} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} U^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\alpha) & \sin(\alpha) & 0 \\ 0 & -\sin(\alpha) & \cos(\alpha) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Dies entspricht natürlich einer Drehung um die z -Achse um den Winkel α . Insbesondere gilt für eine Drehung um $\alpha = 2\pi$:

$$\Lambda(2\pi)^\mu_\nu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Betrachten wir nun $S(\Lambda)$. Es ist

$$\begin{aligned} -\frac{1}{4}\alpha\sigma_{\mu\nu}\omega^{\mu\nu} &= -\frac{1}{4}\alpha\sigma_{\mu\nu}g^{\nu\rho}\omega^{\mu\rho} = -\frac{i}{4}\alpha(\sigma_{12}-\sigma_{21}) = -\frac{i}{2}\alpha\sigma_{12} = \frac{1}{4}\alpha[\gamma_1,\gamma_2] \\ &= -\frac{i}{2}\alpha\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

und daher

$$S(\Lambda(\alpha)) = \exp\left(-\frac{1}{4}\alpha\sigma_{\mu\nu}\omega^{\mu\nu}\right) = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\alpha}{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{\frac{i\alpha}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\frac{i\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{\frac{i\alpha}{2}} \end{pmatrix}.$$

Insbesondere gilt für $\alpha = 2\pi$ mit $e^{i\pi} = e^{-i\pi} = -1$

$$S(\Lambda(2\pi)) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = -\mathbf{1} \neq \mathbf{1},$$

d.h. erst eine Drehung um 4π ist für die Spinortransformation die Identität.

4.2.4 Diskrete Transformationen

In diesem Abschnitt betrachten wir die diskreten Transformationen der Raumspiegelung, der Ladungskonjugation und der Zeitumkehr.

Wir beginnen mit der **Raumspiegelung** (oder **Paritätstransformation**). Auch hier soll gelten

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

Für die Raumspiegelung ist

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Wir bezeichnen die Transformationsmatrix für die Spinoren in diesem Fall mit

$$P = S(\Lambda).$$

Man verifiziert leicht, daß

$$P = e^{i\varphi\gamma^0}$$

die obige Bedingung erfüllt, wobei φ eine frei wählbare Phase ist. Fordert man, daß vier Raumspiegelungen den Spinor wieder auf sich selbst abbilden (in Analogie zum Fall der Rotation um 4π um eine Achse), so ist die Phase φ auf die vier Werte

$$\varphi \in \left\{ 0, \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2} \right\}$$

bzw.

$$e^{i\varphi} \in \{1, i, -1, -i\}$$

beschränkt.

Betrachten wir nun die **Ladungskonjugation**. Diese Operation vertauscht Teilchen und Antiteilchen. Da Teilchenlösungen den Phasenfaktor $e^{-\frac{i}{\hbar}p \cdot x}$ haben, Antiteilchenlösungen dagegen den Phasenfaktor $e^{+\frac{i}{\hbar}p \cdot x}$, erwarten wir, daß der ladungskonjugierte Spinor ψ^C linear mit dem komplex konjugierten Spinor ψ^* (bzw. dem adjungierten Spinor $\bar{\psi}$) in Beziehung steht. Wir machen den Ansatz

$$\psi^C = C\bar{\psi}^T.$$

Existiert eine Matrix mit

$$C^{-1}\gamma^\mu C = -(\gamma^\mu)^T,$$

so folgt aus

$$\bar{\psi}(-i\hbar\overleftarrow{\not{\partial}} - mc) = 0$$

durch Transposition und Multiplikation mit C von links die Dirac-Gleichung für den ladungskonjugierten Spinor ψ^C :

$$(i\hbar\not{\partial} - mc)\psi^C = 0.$$

In der Dirac-Darstellung überzeugt man sich leicht, daß C als

$$C = i\gamma^2\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_2 \\ -i\sigma_2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

gewählt werden kann. Für diese Wahl gilt

$$-C = C^{-1} = C^T = C^\dagger.$$

Wie bei der Paritätstransformation können wir auch hier eine Phase frei wählen. Fordern wir, daß die viermalige Anwendung der Ladungskonjugation wieder unseren ursprünglichen Spinor liefert, so ist diese Phase auf

$$e^{i\phi} \in \{1, i, -1, -i\}$$

beschränkt.

Wir betrachten noch die **Zeitumkehr**. Dieser Fall ist etwas subtil. Die Lorentztransformation ist in diesem Fall

$$\Lambda_{\nu}^{\mu} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Würden wir wie im Falle der Raumspiegelung und der kontinuierlichen Lorentztransformationen den Ansatz

$$\psi'(x') = S(\Lambda)\psi(x)$$

verwenden, so würde ein Faktor $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ aufgrund von $t' = -t$ auf $e^{+\frac{i}{\hbar}Et'}$ transformiert werden. Dies bedeutet, daß ein Teilchen im System S zu einem Antiteilchen im System S' würde. Gesucht ist aber eine Transformation, die nur die Zeitrichtung umkehrt, ohne dabei zusätzlich Teilchen mit Antiteilchen zu vertauschen. Die gesuchte Transformation muß daher auch eine komplexe Konjugation beinhalten. Wir setzen daher an

$$\psi'(x') = T\psi^*(x).$$

Die Dirac-Gleichung ist kovariant unter dieser Transformation, falls T die Gleichung

$$\Lambda_{\nu}^{\mu}(\gamma^{\nu})^* = -T^{-1}\gamma^{\mu}T$$

erfüllt. In der Dirac-Darstellung kann T als

$$T = i\gamma^1\gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -i & 0 \end{pmatrix}$$

gewählt werden. Auch hier ist T nur bis auf eine Phase bestimmt. Fordert man, daß eine viermalige Anwendung wieder den ursprünglichen Spinor liefert, so ist die Phase auf

$$e^{i\phi} \in \{1, i, -1, -i\}$$

beschränkt.

4.3 Ausblick auf die relativistische Quantenfeldtheorie

Im ersten Teil des Kurses haben wir wechselwirkende nicht-relativistische Vielteilchensysteme betrachtet. In diesem Kontext haben wir uns mit wechselwirkenden nicht-relativistischen Quantenfeldtheorien beschäftigt. Im letzten Drittel des Kurses haben wir uns mit der Beschreibung eines freien relativistischen Teilchens beschäftigt. Zwei Verallgemeinerungen sind hierbei naheliegend: Zum einen von einem System mit nur einem Teilchen auf Systeme mit mehreren Teilchen, zum anderen von nicht-wechselwirkenden Teilchen zu wechselwirkenden Teilchen. Diese beiden Verallgemeinerungen führen uns auf eine wechselwirkende relativistische Quantenfeldtheorie. Für Spin-0- und Spin-1/2-Teilchen ist die Verallgemeinerung vom nicht-relativistischen Fall auf den relativistischen Fall nicht so schwer: Man ersetzt zum einen die nicht-relativistische Energie $p^2/(2m)$ durch die relativistische Energie-Impuls-Beziehung

$$E_{\vec{p}} = \sqrt{c^2\vec{p}^2 + c^4m^2},$$

zum anderen berücksichtigt man die Freiheitsgrade der Antiteilchen. Der Aufbau der Theorie beginnt – wie im nicht-relativistischen Fall – mit der Einführung von Feldoperatoren. Für ein komplexes skalares Teilchen lauten die Feldoperatoren im Heisenbergbild

$$\begin{aligned}\hat{\Phi}_H(x) &= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \sqrt{\frac{c}{2E_{\vec{p}}}} \left(\hat{a}_{\vec{p}} e^{-\frac{i}{\hbar}p \cdot x} + \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger e^{\frac{i}{\hbar}p \cdot x} \right), \\ \hat{\Phi}_H^\dagger(x) &= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \sqrt{\frac{c}{2E_{\vec{p}}}} \left(\hat{b}_{\vec{p}} e^{-\frac{i}{\hbar}p \cdot x} + \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger e^{\frac{i}{\hbar}p \cdot x} \right).\end{aligned}$$

Hierbei ist $p \cdot x = E_{\vec{p}} \cdot t - \vec{p} \cdot \vec{x}$. $\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger$ und $\hat{a}_{\vec{p}}$ sind die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für ein Teilchen, $\hat{b}_{\vec{p}}^\dagger$ und $\hat{b}_{\vec{p}}$ die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für ein Antiteilchen. Die nicht-trivialen Vertauschungsrelationen lauten

$$\left[\hat{a}_{\vec{p}}, \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \right] = \left[\hat{b}_{\vec{p}}, \hat{b}_{\vec{q}}^\dagger \right] = (2\pi\hbar)^3 \delta^3(\vec{p} - \vec{q}).$$

Die Feldoperatoren für ein Spin-1/2-Feld lauten

$$\begin{aligned}\hat{\Psi}_H(x) &= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \sqrt{\frac{c}{2E_{\vec{p}}}} \sum_{\lambda} \left(\hat{a}_{\vec{p},\lambda} u(p,\lambda) e^{-\frac{i}{\hbar}p \cdot x} + \hat{b}_{\vec{p},\lambda}^\dagger v(p,\lambda) e^{\frac{i}{\hbar}p \cdot x} \right), \\ \hat{\bar{\Psi}}_H(x) &= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \sqrt{\frac{c}{2E_{\vec{p}}}} \sum_{\lambda} \left(\hat{b}_{\vec{p},\lambda} \bar{v}(p,\lambda) e^{-\frac{i}{\hbar}p \cdot x} + \hat{a}_{\vec{p},\lambda}^\dagger \bar{u}(p,\lambda) e^{\frac{i}{\hbar}p \cdot x} \right).\end{aligned}$$

Die nicht-trivialen Vertauschungsrelationen lauten

$$\left\{ \hat{a}_{\vec{p},\lambda}, \hat{a}_{\vec{q},\lambda'}^\dagger \right\} = \left\{ \hat{b}_{\vec{p},\lambda}, \hat{b}_{\vec{q},\lambda'}^\dagger \right\} = (2\pi\hbar)^3 \delta^3(\vec{p} - \vec{q}) \delta_{\lambda\lambda'}.$$

Der weitere Aufbau der Theorie erfolgt dann analog zum nicht-relativistischen Fall. Diesen Zugang bezeichnet man als **kanonische Quantisierung**. Man findet diesen Zugang vor allem in älteren Lehrbüchern über (relativistische) Quantenfeldtheorie.

Die Behandlung von Spin-1-Teilchen im Rahmen der kanonischen Quantisierung ist möglich, technisch aber aufwendig. In der modernen Teilchenphysik treten Spin-1-Teilchen als Austauscheteilchen der elektromagnetischen, der schwachen und der starken Kraft auf. Die zugrundeliegenden Theorien besitzen Eichsymmetrien. Es ist vor allem die korrekte Behandlung der Eichsymmetrien, die im Rahmen der kanonischen Quantisierung technisch anspruchsvoll ist. Aus diesem Grund geht man oft zur Methode der **Pfadintegralquantisierung** über.

Interessierten Studierenden sei daher die Vorlesung “Relativistische Quantenfeldtheorie” empfohlen.