

Fortgeschrittene Quantenmechanik

Sommersemester 2004

H. G. EVERTZ

Inhaltsverzeichnis

I	Nichtrelativistische Vielteilchenphysik	3
1	Zweite Quantisierung	4
1.1	Unterscheidbare Teilchen	5
1.2	Identische Teilchen	6
1.2.1	Teilchen-Ununterscheidbarkeit: Konsequenzen für Operatoren	7
1.2.2	Konstruktion total (anti-)symmetrischer Zustände	8
1.2.3	Normierte total (anti-)symmetrische Basis-Zustände	8
1.3	Besetzungszahldarstellung	11
1.3.1	Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren	12
1.4	Observable in 2. Quantisierung	15
1.4.1	Einteilchen-Operatoren	15
1.4.2	Zweiteilchen-Operatoren	17
1.5	Transformationen zwischen Basissystemen. Feldoperatoren	18
1.5.1	Transformationen zwischen Basissystemen	19
1.5.2	Feldoperatoren	19
1.5.3	Observable ausgedrückt in Feldoperatoren	20
1.5.4	Bewegungsgleichung für Feldoperatoren	22
1.6	Impulsraum	23
1.6.1	Fouriertransformation	23
1.6.2	Basistransformation für Erzeuger und Vernichter	25
1.6.3	Vielteilchenoperatoren im Impulsraum	26
1.7	Spin	28
1.8	Dichtematrix und endliche Temperatur	29
1.9	Freie Fermionen	31
1.9.1	Grundzustand	31
1.9.2	Endliche Temperatur	33
1.9.3	Einteilchen-Korrelationsfunktion (Greensfunktion) bei $T = 0$	34

1.9.4	Paarverteilungsfunktion bei Temperatur Null	35
1.10	Freie Bosonen	36
2	Korrelationen und Greensfunktionen	39
2.1	Schrödinger-, Heisenberg- und Dirac-Bild	39
2.1.1	Schrödingerbild	40
2.1.2	Heisenbergbild	41
2.1.3	Dirac-Bild = Wechselwirkungsbild (= interaction picture)	41
2.2	Linear Response	43
2.3	Beispiele	45
2.3.1	Magnetische Suszeptibilität	45
2.3.2	Freie Fermionen	46
2.4	Korrelationsfunktionen	47
2.4.1	Spektraldarstellung in der Zeit	48
2.4.2	Spektraldarstellung in der Energie	48
2.5	Spektraldichte	50
2.5.1	Fluktuations-Dissipationstheorem	51
2.5.2	Spektraldarstellung der Spektraldichte	52
2.5.3	Spektraltheorem	53
2.5.4	Zustandsdichte	53
2.6	Halbseitige Fouriertransformation (Laplace-Transf.)	55
2.7	Spektraldarstellung von $G^{\text{ret},\eta}$	56
2.8	Kramers-Kronig-Relationen (= Dispersionsrelationen)	57
2.9	Bewegungsgleichungen für Greensfunktionen	58
2.10	Wechselwirkende Systeme	58
II	Relativistische Wellengleichungen	63
3	Auszüge aus der Speziellen Relativitätstheorie	65
3.1	Notation und Definitionen	66
3.1.1	Einheiten	66
3.1.2	Relativistische Notation	66
3.1.3	Elektromagnetisches Feld	69
3.2	Die Lorentz-Gruppe	71
3.3	Relativistische Dynamik	74

4	Die Klein-Gordon-Gleichung	77
5	Die Dirac-Gleichung	80
5.1	Aufstellen der Dirac-Gleichung (DG)	80
5.2	Kovariante Form der Dirac-Gleichung	82
5.3	Eigenschaften der γ -Matrizen	83
5.4	Lösungen der Dirac-Gleichung für ein ruhendes freies Teilchen	85
5.5	Nichtrelativistischer Grenzfall der Dirac-Gleichung	86
5.6	Lorentz-Kovarianz der Dirac-Gleichung	88
5.6.1	Bedingungsgleichung für Forminvarianz	88
5.6.2	Allgemeine Form der Spinortransformation	89
5.6.3	Lorentzboost	91
5.6.4	Drehung um eine Achse	93
5.6.5	Drehimpuls	94
5.7	Lösungen der freien Dirac-Gleichung	96
5.7.1	Lösungen in beliebigem Bezugssystem	96
5.7.2	Freie DG im Impulsraum	97
5.7.3	Projektionsoperatoren für Energie und Spin	98
5.8	Das Wasserstoffatom	100
5.8.1	Winkelanteil der Lösung	100
5.8.2	Radiale Anteile der Lösung	102
5.8.3	Energieniveaus	103
5.8.4	Korrekturen in der QED	104
5.8.5	DG für andere Potentiale: Foldy-Wouthuysen-Transformation	105
5.9	Symmetrien der Dirac-Gleichung	106
5.9.1	Kontinuierliche Symmetrien	106
5.9.2	Paritätstransformation \equiv Raumspiegelung	106
5.9.3	Ladungskonjugationen	107
5.9.4	“Zeitumkehr” (Bewegungsumkehr)	108
III	Quantenfeldtheorie	111
6	Kanonische Quantenfeldtheorie	112
6.1	Lagrange-Formalismus	113
6.1.1	Lagrangesche Mechanik (Erinnerung)	113
6.1.2	Bewegungsgleichungen in der Feldtheorie	114

6.1.3	Beispiel: Einteilchen - Klein-Gordon-Gleichung	115
6.1.4	Noethersches Theorem	116
6.2	Zweite Quantisierung	118
6.2.1	Erinnerung an die 2. Quantisierung der Schrödingergleichung (Kap. 1)	118
6.2.2	Verallgemeinerung	119
6.3	Quantisierung des reellen Klein-Gordon-Feldes	120
6.3.1	Ortsraum	121
6.3.2	Impulsraum	121
6.3.3	Normalordnung	123
6.3.4	Propagatoren	124
6.4	Φ^4 -Modell: Störungstheorie	126
6.4.1	Feynmanregeln	128
6.4.2	Regularisierung	129
6.4.3	Renormierung	129
6.4.4	Trivialität	130
6.5	Quantisierung des freien Dirac-Feldes	132
6.6	Quantisierung des Strahlungsfeldes	134
6.7	Bemerkungen zur Quantenelektrodynamik	138
7	Pfadintegrale und Erzeugende Funktionale	141
7.1	Feynmansches Einteilchen-Pfadintegral	143
7.2	Vielteilchen-Pfadintegral in Operator-Darstellung	146
7.3	Vielteilchen-Pfadintegral im Ortsraum	148
7.4	Vielteilchen-Pfadintegral mit kohärenten Zuständen	148
7.5	Zustandssummen und erzeugende Funktionale	150
7.5.1	Klassische Statistische Physik	151
7.5.2	Quantenmechanik	152
7.5.3	Gittereichtheorien	153

Einleitung

Die Vorlesung Fortgeschrittene Quantenmechanik besteht aus drei großen Teilen. Im ersten Teil “*Nichtrelativistische Teilchenphysik*” behandeln wir zunächst die Beschreibung von quantenmechanischen Systemen vieler Teilchen mittels der sogenannten 2. Quantisierung. Als Beispiele dienen uns unter anderem freie Fermionen und Systeme wechselwirkender Spins. Wir besprechen die Korrelationen und Greenschen Funktionen solcher Teilchen im Rahmen des “Linear Response”-Formalismus. Dieser Teil der Vorlesung ist auch Grundlage für weiterführende Physik, z.B. der Theoretischen Festkörperphysik einschließlich aktueller Forschung.

Im zweiten Teil der Vorlesung wird die Quantenmechanik einzelner *relativistischer* Teilchen besprochen. Nach kurzen Auszügen aus der speziellen Relativitätstheorie behandeln wir dort die Klein-Gordon-Gleichung, welche ein spinloses relativistisches Teilchen beschreibt, und dann ausführlich die grundlegende *Dirac-Gleichung* für Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen wie das Elektron. Die Dirac-Gleichung werden wir im freien Fall und für das Wasserstoffatom explizit lösen. Die dann behandelten Symmetrien der Dirac-Gleichung geben wichtige Auskunft über die grundlegenden physikalischen Eigenschaften der Welt.

Im dritten Teil, *Quantenfeldtheorie*, geht es vor allem um die Beschreibung *relativistischer Vielteilchensysteme*, also um die Synthese der ersten beiden Teile der Vorlesung. Dazu behandeln wir zunächst den älteren Zugang, die sogenannte *kanonische Quantenfeldtheorie* im Lagrange-Formalismus. Wir besprechen ausführlich den einfachsten Fall, die 2. Quantisierung der Klein-Gordon-Gleichung, und in kürzerer Form diejenige der Dirac-Gleichung und der elektromagnetischen Strahlung. Als Synthese ergibt sich schließlich die *Quantenelektrodynamik*.

Der alternative, modernere Zugang zur Vielteilchenphysik über *Pfadintegrale* bildet den Abschluß der Vorlesung. Wir werden sehen, daß alle bisher behandelten Teilgebiete, von der nichtrelativistischen Einteilchen-Quantenmechanik bis zur relativistischen Vielteilchenphysik, und sogar einschließlich der statistischen Physik, hier in einem gemeinsamen Formalis-

mus anschaulich behandelt werden können. Dieser Pfadintegralzugang ist auch Grundlage eines großen Teils der aktuellen physikalischen Forschung sowohl in der Festkörper- als auch in der Elementarteilchenphysik.

In dieser zweistündigen Vorlesung können viele Teile dieser sehr umfangreichen Gebiete nur sehr knapp besprochen werden. Andere sehr interessante Physik wird nur kurz erwähnt oder musste ganz wegfallen. Für weiterführende Studien folgt daher hier eine Auswahl aus der Literatur.

Empfohlene Literatur:

- Schwabl: Quantenmechanik für Fortgeschrittene (Für Teile I, II, III)
- Nolting: Grundkurs Theoretische Physik, Teil 7: Viel-Teilchen-Theorie (Für Teil I)
- Negele, Orland: Quantum Many Particle Physics (Für Teile I, III (Festkörper))
- Messiah: Quantenmechanik 2. (Für Teil II)
- Strange: Relativistic Quantum Mechanics (Für Teile II, III (Festkörper))
- Ramond: Field Theory, A Modern Primer (Für Teil III)
- Kaku: Quantum Field Theory (Für Teile II, III)
- Ryder: Quantum Field Theory (Für Teile II, III)
- Itzykson, Zuber: Quantum Field Theory (Klassiker. Für Teile II, III)

Teil I

Nichtrelativistische Vielteilchenphysik

Kapitel 1

Zweite Quantisierung

In der Quantenmechanik I wurde die Physik eines einzelnen Teilchens behandelt. Im allgemeinen möchte man aber gleichzeitig viele miteinander wechselwirkende Teilchen betrachten. Wir werden dazu nun die Quantenmechanik auf die Beschreibung vieler Teilchen verallgemeinern. Der Formalismus dafür ist die sogenannte zweite Quantisierung. Sie berücksichtigt insbesondere die Symmetrie der Wellenfunktion von identischen Teilchen, z.B. Elektronen, Photonen, identischen Atomen.

Der Name “2. Quantisierung” ist etwas irreführend. Im wesentlichen geht es um die geeignete Symmetrisierung und Ummumerierung des Vielteilchen-Zustandsraumes. Dabei stellt sich eine Beschreibung mittels Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren als günstig heraus, ähnlich denjenigen des harmonischen Oszillators, wobei hier nun formal *Teilchen* erzeugt oder vernichtet werden. Man gelangt so zur sogenannten *Besetzungszahldarstellung*. Andere Formulierungen, z.B. über Pfadintegrale, werden wir gegen Ende der Vorlesung kennenlernen. Eine erste Einführung zum Thema finden Sie auch in der Vorlesung QM I, Kapitel 7: “Identische Teilchen”.

Die 2. Quantisierung ist Grundlage für weiterführende Physik, wie zum Beispiel der *Theoretischen Festkörperphysik* einschließlich aktueller Forschungsgebiete.

Wir werden in diesem Kapitel zunächst *Basiszustände* von Vielteilchensystemen aufbauen, und dabei zur *Besetzungszahldarstellung* gelangen. In dieser werden wir dann auch die wichtigsten *Operatoren* im Vielteilchenraum konstruieren.

1.1 Unterscheidbare Teilchen

Zunächst betrachten wir ein System von *unterscheidbaren* quantenmechanischen Teilchen, die wir zusammen beschreiben wollen.

- Die Teilchen seien numeriert: $1, 2, \dots, N$.

Die Numerierung wird einmal vorgegeben und bleibt dann fest.

- $\mathcal{H}_{1 \leftarrow \text{Ein Teilchen}}^{(\alpha)}$ sei der Hilbertraum des Teilchens α , mit einer Basis $|i\rangle^{(\alpha)}$, wie in der QM I kennengelernt. Die Basis besteht wie gewohnt aus Eigenzuständen eines vollständigen Systems von Observablen. Der (Multi-)Index ‘ i ’ steht dabei für alle Quantenzahlen, z.B. für Ort *und* Spin.

Die Basis sei orthonormiert: ${}^{(\alpha)}\langle i | j \rangle^{(\alpha)} = \delta_{ij}$ (oder $= \delta(i - j)$)

und vollständig: $\sum_i {}^{(\alpha)}\langle i | \langle i |^{(\alpha)} = \mathbb{1}$

- Der N -Teilchen-Hilbertraum ist das Produkt

$$\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_1^{(1)} \otimes \mathcal{H}_1^{(2)} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_{1 \leftarrow \text{Ein Teilchen}}^{(N)}$$

mit der Basis

$$|i_1\rangle^{(1)} |i_2\rangle^{(2)} \dots |i_N\rangle^{(N)} =: \underbrace{|i_1 i_2 \dots i_N\rangle}_{\text{Teilchen N}}$$

In dieser Notation erfolgt die Teilchennumerierung durch die **Position** im Ket-Vektor.

Der Ausdruck $|i_N\rangle$ steht weiterhin für ein Teilchen im Zustand “ i_N ”.

- Ein allgemeiner Zustand wird durch Entwicklung nach obiger Basis beschrieben:

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1 \dots i_N} c_{i_1 \dots i_N} |i_1 \dots i_N\rangle$$

- Die Schrödinger-Gleichung lautet wie gewohnt $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$

1.2 Identische Teilchen

Wir beschreiben nun ein System von identischen quantenmechanischen Teilchen, z.B. Elektronen, Photonen oder Atome gleicher Art. Wir werden sehen, daß wir dazu die Vielteilchen-Wellenfunktion geeignet symmetrisieren müssen. Für *Bosonen* wird sie total symmetrisch unter Teilchenvertauschung sein, und für *Fermionen* total antisymmetrisch.

- Def. Identische Teilchen: Teilchen, die unter gleichen Bedingungen durch keine Messung voneinander unterschieden werden können.
- Weil identische Teilchen, die miteinander wechselwirken, quantenmechanisch ununterscheidbar sind, gilt

Die Vertauschung von identischen Teilchen hat keine beobachtbaren Konsequenzen!

- Def. Transpositionsoperator $\hat{P}_{\alpha\beta}$: vertauscht Quantenzahlen der Teilchen α und β

$$\hat{P}_{\alpha\beta} |i_1 i_2 \dots i_\alpha \dots i_\beta \dots\rangle := |i_1 i_2 \dots i_\beta \dots i_\alpha \dots\rangle$$

Der Zustand i enthält Information über den Platz \vec{x} des Teilchens; also vertauschen hier die Teilchen α und β auch ihre Plätze.

(*Achtung*: Hier werden die Teilchen noch als numeriert behandelt!)

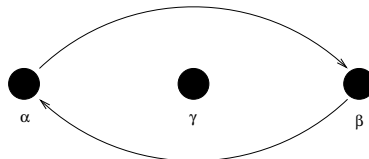
- Vertauschung ist unbeobachtbar \Rightarrow Zustand ändert sich nur um eine Phase

$$\hat{P}_{\alpha\beta} |\psi\rangle = e^{i\lambda} |\psi\rangle$$

Zweifache Vertauschung führt wieder zum Ausgangszustand zurück:

$$\hat{P}_{\alpha\beta}^2 = \mathbb{1} \Rightarrow e^{2i\lambda} = 1 \Rightarrow \hat{P}_{\alpha\beta} |\psi\rangle = \pm |\psi\rangle$$

Anmerkung: In zwei Dimensionen kann man Teilchen auf verschiedene Weisen vertauschen, wenn ein weiteres Objekt “ γ ” existiert. “ $\hat{P}^2 \equiv \mathbb{1}$ ” gilt dann nicht. Konsequenz ist u.a. der “Fraktionale Quanten-Hall-Effekt”. (s.a. QM I, Kapitel über Anyonen)



- Bei N Teilchen gibt es $N!$ mögliche Vertauschungen $\hat{P}_{\alpha\beta}$, die à priori verschiedene Eigenwerte ± 1 haben könnten.
- Es zeigt sich experimentell, daß (bis auf Anyonen in zwei Dimensionen) nur zwei Arten von ununterscheidbaren Teilchen beobachtet werden:

$$\begin{array}{ll} \text{Bosonen:} & \hat{P}_{\alpha\beta} |\psi\rangle = + |\psi\rangle \quad \forall \alpha, \beta \quad : \text{total } \underline{\text{symmetrisch}} \\ \text{Fermionen:} & \hat{P}_{\alpha\beta} |\psi\rangle = - |\psi\rangle \quad \forall \alpha, \beta \quad : \text{total } \underline{\text{antisymmetrisch}} \end{array}$$

- Im Rahmen der Quantenfeldtheorie (QFT) kann man unter sehr allgemeinen Annahmen (Lokalität, Kausalität, Lorentzinvarianz) das “Spin-Statistik-Theorem” zeigen:

Teilchen mit ganzzahligem Spin sind Bosonen (z.B. Photon, Phonon, Graviton ...)
 Teilchen mit halbzahligen Spin sind Fermionen (z.B. Elektronen, Quarks, ...)

1.2.1 Teilchen-Ununterscheidbarkeit: Konsequenzen für Operatoren

- Im Raum der total (anti-)symmetrischen Zustände $|\psi\rangle_\epsilon$

$$\hat{P} |\psi\rangle_\epsilon = \epsilon |\psi\rangle_\epsilon, \quad \epsilon = \pm 1 \quad (\text{Index } \alpha\beta \text{ bei } \hat{P}_{\alpha\beta} \text{ weggelassen})$$

gilt für beliebige Operatoren \hat{A} :

$${}_\epsilon \langle \varphi | \hat{P}^\dagger \hat{A} \hat{P} | \psi \rangle_{\epsilon'} \equiv {}_\epsilon \langle \varphi | \hat{P} \hat{A} \hat{P} | \psi \rangle_{\epsilon'} = \epsilon \epsilon' {}_\epsilon \langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle_{\epsilon'}$$

- Im Falle von Fermion–Fermion- und Boson–Boson-Matrixelementen gilt $\epsilon = \epsilon'$, und daher dann für beliebige Operatoren \hat{A} : $\boxed{\hat{P}^\dagger \hat{A} \hat{P} = \hat{A}}$.

$$\text{Analog: } {}_\epsilon \langle \varphi | \hat{P}^\dagger | \psi \rangle_{\epsilon'} = \epsilon {}_\epsilon \langle \varphi | \psi \rangle_{\epsilon'} = \epsilon' {}_{\epsilon'} \langle \varphi | \psi \rangle_{\epsilon'} = {}_{\epsilon'} \langle \varphi | \hat{P} | \psi \rangle_{\epsilon'} \Rightarrow P = P^\dagger.$$

$$\text{Für } \hat{A} = \mathbb{1} \text{ folgt } \boxed{\hat{P}^\dagger = \hat{P}^{-1}} \text{ und damit } \hat{A} \hat{P} = \hat{P} \hat{A}, \text{ d. h. } \boxed{[\hat{A}, \hat{P}] = 0}.$$

- Für unter Teilchenvertauschung symmetrische Operatoren \hat{O}

gilt per Definition $\hat{P} \hat{O} = \hat{O} \hat{P} \Leftrightarrow [\hat{O}, \hat{P}] = 0$, und damit immer $\hat{P}^\dagger \hat{O} \hat{P} = \hat{O}$.

- Insbesondere ist der Hamiltonoperator eines Vielteilchensystems unter Teilchenvertauschung symmetrisch. Also gilt

$$[\hat{H}, \hat{P}] = 0 \Rightarrow \underline{\text{die Symmetrie eines Vielteilchenzustandes ist zeitlich konstant.}}$$

1.2.2 Konstruktion total (anti-)symmetrischer Zustände

Permutationsoperator :

$$\hat{P}_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N} |i_1 i_2 \dots i_N\rangle := |i_{\alpha_1} i_{\alpha_2} \dots i_{\alpha_N}\rangle ,$$

wobei $\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N$ eine Permutation der Zahlen $1, 2, \dots, N$ ist.

Symmetrisierungsoperator : Summiert über alle Permutationen, symmetrisch bzw. antisymmetrisch:

$$\hat{S}_{\pm} := \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathcal{P}} (\pm 1)^{|\mathcal{P}|} \hat{P}$$

wobei $|\mathcal{P}|$ die Anzahl der Transpositionen ist, aus denen sich die Permutation \mathcal{P} zusammensetzt.

Beispiel für $N = 2$:

$$\begin{aligned} \hat{S}_+ |i_1 i_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|i_1 i_2\rangle + |i_2 i_1\rangle) \\ \hat{S}_- |i_1 i_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|i_1 i_2\rangle - |i_2 i_1\rangle) \end{aligned}$$

Dieses Beispiel haben wir in der QM I schon kennengelernt !

Eigenschaften:

(1) : $\hat{P}_{\alpha\beta} \hat{S}_{\pm} = \pm \hat{S}_{\pm}$ weil $P \times$ Permutation = andere Permutation
(Das Vorzeichen sieht man leicht am Beispiel $N = 2$).

$$\hat{S}_+ \hat{P}_{\alpha\beta} = \hat{S}_+ \text{ dto.}$$

$\hat{S}_- \hat{P}_{\alpha\beta} = -\hat{S}_-$ weil die zusätzl. Transpos. $\hat{P}_{\alpha\beta}$ alle Vorzeichen umkehrt

$$(2) : \hat{S}_{\pm}^2 = \sqrt{N!} \hat{S}_{\pm} \quad , \quad \text{denn } \hat{S}_{\pm}^2 = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathcal{P}} (\pm 1)^{|\mathcal{P}|} \underbrace{\hat{P} \hat{S}_{\pm}}_{=(\pm 1)^{|\mathcal{P}|} \hat{S}_{\pm}} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathcal{P}} \hat{S}_{\pm}$$

1.2.3 Normierte total (anti-)symmetrische Basis-Zustände

Wir konstruieren nun zunächst *eine* mögliche Schreibweise für die benötigten Basiszustände des Vielteilchensystems. Dies ist ein Zwischenschritt. Die gebräuchlichere Schreibweise erfolgt über Besetzungszahlen im nächsten Unterkapitel.

Bosonen: Basiszustände $|i_1 \dots i_N\rangle_{(+)} := c_+ \hat{S}_+ |i_1 \dots i_N\rangle$: total symmetrisch
 c_+ : Normierungskonstante

- Normierung:

$$\begin{aligned}
 1 &\stackrel{!}{=} {}_{(+)}\langle i_1 \dots i_N | i_1 \dots i_N \rangle_{(+)} \\
 &= |c_+|^2 \underbrace{\frac{1}{N!} \left(\sum_{\mathcal{P}'} \hat{\mathcal{P}} \langle i_1 \dots i_N | \right)}_{\rightarrow 1} \left(\sum_{\mathcal{P}} \hat{\mathcal{P}} |i_1 \dots i_N\rangle \right) \\
 &= |c_+|^2 \langle i_1 \dots i_N | \left(\sum_{\mathcal{P}} \hat{\mathcal{P}} |i_1 \dots i_N\rangle \right) \\
 &= |c_+|^2 \sum_{\mathcal{P}} \underbrace{\langle i_1 | i_{\mathcal{P}1} \rangle}_{\delta_{i_1, i_{\mathcal{P}1}}} \langle i_2 | i_{\mathcal{P}2} \rangle \dots \langle i_N | i_{\mathcal{P}N} \rangle
 \end{aligned}$$

Es ergibt sich genau dann ein Beitrag, wenn $|i_1 \dots i_N\rangle = |i_{\mathcal{P}1} \dots i_{\mathcal{P}N}\rangle$.

- Beachte: Mehrere Teilchen können in demselben Quantenzustand sein. Wenn der (Einteilchen-) Zustand i n_i -mal vorkommt (n_i : "**Besetzungszahl**" für Zustand i), erhält man $(n_i!)$ Beiträge von $\sum_{\mathcal{P}}$.
- Wir numerieren nun die Einteilchenzustände, d. h. die Werte der i_α , mit Zahlen $i = 1, 2, \dots$ (endliche oder unendliche Anzahl).
 Wir betrachten zunächst den Fall, daß diese Werte i diskret sind. Der kontinuierliche Fall ergibt sich weiter unten durch Basistransformation.

$$\Rightarrow 1 \stackrel{!}{=} |c_+|^2 \prod_{i=1,2,\dots} n_i!$$

\Rightarrow Normierter total symmetrischer Basiszustand von N Teilchen:

$$\boxed{|i_1 \dots i_N\rangle_{(+)} = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} \hat{S}_+ |i_1 \dots i_N\rangle}$$

Fermionen: Total antisymmetrische **Basiszustände** für N Teilchen: $|i_1 \dots i_N\rangle_{(-)} = c_- \hat{S}_- |i_1 \dots i_N\rangle$

Dies kann man auch als Determinante schreiben (**Slater-Determinante**)

$$= c_- \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} |i_1\rangle_{(1)} & |i_2\rangle_{(1)} & \dots & |i_N\rangle_{(1)} \\ |i_1\rangle_{(2)} & |i_2\rangle_{(2)} & \dots & |i_N\rangle_{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |i_1\rangle_{(N)} & |i_2\rangle_{(N)} & \dots & |i_N\rangle_{(N)} \end{vmatrix}$$

- Diese Determinante verschwindet immer, wenn zwei der $i_{(\alpha)}$ gleich sind
 \Rightarrow Jeder Einteilchenzustand i kann wegen der Antisymmetrie höchstens einmal vorkommen. Also gilt $\mathbf{n}_i = 0$ oder 1 (**Pauli-Prinzip**)
- Normierung:

$$1 \stackrel{!}{=} |c_-|^2 \frac{1}{N!} \left(\sum_{\mathcal{P}'} \hat{\mathcal{P}} |i_1 \dots i_N\rangle \right) \left(\sum_{\mathcal{P}} \hat{\mathcal{P}} |i_1 \dots i_N\rangle \right) (-1)^{|\mathcal{P}'|} (-1)^{|\mathcal{P}|}$$

Beitrag nur bei $\mathcal{P}' = \mathcal{P} \Rightarrow$ Vorzeichen fallen weg

$$= |c_-|^2 \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P}} 1 = |c_-|^2$$

Also ist $c_- = 1$ wählbar.

- Wegen $0! = 1! = 1$ gilt bei Fermionen immer $n_i! = 1$. Daher kann man die Basiszustände von Bosonen und Fermionen in einer gemeinsamen Formel schreiben:
Normierte total (anti-)symmetrischer Basiszustände von N Teilchen (Fermionen bzw. Bosonen)

$$\boxed{|i_1 \dots i_N\rangle_{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} \hat{S}_{\pm} |i_1 \dots i_N\rangle}$$

- Diese Zustände spannen den Hilbertraum \mathcal{H}_N^{\pm} von N Teilchen auf.
- Um das *Vorzeichen der Fermion-Basiszustände* festzulegen, muß man eine (beliebige) Reihenfolge $i = 1, 2, \dots$ der Einteilchenzustände festlegen und die $|i_1 \dots i_N\rangle$ in obiger Definition in dieser Reihenfolge anordnen.

1.3 Besetzungszahldarstellung

\mathcal{H}_N : Die N -Teilchen Basiszustände $|i_1 \dots i_N\rangle_{\pm}$ mit *fester Teilchenzahl* N sind wegen der totalen (Anti-)Symmetrie schon durch die Angabe der Besetzungszahlen n_1, n_2, \dots eindeutig festgelegt, d. h. durch die Multiplizität n_i der Werte i in $i_1 i_2 \dots i_N$.

Daher kann man sie auch als

$$\boxed{|n_1 n_2 \dots; N\rangle_{\pm} \equiv |i_1 i_2 \dots i_N\rangle_{\pm}}$$

schreiben, mit

$$n_i = 0, 1 \quad \text{bei Fermionen}$$

$$n_i = 0, 1, 2, \dots \quad \text{bei Bosonen}$$

$$\sum_i n_i = N$$

Diese Zustände sind orthonormiert

$${}_{\epsilon} \langle n_1 n_2 \dots; N | n'_1 n'_2 \dots; N \rangle_{\epsilon} = \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2} \dots$$

und vollständig

$$\sum_{\substack{n_1, n_2, \dots \\ (\sum_i n_i = N)}} |n_1 n_2 \dots; N\rangle_{\epsilon} {}_{\epsilon} \langle n_1 n_2 \dots; N| = \mathbb{1} \leftarrow 1\text{-Operator im } N\text{-Teilchen Hilbertraum}$$

Fock-Raum:

Es ist zweckmäßig, Änderungen der Teilchenzahlen zuzulassen und dafür die direkte Summe der N -Teilchen Hilberträume zu betrachten.

Fock-Raum: $\mathcal{H}^{(\pm)} := \mathcal{H}_0^{(\pm)} \oplus \mathcal{H}_1^{(\pm)} \oplus \mathcal{H}_2^{(\pm)} \oplus \dots$

- Eine Basis für den Fock-Raum bilden die Zustände

$$|n_1, n_2, \dots\rangle \quad , \text{ jetzt ohne Einschränkung an } \sum_i n_i$$

Sie sind orthonormiert:

$$\langle n_1 n_2 \dots | n'_1 n'_2 \dots \rangle = \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2} \dots$$

wobei das Skalarprodukt zwischen Hilberträumen verschiedener Teilchenzahl natürlicherweise zu Null definiert wurde, und sie sind vollständig:

$$\sum_{n_1, n_2, \dots} |n_1 n_2 \dots\rangle_{\epsilon} {}_{\epsilon} \langle n_1 n_2 \dots| = \mathbb{1} \leftarrow \text{im Fock-Raum } \mathcal{H}^{(\epsilon)}$$

- Wir haben auch den Hilbertraum $\mathcal{H}_0^{(\pm)}$ eingeschlossen. Er enthält nur den einen Basiszustand $|0\rangle$, mit $\langle 0 | 0 \rangle = 1$, den sogenannten *Vakuumzustand* (auch *Grundzustand*). Dies ist nicht der Null-Vektor!

1.3.1 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Wir führen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ein, die zwischen verschiedenen Teilchenzahlen transformieren. Sie entsprechen den Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren beim harmonischen Oszillator, und wie dort werden wir sehen, daß wir den gesamten Formalismus mit diesen Operatoren und ihren Vertauschungsrelationen auf einfache Weise aufbauen können.

Der Erzeugungsoperator a_j^\dagger für den Einteilchenzustand j (üblicherweise ohne Hut) ist definiert über

$$\boxed{a_j^\dagger \underbrace{|i_1 i_2 \dots i_N\rangle_\epsilon}_{N \text{ Teilchen}} := \sqrt{n_j + 1} \underbrace{|j i_1 \dots i_N\rangle_\epsilon}_{N+1 \text{ Teilchen}}} \quad (*)$$

Er erzeugt ein Teilchen im Zustand $|j\rangle$. Durch wiederholtes Anwenden auf den Vakuumzustand $|0\rangle$ erzeugt man die *Besetzungszahldarstellung*

$$\begin{aligned} |n_i = 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{1}} a_i^\dagger |0\rangle \\ |n_i = 2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{1}} (a_i^\dagger)^2 |0\rangle \\ &\vdots \\ |n_i\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n_i!}} (a_i^\dagger)^{n_i} |0\rangle \end{aligned}$$

d. h. allgemein

$$\boxed{|n_1 n_2 \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle} \quad (**)$$

Bei Fermionen kommt es hier auf die Reihenfolge der a_i^\dagger an! (\leftrightarrow Konvention)

Wir berechnen nun die Wirkung von a_i^\dagger in der Besetzungszahldarstellung. Wir betrachten Bosonen und Fermionen getrennt.

Bosonen: Da es in Def. (*) nicht auf die Reihenfolge der i_α ankommt, folgt direkt

$$\boxed{a_i^\dagger |\dots n_i \dots\rangle_+ = \sqrt{n_i + 1} |\dots (n_i + 1) \dots\rangle_+}$$

Der Vernichter a_i ist als der adjungierte Operator zu a_i^\dagger definiert. Daher gilt

$$\begin{aligned} {}_+ \langle \dots n'_i \dots | a_i |\dots n_i \dots\rangle_+ &= \sqrt{n'_i + 1} {}_+ \langle \dots (n'_i + 1) \dots | \dots n_i \dots\rangle_+ \\ &= \sqrt{n'_i + 1} \delta_{n'_i+1, n_i} \end{aligned}$$

wobei im ersten Schritt a_i nach links als Erzeuger angewandt wurde. Da diese Gleichung für Matrixelemente mit beliebigen Basis-Bra-Vektoren gilt, folgt die Gleichheit der Ket-Vektoren auf beiden Seiten:

$$\boxed{a_i |\dots n_i \dots\rangle_+ = \sqrt{n_i} |\dots (n_i - 1) \dots\rangle_+}$$

und insbesondere $a_i |\dots (n_i = 0)\rangle = 0$.

Dies sind dieselben Relationen wie beim harmonischen Oszillator.

Aus diesen Beziehungen folgen sofort die Vertauschungsrelationen

$$\boxed{\begin{aligned} [a_i, a_j] &= [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \\ [a_i, a_j^\dagger] &= \delta_{ij} \end{aligned}} \quad \text{für Bosonen (analog zum harmonischen Oszillator)}$$

Beweis: "Nichttrivial" ist lediglich $[a_i, a_i^\dagger] = a_i a_i^\dagger - a_i^\dagger a_i$

Anwenden auf $|(n_i)\rangle_+ ; := |\dots n_i \dots\rangle_+$ ergibt

$$a_i \sqrt{n_i + 1} |(n_i + 1)\rangle_+ - a_i^\dagger \sqrt{n_i} |(n_i - 1)\rangle_+ = (n_i + 1) |(n_i)\rangle_+ - n_i |(n_i)\rangle_+ = 1 \cdot |(n_i)\rangle_+$$

□

Fermionen: Aus der Def. (*) folgt

$$\begin{aligned} a_r^\dagger a_s^\dagger |i_1 i_2 \dots\rangle_- &= \sqrt{n_r + 1} \sqrt{n_s + 1} |rs i_1 i_2 \dots\rangle_- \\ &= -\sqrt{n_r + 1} \sqrt{n_s + 1} |sr i_1 i_2 \dots\rangle_- \quad \text{wegen der Antisym.} \\ &= -a_s^\dagger a_r^\dagger |i_1 i_2 \dots\rangle \end{aligned}$$

$$\text{Also } \boxed{\{a_r^\dagger, a_s^\dagger\} \equiv a_r^\dagger a_s^\dagger + a_s^\dagger a_r^\dagger = 0}$$

Weitere Schreibweisen: $\{a_r^\dagger, a_s^\dagger\} \equiv [a_r^\dagger, a_s^\dagger]_+ \stackrel{\epsilon=-1}{\equiv} [a_r^\dagger, a_s^\dagger]_{-\epsilon}$.

- Fermion-Erzeuger antikkommutieren.
- Insbesondere gilt $(a_r^\dagger)^2 = 0$

Wegen (**) folgt nun

$$a_i^\dagger |\dots n_i \dots\rangle_- = \delta_{n_i,0} (-1)^{\tilde{n}_i} |\dots (n_i + 1) \dots\rangle_-, \text{ mit } \tilde{n}_i = \sum_{j < i} n_j$$

wobei \tilde{n}_i die Zahl der Erzeugungsoperatoren a_j^\dagger ist, mit denen man a_i^\dagger kommutieren muß, um zur definierenden Darstellung (*) zu gelangen. Das Kronecker-Delta tritt wegen $(a_i^\dagger)^2 = 0$ auf.

Durch Adjungieren und Multiplikation mit $|\dots n'_i \dots\rangle$ ergibt sich für den Vernichtungsoperator

$$a_i |\dots n_i \dots\rangle_- = \delta_{n_i,1} (-1)^{\tilde{n}_i} |\dots (n_i - 1) \dots\rangle_-$$

Durch Einsetzen erhält man die Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned} \{a_i, a_j\} &= \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0 \\ \{a_i, a_j^\dagger\} &= \delta_{ij} \end{aligned}$$

Die Vertauschungsrelationen von Bosonen ($\epsilon = 1$) und Fermionen ($\epsilon = -1$) kann man auch zusammenfassen als:

$$\begin{aligned} [a_i, a_j]_{-\epsilon} &= [a_i^\dagger, a_j^\dagger]_{-\epsilon} = 0 \\ [a_i, a_j^\dagger]_{-\epsilon} &= \delta_{ij} \end{aligned}$$

Zur Erinnerung:

1. $[a, b]_{-\epsilon} = ab - \epsilon ba$
2. Die Indizes i, j, \dots stehen jetzt für die Werte der Einteilchenquantenzahlen.
Die Teilchennumerierung kommt in der Schreibweise mit Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren nicht mehr vor, wie es bei identischen Teilchen auch sein sollte !

Notation: Erzeuger und Vernichter bezeichnet man auch oft mit c_i^\dagger und c_i .

1.4 Observable in 2. Quantisierung

Um Observable im Vielteilchenraum auszudrücken, müssen wir die zugehörigen Operatoren in der Sprache des 2. Quantisierung, also mit Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren schreiben.

Das einfachste Beispiel hierfür ist der Teilchenzahloperator

$$\hat{n}_i = a_i^\dagger a_i \quad \text{mit } \hat{n}_i |\dots n_i \dots\rangle = n_i |\dots n_i \dots\rangle,$$

wobei n_i die Anzahl der Teilchen im *Zustand* i ist. Diese Operator ist für Bosonen und für Fermionen gleichlautend. Der Operator der Gesamtteilchenzahl ist also

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

1.4.1 Einteilchen-Operatoren

Wir betrachten zunächst Operatoren, die sich als Summe von Operatoren der Einteilchen-Hilberträume ergeben. Sie haben also generisch die Form

$$\hat{T} = \hat{t}_{(1)} + \hat{t}_{(2)} + \dots = \sum_{\alpha} \hat{t}_{(\alpha)}$$

Der Index bezeichnet die Nummer des Teilchens, auf das der Operator wirkt.

Beispiele sind neben dem Teilchenzahloperator der Operator der kinetischen Energie $\hat{t}_{(\alpha)} = \frac{\hat{p}_{(\alpha)}^2}{2m}$ und der Operator der potentiellen Energie bezüglich eines äußeren Potentials $\hat{t}_{(\alpha)} = V(x_{(\alpha)})$, dessen Summanden jeweils nur von einer Einzelkoordinate abhängen.

Wir wollen solche Operatoren nun allgemein mit Hilfe der Matrixelemente der Einteilchenoperatoren \hat{t}_{α} ausdrücken. In der Einteilchenbasis $|i\rangle$ lauten die Matrixelemente $t_{ij} = \langle i | \hat{t} | j \rangle$. Sie sind wegen der Ununterscheidbarkeit der Teilchen unabhängig von der Teilchennummer α . Daher gilt

$$\hat{t}_{(\alpha)} = \sum_{ij} \underbrace{|i\rangle_{(\alpha)} \langle i|}_{\rightarrow \mathbb{I}} \hat{t} \underbrace{|j\rangle_{(\alpha)} \langle j|}_{\rightarrow \mathbb{I}} = \sum_{ij} t_{ij} |i\rangle_{(\alpha)} \langle j|$$

Wir wollen $\hat{t}_{(\alpha)}$ durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren darstellen. Die Rechnung führen wir nur für Bosonen explizit durch. Bei Fermionen muß man Vorzeichen beachten; man erhält schließlich dasselbe Ergebnis.

Wir berechnen die Wirkung von $\sum_{\text{Teilchen } (\alpha)} |i\rangle_{(\alpha)} \langle j|$ auf $|\dots n_i \dots n_j \dots\rangle$ bei Bosonen. Wir betrachten den Fall $i \neq j$.

$$\left(\sum_{\alpha} |i\rangle_{(\alpha)} \langle j| \right) |\dots n_i \dots n_j \dots\rangle = \sum_{\alpha} |i\rangle_{(\alpha)} \langle j| \hat{S}_+ |i_1 i_2 \dots i_N\rangle \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}}$$

Wenn $|j\rangle$ n_j -mal besetzt ist, ergeben sich aus der Summe $\sum_{\alpha} \dots$ genau n_j Beiträge (unabhängig von der Permutation in \hat{S}_+). Wegen $|i\rangle_{(\alpha)} \langle j| j\rangle_{(\alpha)} = |i\rangle_{(\alpha)}$, wird dabei n_j um 1 verringert und n_i um 1 erhöht. Das Ergebnis ist also proportional zu $|\dots (n_i + 1) \dots (n_j - 1) \dots\rangle$, wobei letzteres aber die Normierung $\frac{1}{\sqrt{(n_i+1)!}} \frac{1}{\sqrt{(n_j-1)!}} \dots$ hat.

$$\begin{aligned} &= \underbrace{n_j}_{\text{Beiträge}} \frac{\sqrt{(n_i+1)!}}{\sqrt{n_i!}} \frac{\sqrt{(n_j-1)!}}{\sqrt{n_j!}} |\dots (n_i+1) \dots (n_j-1) \dots\rangle \\ &= \sqrt{n_i+1} \sqrt{n_j} |\dots (n_i+1) \dots (n_j-1) \dots\rangle \\ &= a_i^\dagger a_j |\dots n_i \dots n_j \dots\rangle \end{aligned}$$

Dasselbe Ergebnis erhält man für $i = j$ und auch für Fermionen.

Da rechts ein beliebiger Basis-Ket-Vektor steht, folgt allgemein

$$\boxed{\sum_{\text{Teilchen } \alpha} |i\rangle_{(\alpha)} \langle j| = a_i^\dagger a_j}$$

Für den gesuchten Einteilchen-Operator gilt also in 2. Quantisierung

$$\boxed{\hat{T} \equiv \sum_{\alpha} \hat{t}_{(\alpha)} = \sum_{ij} t_{ij} a_i^\dagger a_j}$$

Das Ergebnis vereinfacht sich weiter in der Eigenbasis, also der Basis, in der $\hat{t}_{(\alpha)}$ diagonal ist. Dort gilt

$$\hat{t}_{(\alpha)} |j\rangle = t_j |j\rangle \quad \text{also} \quad t_{ij} = {}_{(\alpha)}\langle i| \hat{t}_{(\alpha)} |j\rangle_{(\alpha)} = t_j \delta_{ij}$$

und somit
$$\boxed{\hat{T} = \sum_i t_i a_i^\dagger a_i \equiv \sum_i t_i \hat{n}_i}$$

Beispiel: $|i\rangle$ seien die Eigenzustände des Hamiltonians $\hat{H}_{(\alpha)}$ mit Eigenwerten ϵ_i .

Dann gilt $\hat{H} = \sum_{\alpha} \hat{H}_{(\alpha)} = \sum_i \epsilon_i \hat{n}_i$. Der Hamiltonian zählt also die Teilchen im Zustand i und gibt jedem die Energie ϵ_i .

Insbesondere werden wir später Systeme von freien Teilchen betrachten. Diese enthalten nur einen kinetischen Operator, der sich bei Translationsinvarianz im Impulsraum diagonalisieren läßt (s. Übungen).

1.4.2 Zweiteilchen-Operatoren

Zweiteilchen-Operatoren beschreiben Wechselwirkungen zwischen je zwei Teilchen, wie etwa die Coulomb-Wechselwirkung. Allgemein:

$$\hat{F} = \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{\alpha \neq \beta}}_{\text{Teilchen}} \hat{f}_{\alpha\beta} \quad \text{analog zu} \quad \hat{T} = \sum_{\alpha} \hat{t}_{\alpha}$$

(Wir nehmen hier den Fall $\alpha = \beta$ aus, da es sich dann um *Einteilchenoperatoren* handelt.)

Beispiel: Coulomb-Wechselwirkung $f_{x_1 x_2} = \frac{e^2}{|x_1 - x_2|}$

Um die Zweiteilchenoperatoren mittels Erzeugern und Vernichtern zu schreiben, schieben wir nun vier vollständige Summen wie $\sum_i |i\rangle_{(\alpha)} \langle i|_{(\alpha)}$ ein:

$$\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \sum_{ijklm} |i\rangle_{(\alpha)} |j\rangle_{(\beta)} \underbrace{\langle i_{\alpha} j_{\beta} | \hat{f} | k_{\alpha} m_{\beta} \rangle}_{f_{ijklm}} \langle k|_{(\alpha)} \langle l|_{(\beta)} \langle m|$$

Wir spalten die Summe über α und β auf, mittels $\sum_{\alpha \neq \beta} \dots = \sum_{\alpha\beta} \dots - \sum_{\alpha=\beta} \dots$ und betrachten zunächst nur den Operator-Anteil, lassen also $\sum_{ijklm} f_{ijklm}$ weg:

$$\sum_{\alpha\beta} \underbrace{|i\rangle_{(\alpha)} \langle k|_{(\alpha)}}_{\rightarrow \text{Einteilchen}} \underbrace{|j\rangle_{(\beta)} \langle m|_{(\beta)}}_{\text{Operator!}} - \sum_{\alpha=\beta} \underbrace{\langle \alpha | k | j \rangle_{(\beta)}}_{\rightarrow \delta_{kj}} \underbrace{|i\rangle_{(\alpha)} \langle m|_{(\beta)}}_{\alpha=\beta \rightarrow \text{Einteilchen-Operator}}$$

Die auftretenden Summen wie $\sum_{\alpha} |i\rangle_{(\alpha)} \langle j|_{(\alpha)} = a_i^{\dagger} a_j$ haben wir schon bei den

Einteilchen-Operatoren berechnet.

$$\begin{aligned}
 &= a_i^\dagger a_k a_j^\dagger a_m - \underbrace{\delta_{kj} a_i^\dagger a_m}_{\equiv a_i^\dagger \underbrace{[a_k, a_j^\dagger]}_{\delta_{kj}} a_m} \\
 &= \epsilon a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_m = a_i^\dagger a_j^\dagger a_m a_k \quad \text{für Bosonen und Fermionen!}
 \end{aligned}$$

Also $\hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \langle ij | \hat{f} | km \rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_m a_k$ ← Reihenfolge beachten!

Spezialfall Eigenbasis: \hat{f} sei in der Basis $|i\rangle$ diagonal, d.h., es ändere nicht die Quantenzahlen der Teilchen, auf die es wirkt. Es gelte also $\langle ij | \hat{f} | km \rangle = \delta_{ik} \delta_{jm} f(i, j)$

$$\Rightarrow \hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{ij} f(i, j) a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} f(i, j) \hat{n}_i \hat{n}_j + \frac{1}{2} \sum_i f(i, i) \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1)$$

Bei Fermionen verschwindet der letzte Term.

Beispiel: Coulomb-Potential $\frac{e^2}{|x-y|}$ in einem diskreten Ortsraum, der Einfachheit halber ohne Spin. Der zugehörige Zweiteilchenoperator ist *im Ortsraum* diagonal, denn er verschiebt keine Teilchen:

$$f_{xyx'y'} = \langle x_{(\alpha)} y_{(\beta)} | \hat{f} | x'_{(\alpha)} y'_{(\beta)} \rangle = \delta_{xx'} \delta_{yy'} \frac{e^2}{|x-y|} .$$

1.5 Transformationen zwischen Basissystemen. Feldoperatoren

Wir behandeln zunächst die Transformation zwischen verschiedenen Basissystemen im Vielteilchenraum und benutzen diese dann dazu, Operatoren im kontinuierlichen Ortsraum, sogenannte *Feldoperatoren* einzuführen.

1.5.1 Transformationen zwischen Basissystemen

Gegeben seien zwei (Einteilchen-) Basissysteme $\{|i\rangle\}$ und $\{|\lambda\rangle\}$. Im Einteilchenraum lautet die Transformation zwischen ihnen $|\lambda\rangle = \underbrace{\sum_i |i\rangle \langle i|}_{\mathbb{I}} |\lambda\rangle$

Für die Erzeuger und Vernichter gilt nun analog

$$\boxed{\begin{aligned} a_\lambda^\dagger &= \sum_i \langle i | \lambda \rangle a_i^\dagger \\ a_\lambda &= \sum_i \langle \lambda | i \rangle a_i \end{aligned}} \quad (*)$$

Beweis:

1. Diese Operatoren erfüllen die korrekten Vertauschungsrelationen.

$$\begin{aligned} [a_\lambda, a_{\lambda'}]_{-\epsilon} &= 0 \text{ wegen } [a_i, a_j]_{-\epsilon} = 0; & \text{genauso } [a_\lambda^\dagger, a_{\lambda'}^\dagger]_{-\epsilon} &= 0 \\ [a_\lambda, a_{\lambda'}^\dagger]_{-\epsilon} &= \sum_{ij} \underbrace{[a_i, a_j^\dagger]_{-\epsilon}}_{=\delta_{ij}} \underbrace{\langle \lambda | i \rangle \langle j | \lambda' \rangle}_{\rightarrow \delta_{\lambda\lambda'}} = \delta_{\lambda\lambda'} \end{aligned}$$

2. Aus (*) folgt auch sofort $a_\lambda^\dagger |0\rangle = \sum_i \langle i | \lambda \rangle a_i^\dagger |0\rangle = \sum_i \langle i | \lambda \rangle |i\rangle_\epsilon = |\lambda\rangle_\epsilon = |n_\lambda = 1\rangle$.

Zusammen mit den Vertauschungsrelationen folgt, daß die $a_\lambda^\dagger, a_\lambda$ die korrekten Erzeuger und Vernichter in der Basis $\{|\lambda\rangle\}$ sind.

Während wir bisher vorausgesetzt haben, daß die Quantenzahlen i diskret sind, können die Quantenzahlen λ jetzt auch kontinuierlich sein !

1.5.2 Feldoperatoren

Wir benutzen dies nun, um nun Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren im kontinuierlichen Ortsraum, die sogenannten Feldoperatoren, einzuführen.

Wir betrachten also die Ortsraumbasis $\{|x\rangle\}$, mit $\langle x' | x \rangle = \delta(x - x')$

(Falls weitere Quantenzahlen wie etwa zum Spin vorhanden sind, bleiben sie untransformiert.)

Die Koeffizienten der Basistransformation sind: $\langle x | i \rangle =: \psi_i(x)$
 = Einteilchen-Wellenfunktion zum Wert i der
 Quantenzahlen, in der Ortsdarstellung

Def.: “**Feldoperatoren**” = Erzeuger und Vernichter eines Teilchens am Ort x

$$\begin{array}{l} \hat{\psi}^\dagger(x) := \sum_i \psi_i^*(x) a_i^\dagger \\ \hat{\psi}(x) := \sum_i \psi_i(x) a_i \end{array}$$

Man beachte: $\psi_i(x)$ ist eine Wellenfunktion (komplexe Zahl), dagegen sind $\hat{\psi}(x)$, $\hat{\psi}^\dagger(x)$ Operatoren.

Achtung: Der Hut auf $\hat{\psi}(x)$, $\hat{\psi}^\dagger(x)$ wird oft weggelassen. Dann sind diese Operatoren nur aus dem Zusammenhang von den Wellenfunktionen wie “ $\psi(x)$ ” unterscheidbar!

Die Vertauschungsrelationen lauten wie üblich, mit $\delta(x - x')$ statt $\delta_{xx'}$.

1.5.3 Observable ausgedrückt in Feldoperatoren

Allgemein hatten wir schon hergeleitet

$$\text{Einteilchen-Operator } \hat{T} = \sum_{ij} \langle i | \hat{t} | j \rangle a_i^\dagger a_j \quad \text{mit} \quad \hat{T} = \sum_{\text{Teilchen } \alpha} \hat{t}_{(\alpha)}$$

$$\text{Zweiteilchen-Operator } \hat{F} = \frac{1}{2} \sum_{\underbrace{ijkm}_{\text{Zustände}}} \langle ij | \hat{f} | km \rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_m a_k$$

$$\text{mit } \hat{F} = \sum_{\underbrace{\alpha \neq \beta}_{\text{Teilchen}}} \hat{f}_{\alpha\beta}$$

Wir wenden diese Gleichungen nun bei den Feldoperatoren an.

Kinetische Energie

$$\begin{aligned}\hat{T} &= \sum_{\alpha} \frac{\hat{p}_{\alpha}^2}{2m} = \int dx dx' \langle x' | \frac{\hat{p}^2}{2m} | x \rangle \hat{\psi}^{\dagger}(x') \hat{\psi}(x) \\ &= \int dx \hat{\psi}^{\dagger}(x) \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \hat{\psi}(x)\end{aligned}$$

Einteilchenpotential

$$\begin{aligned}\hat{U} &= \sum_{\alpha} \hat{u}_{\alpha} = \int dx dx' \underbrace{\langle x' | \hat{u}_{\alpha} | x \rangle}_{U(x)\delta(x-x')} \hat{\psi}^{\dagger}(x') \hat{\psi}(x) \\ &= \int dx U(x) \hat{\psi}^{\dagger}(x) \hat{\psi}(x) = \int dx U(x) \hat{n}(x)\end{aligned}$$

Teilchenzahldichte $\hat{n}_x = \hat{\psi}^{\dagger}(x) \hat{\psi}(x)$

Gesamtteilchenzahloperator $\hat{N} = \int dx \hat{\psi}^{\dagger}(x) \hat{\psi}(x)$

Zweiteilchenoperator:

Für den im Ortsraum diagonalen Fall eines Potentials $V(x, x')$ (kein Teilchentransport), wie z.B. das Coulombpotential, erhalten wir sofort (s. Kap. 1.4.2)

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \int d^3x d^3y V(x, y) \hat{\psi}^{\dagger}(x) \hat{\psi}^{\dagger}(y) \hat{\psi}(y) \hat{\psi}(x)$$

Wir sehen aus obigen Beispielen, daß man die Vielteilchen-Operatoren \hat{T} und \hat{U} in Erzeugern und Vernichtern erhält, indem man “einfach” in den üblichen Ausdrücken der Einteilchen-Quantenmechanik die Wellenfunktion $\psi(x)$ durch den Vernichtungsoperator $\hat{\psi}(x)$ und $\psi^*(x)$ durch $\hat{\psi}^{\dagger}(x)$ (unter Beachtung der korrekten Reihenfolge) ersetzt !

Dies erinnert an den Übergang von der klassischen Physik (Funktionen T, U) zur Einteilchen-Quantenmechanik (Operatoren \hat{T} der kinetischen und \hat{U}) der potentiellen Energie und motiviert den Namen “2. Quantisierung” für den Übergang von der Einteilchen- zur Vielteilchen-Quantenmechanik.

Es gibt also eine formalen Analogie zwischen der Einteilchenphysik mit der Wellenfunktion $\psi(x)$ und ihrem Adjungierten $\psi^*(x)$ auf der einen Seite, und der Vielteilchenphysik mit den Operatoren $\hat{\psi}$ und $\hat{\psi}^{\dagger}$ auf der anderen Seite. Die 2. Quantisierung ergibt sich damit formal auch als

“Kanonische Quantisierung”: Ersetze ψ durch $\hat{\psi}$, ψ^* durch $\hat{\psi}^\dagger$, und “postuliere” Vertauschungsrelationen für $\hat{\psi}$ und $\hat{\psi}^\dagger$.

1.5.4 Bewegungsgleichung für Feldoperatoren

Man kann für die Feldoperatoren $\hat{\psi}(x)$, $\hat{\psi}^\dagger(x)$ auch Bewegungsgleichungen herleiten, die formal zur Schrödingergleichung analog sind.

Zur Erinnerung: Einteilchen-QM: (Index (1) an Bra- und Ket-Vektoren)

$$\begin{aligned} \text{Schrödingerbild: } |\varphi(t)\rangle_{(1)} &= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{(1)}t} |\varphi(0)\rangle_{(1)} \\ \Rightarrow {}_{(1)}\langle\varphi(t)|\hat{O}_{(1)}|\varphi(t)\rangle_{(1)} &= {}_{(1)}\langle\varphi(0)|\underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{(1)}t}\hat{O}_{(1)}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{(1)}t}}_{\hat{O}_{(1)}(t) \text{ im Heisenbergbild}}|\varphi(0)\rangle \end{aligned}$$

$$\text{Bewegungsgleichung für } \hat{O}_{(1)}(t): \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_{(1)}(t) = [\hat{O}_{(1)}(t), \hat{H}_{(1)}] + i\hbar\hat{U}^\dagger\left(\frac{d}{dt}\hat{O}(t)\right)\hat{U}$$

Vielteilchen-QM:

Dieselben Gleichungen gelten für die Tensorprodukte der obigen Objekte und die Vielteilchenoperatoren. Da man \hat{H} über Erzeuger und Vernichter ausdrücken kann, kann man auch diese Bewegungsgleichungen in Erzeugern und Vernichtern schreiben.

Beispiel: Sei $\hat{H} = \hat{T} = \sum_\alpha \frac{\hat{p}_{(\alpha)}^2}{2m} = \int dx' \hat{\psi}^\dagger(x') \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_{x'} \hat{\psi}(x')$

\Rightarrow Bewegungsgleichung für $\hat{\psi}(x)$:

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \hat{\psi}(x) &= [\hat{\psi}(x), \hat{H}] \\ &= \int dx' \left(\overbrace{\hat{\psi}(x) \hat{\psi}^\dagger(x') \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_{x'} \hat{\psi}(x')}^{\hat{H}} - \overbrace{\hat{\psi}^\dagger(x') \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_{x'} \hat{\psi}(x') \hat{\psi}(x)}^{\hat{H}} \right) \\ &= \int dx' \left(\underbrace{\hat{\psi}(x) \hat{\psi}^\dagger(x') - \hat{\psi}^\dagger(x') \hat{\psi}(x)}_{\delta(x-x')} \right) \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_{x'} \hat{\psi}(x') \\ &= \underline{\underline{-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_x \hat{\psi}(x)}} \end{aligned}$$

Allgemeiner: Für ein Vielteilchensystem mit kinetischer Energie $\sum_{\alpha} \frac{\hat{p}_{(\alpha)}^2}{2m}$, potentieller Energie $\sum_{\alpha} U^{(\alpha)}(x_{\alpha})$, und diagonalen Zweiteilchenwechselwirkung ergibt sich folgende Bewegungsgleichung für den Vernichtungsoperator im Ortsraum (s. z.B. Schwabl S. 24):

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \underbrace{\hat{\psi}(x)}_{\text{Vernichter}} &= [\hat{\psi}(x), \hat{H}] \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x) \right) \hat{\psi}(x, t) + \int dx' \hat{n}(x', t) V(x, x') \hat{\psi}(x, t). \end{aligned}$$

also wieder formal eine Analogie mit der Einteilchenphysik.

1.6 Impulsraum

Translationsinvariante Systeme sind im Impulsraum diagonal, d.h. der Impuls ist eine gute Quantenzahl. Dies ist ein Beispiel für das Noethersche Theorem, das wir sehr viel später besprechen werden. Anwendbar ist dies sowohl im kontinuierlichen Ortsraum, als auch im diskreten Raum eines Festkörpergitters. Der Operator der kinetischen Energie (aber nicht der gesamte Hamiltonoperator) ist oft im Impulsraum leicht diagonalisierbar. Als ein Beispiel dazu werden wir die freien Fermionen besprechen.

1.6.1 Fouriertransformation

Zur Erinnerung zunächst ein kurzer Überblick über Fouriertransformationen, ohne Konvergenzbetrachtungen.¹

Diskrete Fouriertransformation:

Gegeben sei eine (periodische) Funktion f auf N Punkten im Abstand a :

$$f(x_j), \quad x_j = a \cdot j, \quad j \bmod N = 0, 1, 2, \dots, N-1$$

Dann ist die fouriertransformierte Funktion bei den N Impulsen

$$k_n = \frac{2\pi}{Na} n, \quad n \bmod N = 0, 1, 2, \dots, N-1$$

¹Wir benutzen hier eine symmetrische Normierung von Orts- und Impulsraum, anders als im Buch von Schwabl.

gegeben, mit

$$\tilde{f}(k_n) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} e^{-i k_n x_j} f(x_j),$$

und $k_n \cdot x_j = \frac{2\pi}{N} n \cdot j$. Die Umkehrtransformation ist

$$f(x_j) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} e^{+i k_n x_j} \tilde{f}(k_n).$$

Sowohl der Ort als auch der Impuls sind nur mit einem Index modulo N relevant, können also jeweils zyklisch vertauscht werden.

Um die Umkehrbarkeit zu zeigen, benutzt man die endliche geometrische Reihe

$$\sum_{j=0}^{N-1} b^j = \frac{1 - b^N}{1 - b},$$

aus der sich

$$\sum_{j=0}^{N-1} e^{\frac{2\pi i}{N} j \cdot (n-m)} = N \delta_{((n-m) \bmod N), 0}$$

ergibt.

Kontinuierliche Fouriertransformation auf endlichem Intervall:

Den gemischt kontinuierlich/diskreten Fall erhält man im Limes $N \rightarrow \infty$ und gleichzeitig konstantem L :

Gegeben sei eine periodische Funktion f auf dem Intervall $[0, L)$ (oder z.B. $[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2})$):

$$f(x), \quad x \in [0, L]$$

Dann ist die Fouriertransformation auf den diskreten Impulsen

$$k_n = \frac{2\pi}{L} n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \infty$$

gegeben, mit

$$\tilde{f}(k_n) = \frac{1}{\sqrt{L}} \int_{x=0}^L e^{-i k_n x} f(x),$$

und $k_n \cdot x = \frac{2\pi}{L} n \cdot x$. Die Umkehrtransformation ist

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{+i k_n x} \tilde{f}(k_n).$$

Der Impuls wurde nun symmetrisch um Null gewählt.

Kontinuierliche Fouriertransformation einer nicht-periodischen Funktion:

Gegeben sei eine Funktion f :

$$f(x), \quad x \in \mathcal{R}$$

Dann ist die Fouriertransformation auf kontinuierlichen Impulsen $k \in \mathcal{R}$ gegeben, mit

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} f(x) .$$

Die Umkehrtransformation ist

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{+ikx} \tilde{f}(k) .$$

Um die Umkehrbarkeit zu zeigen, benutzt man

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i x \cdot (k-p)} = \delta(k-p) .$$

Die quantenmechanische Notation ist generell $f(x) = \langle x|f \rangle$ und $\tilde{f}(k) = \langle k|f \rangle$.

1.6.2 Basistransformation für Erzeuger und Vernichter

Wir transformieren nun Erzeuger und Vernichter in den Impulsraum. Allgemein hatten wir die Basistransformation schon im Abschnitt 1.5.1 hergeleitet. Für eine Einteilchenbasis $|\lambda\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i|\lambda\rangle$ gilt

$$a_{\lambda}^{\dagger} = \sum_i a_i^{\dagger} \langle i|\lambda\rangle$$

$$a_{\lambda} = \sum_i a_i \langle \lambda|i\rangle$$

Hier: Einteilchenbasis $|k\rangle = \int dx |x\rangle \underbrace{\langle x|k\rangle}_{\frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikx}}$

$$\Rightarrow \begin{cases} a_k^{\dagger} = \int dx \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikx} \hat{\psi}^{\dagger}(x) \\ a_k = \int dx \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-ikx} \hat{\psi}(x) \end{cases} ,$$

im Falle eines kontinuierlichen Ortsraumes endlicher Ausdehnung, also eines diskreten Impulsraumes. Wie schon gezeigt, bleiben die üblichen Vertauschungsrelationen wie $[a_k, a_{k'}^{\dagger}]_{-\epsilon} = \delta_{kk'}$ erhalten.

1.6.3 Vielteilchenoperatoren im Impulsraum

Die Teilchendichte ist im Ortsraum diagonal, nicht aber im Impulsraum (!):

$$\hat{n}(x) \equiv \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x) = \sum_{kk'} \frac{1}{V} e^{ix(k'-k)} a_k^\dagger a_{k'}$$

Der Operator der Gesamtteilchenzahl dagegen sieht im Impulsraum formal gleich aus wie im Ortsraum:

$$\hat{N} = \int dx \hat{n}(x) \equiv \underbrace{\int dx \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)}_{\text{gleiche Form}} = \sum_k a_k^\dagger a_k = \sum_k \hat{n}_k$$

mit dem Teilchenzahloperator im Impulsraum

$$\hat{n}_k = a_k^\dagger a_k$$

Achtung: Dieser Operator ist *nicht* dasselbe wie die Fouriertransformation der Dichte $\hat{n}(x)$!
 Letztere hat keinen gängigen eigenen Namen; sie lautet

$$\begin{aligned} \hat{n}(q) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \int dx \hat{n}(x) e^{-iqx} \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}} \int dx \sum_{kk'} \frac{1}{V} e^{ix(k'-k-q)} a_k^\dagger a_{k'} \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k a_k^\dagger a_{k+q} \end{aligned}$$

Die Kinetische Energie ist **im Impulsraum diagonal** (bei einem translationsinv. System)

$$\hat{T} = \sum_{\substack{\alpha \\ \text{Teilchen}}} \frac{\hat{p}_{(\alpha)}^2}{2m} = \sum_{kk'} \underbrace{\langle k | \frac{\hat{p}^2}{2m} | k' \rangle}_{\frac{\hbar^2}{2m} k^2 \delta_{kk'}} a_k^\dagger a_{k'} = \sum_k \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \underbrace{a_k^\dagger a_k}_{\hat{n}_k}$$

Das Einteilchenpotential $U(x)$: ist i.a. nur im Ortsraum diagonal:

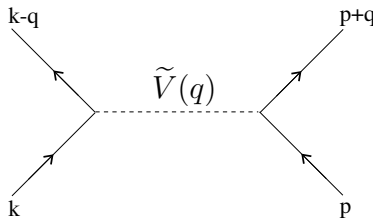
$$\begin{aligned}
 \hat{U} &= \sum_{\alpha} \hat{U}_{\alpha} = \sum_{kk'} \langle k | \hat{U} | k' \rangle a_k^{\dagger} a_{k'} \\
 &= \sum_{kk'} \int dx dx' \langle k | x \rangle \underbrace{\langle x | \hat{U} | x' \rangle}_{U(x) \delta(x-x')} \langle x' | k' \rangle a_k^{\dagger} a_{k'} \\
 &= \sum_{kk'} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{V}} \int dx e^{-ikx} e^{ik'x} U(x)}_{\frac{1}{\sqrt{V}} \tilde{U}(k-k')} a_k^{\dagger} a_{k'} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{kk'} \tilde{U}(k-k') a_k^{\dagger} a_{k'}
 \end{aligned}$$

Spezialfall: Wenn $U(x)$ nicht vom Ort abhängt, wie zum Beispiel ein chemisches Potential, dann ist das Einteilchenpotential einfach $U \hat{N}$, also proportional zum Operator der Gesamtteilchenzahl, und damit diagonal sowohl im Ortsraum als auch im Impulsraum.

Zweiteilchenpotential: analog.

Im besonders relevanten Fall, daß $V(x, x') = \frac{V(x-x')}{V}$ nur vom Abstand abhängt, wie etwa das Coulombpotential, ergibt sich mit $\tilde{V}(q) = \frac{1}{\sqrt{V}} \int dx e^{-iqx} V(x)$:

$$\begin{aligned}
 \hat{V} &= \frac{1}{2} \int dx dy V(x-x') \hat{\psi}^{\dagger}(x) \hat{\psi}^{\dagger}(y) \hat{\psi}(y) \hat{\psi}(x) \\
 &= \dots = \frac{1}{2\sqrt{V}} \sum_{qpk} \tilde{V}(q) \underbrace{a_{p+q}^{\dagger} a_{k-q}^{\dagger} a_k a_p}_{\text{Impulserhaltung!}}
 \end{aligned}$$



1.7 Spin

Der Spin σ tritt einfach als weitere Quantenzahl auf, zusätzlich zu beispielsweise Ort oder Impuls, also

$$\int dx \sum_{\sigma} \quad \text{oder} \quad \sum_k \sum_{\sigma} \quad \dots$$

mit Operatoren, die jetzt $\hat{\psi}_{x,\sigma}^{\dagger}$ und $a_{k,\sigma}^{\dagger}$ etc. lauten.

Die Symmetrisierung / Antisymmetrisierung erfolgt wie immer bezüglich des vollständigen Systems der Quantenzahlen, also hier bezüglich Ort und Spin.

Vertauschungsrelationen: $[a_{i\sigma}, a_{i'\sigma'}^{\dagger}] = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{ii'}$

Beispiel Spin- $\frac{1}{2}$: Die Pauli-Matrizen bezeichnen wir mit $\vec{\tau}$

Einteilchen-Spinoperatoren $\hat{S}^{(1)} = \frac{\hbar}{2} \vec{\tau}$

Vielteilchen-Spindichteoperator (s. Übung):

$$\begin{aligned} \hat{S}(x) &= \sum_{\text{Teilchen } \alpha=1}^N \delta(x - x_{\alpha}) \hat{S}_{\alpha}^{(1)} \\ &= \frac{\hbar}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma}^{\dagger}(x) \vec{\tau}_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma'}(x) \end{aligned}$$

Dieser Operator ist lokal im Ort, und hat bei festem Ort Vertauschungsrelationen wie die Spin- $\frac{1}{2}$ -Operatoren der QM I. Er beschreibt z.B. den Spin von Elektronen in einem Vielteilchensystem. Wenn die Elektronen sich (in einem approximativen Hamiltonian) nicht bewegen, kann man damit zu einem effektiven System von vielen wechselwirkenden quantenmechanischen Spins mit Wechselwirkungstermen wie $\hat{S}_x \hat{S}_y$ gelangen, einem quantenmechanischen Heisenbergmodell (s. Übungen).

1.8 Dichtematrix und endliche Temperatur

Wir haben bisher *reine* Vielteilchenzustände $|\psi\rangle$ beschrieben. Wie in der Einteilchenquantenmechanik ist es oft nützlich, auch eine *inkohärente Mischung* von Zuständen zuzulassen. Dies dient insbesondere der Beschreibung von physikalischen Systemen bei endlicher Temperatur. Genauso wie in der QM I erfolgt die Beschreibung über die

Dichtematrix (Operator!):
$$\hat{\rho} = \sum_m p_m |\psi_m\rangle \langle \psi_m|$$

mit Koeffizienten $p_m \geq 0$, $\sum_m p_m = 1$,

und beliebigen, auch nichtorthogonalen, aber normierten Zuständen $|\psi_m\rangle$.

Es gilt wieder

$$\text{tr } \hat{\rho} = 1, \quad \text{tr } \hat{\rho}^2 = \begin{cases} 1 : & \text{reiner Zustand} \\ < 1 : & \text{gemischter Zustand} \end{cases}$$

Erwartungswerte:

$$\langle \hat{O} \rangle = \sum_m p_m \langle \psi_m | \hat{O} | \psi_m \rangle = \sum_{nm} p_m \langle n | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \hat{O} | n \rangle = \text{tr } \hat{\rho} \hat{O}$$

N.B.: Wenn man $\hat{\rho}$ auf eine orthonormale Basis $|n\rangle$ transformiert,

$$\hat{\rho} = \sum_{nn'} |n\rangle \underbrace{\sum_m p_m \langle n | \psi_m \rangle \langle \psi_m | n' \rangle}_{\rho_{nn'}} \langle n'| = \sum_{nn'} \rho_{nn'} |n\rangle \langle n'|$$

so erhält man eine allgemeine Dichtematrix, die in dieser Basis auch *nicht-diagonal* sein kann! Sie ist für die Beschreibung von Systemen außerhalb des thermodynamischen Gleichgewichts besonders wichtig.

Für ein System im Gleichgewicht bei endlicher Temperatur beschreibt die Dichtematrix ein Ensemble von (in der Spektraldarstellung) Boltzmann-gewichteten Zuständen:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}} = \frac{1}{Z} \sum_i \underbrace{e^{-\beta \hat{E}_i}}_{\text{Boltzmanngewicht}} |i\rangle \langle i|$$

mit dem Normierungsfaktor $Z = \text{tr} e^{-\beta \hat{H}} = \text{“Zustandssumme”}$ ($\Rightarrow \text{tr} \rho = 1$) und der inversen Temperatur $\beta = \frac{1}{k_B T}$

$$\Rightarrow \boxed{\text{Thermodynamische Erwartungswerte } \langle \hat{O} \rangle = \text{tr} \hat{\rho} \hat{O} = \frac{\text{tr} \hat{O} e^{-\beta \hat{H}}}{\text{tr} e^{-\beta \hat{H}}}}$$

Im “kanonischen Ensemble” summiert man bei der Spur nur über einen Hilbertraum mit fester Teilchenzahl N .

Im “großkanonischen Ensemble” summiert man über den gesamten Fockraum; die Teilchenzahl ist also variabel. Dies beschreibt physikalisch z.B. ein System, das mit seiner Umgebung Teilchen austauschen kann.

Um eine gewünschte mittlere Teilchenzahl des betrachteten Systems einzustellen, führt man das *“chemische Potential”* μ ein und ersetzt in der Spur (im Zähler und im Nenner der obigen Gleichung) den Hamiltonoperator \hat{H} durch $\hat{H} - \mu \hat{N}$. Dies führt zu einer Umwichtung der Energie für verschiedene Teilchenzahlen. Die *Zeitentwicklung* von Zuständen wird dabei in der Literatur unterschiedlich behandelt. Wir werden im folgenden weiterhin den Zeitentwicklungsoperator $e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$ (ohne $\mu \hat{N}$) benutzen.

Klassisches (nicht quantenmechanisches) System: In der *Eigenbasis von \hat{H}* , wenn also die Dichtematrix diagonal ist, kann man \hat{H} durch seine Eigenwerte E_i ersetzen und erhält die *klassischen Boltzmanngewichte* $e^{-\beta E_i}$. Wenn auch die betrachteten Operatoren in der Eigenbasis alle diagonal sind, so gelangt man zur *klassischen statistischen Mechanik* (s. Vorlesungen über “statistische Mechanik” und über “Phasenübergänge und kritische Phänomene”).

1.9 Freie Fermionen

Wie wir schon gesehen haben, ist bei einem translationsinvarianten System der Operator der kinetischen Energie im Impulsraum diagonal. Systeme *freier Teilchen*, deren Hamiltonoperator nur den kinetischen Anteil umfaßt, sind also exakt lösbar und vermitteln wertvolle Einsicht in das Verhalten von Vielteilchensystemen.

Wir behandeln hier den sehr wichtigen Fall von freien Fermionen. Es stellt sich in der Festkörperphysik heraus, daß auch viele *wechselwirkende* Systeme durch effektive Freiheitsgrade (*“Quasiteilchen”*) beschrieben werden können, die

- (1) untereinander nicht wechselwirken (*“Fermi-Gas”*), oder
- (2) nur schwach wechselwirken und dabei noch eins-zu-eins den nicht-wechselwirkenden Teilchen entsprechen (*“Fermi-Flüssigkeit”*).

Der Hamiltonoperator bei freien Teilchen ist *diagonal im Impulsraum*

$$\hat{H} = \hat{T} = \sum_{\alpha} \frac{\hat{p}_{\alpha}^2}{2m} = \sum_{\sigma} \sum_k \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} k^2}_{\epsilon_k} \underbrace{a_{k\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma}}_{\hat{n}_{k\sigma}}$$

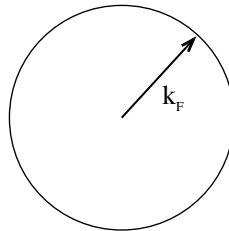
1.9.1 Grundzustand

Da $\hat{n}_{k\sigma} = a_{k\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma}$ bei Fermionen nur die Eigenwerte $n_{k\sigma} = 0, 1$ hat, kann jeder Impuls nur maximal zweifach (Spin \uparrow und \downarrow) besetzt sein. Im Grundzustand (Zustand niedrigster Energie) sind deswegen die Zustände mit den kleinsten Werten von ϵ_k , also die *untersten Impulse alle besetzt*, bis hinauf zu einem Impuls

$\hbar k_F$ (Fermi-Impuls) mit der Fermi-Energie $\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2$

In 3 Dimensionen bilden diese Zustände im Impulsraum eine Kugel, die Fermi-Kugel, und

der Grundzustand lautet



$$|\phi_0\rangle = \prod_{\substack{\vec{k} \\ |\vec{k}| \leq k_F}} \prod_{\sigma} a_{k\sigma}^{\dagger} |0\rangle$$

mit $\vec{k} = 2\pi \left(\frac{n_{px}}{L_x}, \frac{n_{py}}{L_y}, \frac{n_{pz}}{L_z} \right) \Rightarrow$ Volumen pro \vec{k} - Punkt ist $\frac{(2\pi)^3}{L_x L_y L_z}$ (in $d = 3$ Dimensionen)

Berechnung des Fermi-Impulses k_F (in $d=3$, mit $V = L_x L_y L_z$):

$$\text{Gesamtteilchenzahl } N = \sum_{k\sigma} n_{k\sigma} = 2 \cdot \sum_{|\vec{k}| \leq k_F} 1 \simeq 2 \frac{\frac{4\pi}{3} k_F^3}{\frac{(2\pi)^3}{V}} = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3$$

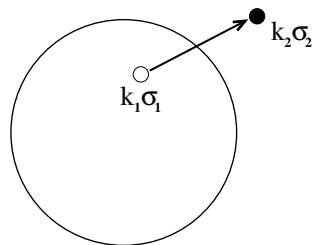
$$\Rightarrow \boxed{k_F^3 = 3\pi^2 \frac{N}{V} = 3\pi^2 \underbrace{n}_{\text{Dichte}}}$$

Teilchendichte im Ortsraum:

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}(x) \rangle &= \sum_{\sigma} \langle \phi_0 | \psi_{\sigma}^{\dagger}(x) \psi_{\sigma}(x) | \phi_0 \rangle \\ &= \sum_{\sigma} \sum_{kk'} \frac{1}{V} e^{-ix(k-k')} \underbrace{\langle \phi_0 | a_{k\sigma}^{\dagger} a_{k'\sigma} | \phi_0 \rangle}_{\delta_{kk'} n_{k\sigma}} \\ &= \frac{1}{V} \underbrace{\sum_{k\sigma} n_{k\sigma}}_N = n \quad : \quad \underline{\text{Die Teilchendichte ist r\u00e4umlich konstant}} \end{aligned}$$

Niedrigste Anregung aus dem Grundzustand:

Ein Fermion wird aus der Fermi-Kugel herausgenommen:



$\hat{=}$ Erzeugung eines Teilchen-Loch Paares

$$|\phi_1\rangle = a_{k_2 \sigma_2}^{\dagger} a_{k_1 \sigma_1} |\phi_0\rangle$$

Solche Teilchen-Loch-Paare (i.a. von Quasiteilchen) sind die elementaren Anregungen aus dem Grundzustand, mittels derer sich die Physik wechselwirkender Systeme in einer Störungstheorie oft sehr gut beschreiben lässt. Beispiel: In einem Festkörper werden Elektronen abgeschirmt und treten dadurch als Quasiteilchen mit einer effektiven Masse und einer effektiven Ladung auf.

1.9.2 Endliche Temperatur

Bei endlicher Temperatur tragen auch angeregte Zustände bei. Die großkanonische Zustandssumme kann man im Impulsraum exakt auswerten.

Hamiltonian: $\hat{H} = \sum_k \epsilon_k \hat{n}_k$ (der Einfachheit halber ohne Spin)

Zustandssumme:

$$\begin{aligned} Z &= \text{tr} e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} \equiv \sum_{|\psi\rangle \text{ im Fockraum}} \langle \psi | e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} | \psi \rangle \\ &= \sum_{\{n_q=0,1\}} \langle n_{q_0} n_{q_1} n_{q_2} \dots | e^{-\beta \sum_k (\epsilon_k - \mu) \hat{n}_k} | n_{q_0} n_{q_1} n_{q_2} \dots \rangle \\ &= \sum_{\{n_q=0,1\}} \langle n_{q_0} n_{q_1} n_{q_2} \dots | \prod_k e^{-\beta(\epsilon_k - \mu) n_k} | n_{q_0} n_{q_1} n_{q_2} \dots \rangle \\ &= \prod_k (e^{-\beta(\epsilon_k - \mu) \cdot 0} + e^{-\beta(\epsilon_k - \mu) \cdot 1}) \end{aligned}$$

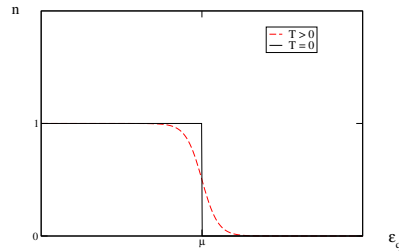
$Z = \prod_k (1 + e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)})$

 (Mit Spin tritt jeder Faktor doppelt auf.)

Dichteverteilung im Impulsraum:

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_p \rangle &= \frac{\text{tr} \hat{n}_p e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}}{\text{tr} e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}} = \frac{\left[\prod_{k \neq p} (1 + e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}) \right] \overbrace{(0 \cdot 1 + 1 \cdot e^{-\beta(\epsilon_p - \mu)})}^{k=p}}{\prod_k (1 + e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)})} \\ &= \frac{e^{-\beta(\epsilon_p - \mu)}}{1 + e^{-\beta(\epsilon_p - \mu)}} \end{aligned}$$

$\langle \hat{n}_p \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_p - \mu)} + 1}$



Wir finden die Fermi-Verteilung (Fermi-Dirac-Statistik der Teilchenzahlen).

Sie unterscheidet sich durch die 1 im Nenner von der Maxwell-Statistik, welche man

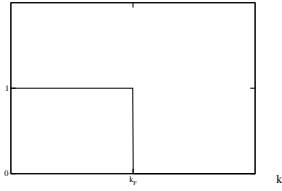
bei völlig unabhängigen Teilchen (ohne besondere Symmetrie) erhält. Dann fällt $\langle \hat{n}_k \rangle$ vom Wert $e^{\beta(\mu - \min(\epsilon_p))}$ aus langsam ab. Dieser klassische Grenzfall ergibt sich im Quantensystem bei $\beta(\epsilon_p - \mu) \gg 0$, was hohen Temperaturen und/oder geringen Dichten entspricht.

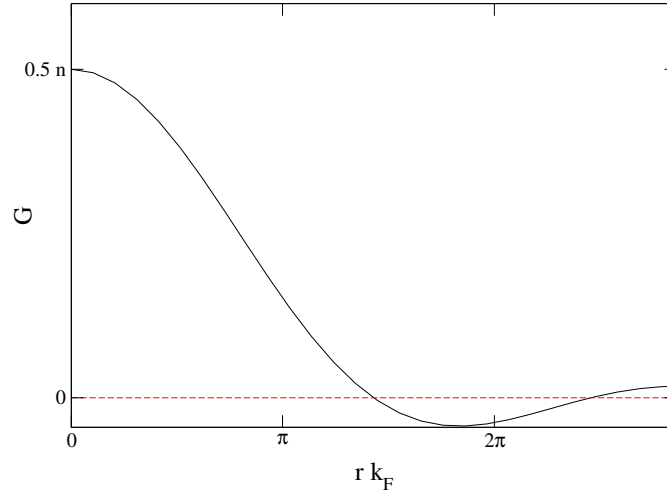
1.9.3 Einteilchen-Korrelationsfunktion (Greensfunktion) bei $T = 0$

Im nächsten Kapitel werden wir systematisch Korrelationen und Greensfunktionen behandeln, mittels derer sich die meisten physikalisch relevanten Observablen ausdrücken lassen. Als einen exakt lösbaren einfachen Fall berechnen wir jetzt die gleichzeitige Einteilchen-Greensfunktion von freien Fermionen.

$$G_\sigma(x - x') := \langle \phi_0 | \psi_\sigma^\dagger(x) \psi_\sigma(x') | \phi_0 \rangle$$

Dies ist die Wahrscheinlichkeits*amplitude* dafür, daß im Grundzustand die Vernichtung eines Teilchens bei x' und die Erzeugung eines Teilchens bei x wieder $|\phi_0\rangle$ ergibt, sie beschreibt also den Transport eines Teilchens von x' nach x .

$$\begin{aligned}
 G_\sigma(x - x') &= \sum_{kk'} \frac{1}{V} e^{-ikx + ik'x'} \underbrace{\langle \phi_0 | a_{k\sigma}^\dagger a_{k'\sigma} | \phi_0 \rangle}_{\Rightarrow k=k' \Rightarrow \hat{n}_{k\sigma} \mapsto n_{k\sigma}} \\
 &= \sum_k \frac{1}{V} e^{-ik(x-x')} \underbrace{n_{k\sigma}}_{=\Theta(k_F - k)} \\
 &\approx \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \\
 &= \frac{1}{V} \sum_{|\vec{k}| \leq k_F} e^{-ik(x-x')} \\
 &\approx \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} dk \, 2\pi \int_{-1}^1 d\cos\theta \underbrace{e^{-i|\vec{k}|(x-x')\cos\theta}}_{=\frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{ikr}, \quad r=|x-x'|} \\
 &= \frac{1}{2\pi^2 r} \int_0^{k_F} dk \, k \sin kr \\
 &= \boxed{\frac{3n}{2} \frac{\sin z - z \cos z}{z^3}, \quad z \equiv rk_F}
 \end{aligned}$$




Die Einteilchenkorrelationsfunktion fällt oszillierend mit der Periode $\frac{1}{k_F}$ ab, also mit dem Abstand, der durch die Fermi-Verteilung bestimmt ist.

1.9.4 Paarverteilungsfunktion bei Temperatur Null

Wegen der Antisymmetrie der Gesamtwellenfunktion beeinflussen sich Fermionen auch *ohne* weitere Wechselwirkung ! Wir sehen dies hier an der sogenannten Paarverteilungsfunktion. Wir beginnen mit dem Zustand $\psi_\sigma(r) |\phi_0\rangle$, bei dem ein Teilchen mit Spin σ am Ort r aus dem Grundzustand entfernt wurde. Er ist auf $\langle \phi_0 | \psi_\sigma^\dagger(r) \psi_\sigma(r) | \phi_0 \rangle = \frac{n}{2}$ normiert, wobei der Faktor 2 davon kommt, daß wir nicht über den Spin summiert haben. In diesem Zustand messen wir nun die Wahrscheinlichkeitsdichte $g_{\sigma\sigma'}(r)$, ein Teilchen mit Spin σ' im Abstand r vom ersten Teilchen zu finden, indem wir den Erwartungswert des Teilchendichteoperators $\hat{n}_{\sigma'}(0) = \psi_{\sigma'}^\dagger(0) \psi_{\sigma'}(0)$ bestimmen

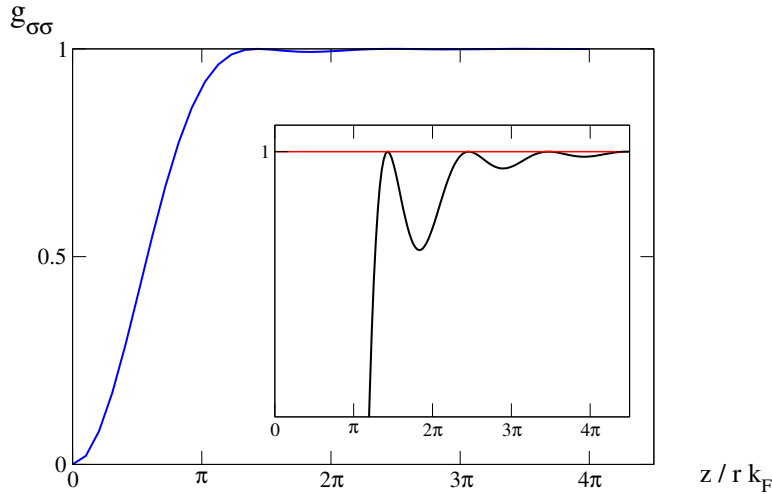
$$\begin{aligned}
 \left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{\sigma\sigma'}(r) &:= \langle \phi_0 | \psi_\sigma^\dagger(r) \overbrace{\psi_{\sigma'}^\dagger(0) \psi_{\sigma'}(0)}^{\hat{n}_{\sigma'}(0)} \psi_\sigma(r) | \phi_0 \rangle \\
 &= \langle \phi_0 | \hat{n}_\sigma(r) \hat{n}_{\sigma'}(0) | \phi_0 \rangle - \delta_{\sigma\sigma'} \delta^3(r) \langle \phi_0 | \psi_\sigma^\dagger(0) \psi_{\sigma'}(0) | \phi_0 \rangle \\
 &= \underbrace{\langle \phi_0 | \hat{n}_\sigma(r) \hat{n}_{\sigma'}(0) | \phi_0 \rangle}_{\text{Dichte-Dichte-Korrelation}} - \delta_{\sigma\sigma'} \delta^3(r) \langle \phi_0 | \hat{n}_\sigma(0) | \phi_0 \rangle
 \end{aligned}$$

Wir sehen, daß $g_{\sigma\sigma'}(r)$ im Wesentlichen gleich der Dichte-Dichte-Korrelation ist. Wir müssen nun zwei Fälle unterscheiden.

1. $\sigma \neq \sigma'$: $\delta_{\sigma\sigma'}$ trägt nicht bei; \hat{n}_σ und $\hat{n}_{\sigma'}$ sind unabhängig und liefern jeweils $\frac{n}{2}$
 $\Rightarrow g_{\sigma\neq\sigma'}(r) = 1$
2. $\sigma = \sigma'$: Mittels Transformation in den Impulsraum läßt sich g auf die oben berechnete Einteilchen-Korrelationsfunktion $G_\sigma(r)$ zurückführen. Man erhält

$$\left(\frac{n}{2}\right)^2 g_{\sigma\sigma'}(r) = \left(\frac{n}{2}\right)^2 - (G_\sigma(r))^2$$

$$\Rightarrow \boxed{g_{\sigma\sigma'}(r) = 1 - \frac{9}{z^6} (\sin z - z \cos z)^2}, \quad z \equiv k_F r$$



Wir sehen, daß die Paarverteilungsfunktion im Abstand Null bei Null beginnt und langsam ansteigt, weil die Wahrscheinlichkeit, zwei Fermionen gleichen Spins innerhalb des Abstandes $1/k_F$ zu finden, gering ist. Dieses sogenannte Korrelationsloch rührt nur von der Antisymmetrie der Fermionen her, nicht von Wechselwirkungen ! Zusätzlich sehen wir wieder Oszillationen mit der charakteristischen Länge $1/k_F$.

1.10 Freie Bosonen

Der Hamiltonoperator lautet wie bei freien Fermionen:

$$\hat{H} = \hat{T} = \sum_{\alpha} \frac{\hat{p}_{\alpha}^2}{2m} = \sum_k \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} k^2}_{\epsilon_k} \underbrace{a_{k\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma}}_{\hat{n}_{k\sigma}} \quad : \text{diagonal im Impulsraum}$$

Im Grundzustand sind nun alle Teilchen in *demselben* Quantenzustand mit niedrigster Energie, hier bei $k = 0$. Bei endlicher Temperatur verläuft die Rechnung analog zu der bei freien Fermionen:

Zustandssumme:

$$\begin{aligned} Z &= \text{tr} e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} \equiv \sum_{|\psi\rangle \text{ im Fockraum}} \langle \psi | e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} | \psi \rangle \\ &= \sum_{\{n_q=0\}} \langle n_{q_0} n_{q_1} n_{q_2} \dots | \prod_k e^{-\beta(\epsilon_k-\mu)\hat{n}_k} | n_{q_0} n_{q_1} n_{q_2} \dots \rangle \\ &= \prod_k \sum_{n_k=0}^{\infty} e^{-\beta(\epsilon_k-\mu)n_k} \end{aligned}$$

$$Z = \prod_k \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_k-\mu)}}$$

Dichteverteilung im Impulsraum:

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_k \rangle &= \frac{\text{tr} \hat{n}_k e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}}{\text{tr} e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}} = \frac{\sum_{\{n_k\}} n_k e^{-\beta \sum_p (\epsilon_p-\mu) n_p}}{\sum_{\{n_k\}} e^{-\beta \sum_p (\epsilon_p-\mu) n_p}} \\ &= \frac{\sum_{n_k} n_k e^{-\beta(\epsilon_k-\mu)n_k}}{\sum_{n_k} e^{-\beta(\epsilon_k-\mu)n_k}} = - \frac{\partial}{\partial x} \log \sum_{n_k=0}^{\infty} e^{-x n_k} \Bigg|_{x=\beta(\epsilon_k-\mu)} \\ &= - \frac{\partial}{\partial x} \log \frac{1}{1 - e^{-x}} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k-\mu)} - 1} \end{aligned}$$

Wir finden also die Bose-Einstein-Verteilung

Das chemische Potential muß bei Bosonen $\mu < \epsilon_k$ erfüllen, da sonst die Teilchenzahl divergieren würde.

In der Paarverteilungsfunktion findet man beim Abstand Null einen *erhöhten* Wert. Bosonen halten sich also im Gegensatz zu Fermionen bevorzugt am selben Ort auf.

Bose-Einstein-Kondensation: Wir betrachten ein System von freien Bosonen mit fester inverser Dichte $\rho = V/N$. Man kann zeigen, daß sich unterhalb einer Temperatur

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{k_B m} \left(\frac{\rho}{2.612} \right)^{2/3}$$

im thermodynamischen Limes $V \rightarrow \infty$ ein endlicher Anteil

$$\nu_0 = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}$$

der Bosonen im Grundzustand befindet. Der Grundzustand ist also *makroskopisch* besetzt. Dieses von Einstein aufgrund von Berechnungen von Bose vorhergesagt Phänomen konnte in den letzten Jahren an Systemen von Edelgasatomen geringer Dichte experimentell verifiziert werden.

Ein anderer Mechanismus, der zu einem makroskopischen Anteil von Bosonen im Grundzustand führt, ist derjenige der **Suprafluidität** von Helium-4, bei dem die *lineare Dispersion* $\epsilon(k)$ dazu führt, daß (Quasiteilchen-) Anregungen, die die Flüssigkeit abbremsen würden, unterhalb einer kritischen Geschwindigkeit energetisch ungünstig sind. Bei endlicher Temperatur ist ein makroskopischer Anteil des Heliums im superfluiden Zustand und der Rest im Normalzustand (“Zwei-Flüssigkeits-Modell”). Der superfluide Anteil geht bei der kritischen Temperatur $T_\lambda = 2.18K$ gegen Null.

Bei der **Supraleitung** bildet sich aus fermionischen Freiheitsgraden ein Grundzustand bosonischer *Cooperpaare*, in der Regel mit Spin und Impuls Null. Wenn es einen endlichen Energiesprung (Gap) zwischen dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand (mit einem Paar von fermionischen Quasiteilchen) gibt, dann ist auch bei endlicher Temperatur ein makroskopischer Anteil der Teilchen im Grundzustand. Darüberhinaus gibt es speziell bei Helium-3 (fermionisch !) bei etwa $10^{-3}K$ einen Übergang durch Paarbildung in einen superfluiden Zustand.

Kapitel 2

Korrelationen und Greensfunktionen

Die meisten physikalischen Meßgrößen, wie zeitunabhängige Eigenwerte von Observablen, Erwartungswerte $\langle \hat{A}(t) \rangle$, und Korrelationen $\langle \hat{A}(t)\hat{B}(t') \rangle$ lassen sich als sogenannte “retardierte Greensfunktionen” darstellen. Greensfunktionen (GF) sind auch essentielles Werkzeug für viele Näherungsmethoden, insbesondere für die Feynmansche Störungstheorie. An den Polen der Greensfunktionen kann man die Energie und Lebensdauer der schon erwähnten Quasiteilchen ablesen. Wir werden die Greensfunktionen und ihre frequenzabhängigen Eigenschaften systematisch einführen. Als Zugang dient uns die “Linear Response”-Theorie, welche die Antwort eines Systems auf eine kleine äußere Störung beschreibt.

Literatur: Die Bücher von Nolting
Schwabl
Mahan (Standardbuch)
u.v.a.m.

Achtung: Die Notation in der Literatur ist uneinheitlich.

2.1 Schrödinger-, Heisenberg- und Dirac-Bild

Als Hilfsmittel behandeln wir zunächst die verschiedenen Bilder der Quantenmechanik. Der Formalismus ist völlig gleich wie in QM I, jetzt aber mit Vielteilchen-Zuständen und Operatoren.

2.1.1 Schrödingerbild

Die Zeitabhängigkeit wird hier von den Zuständen getragen.

Bewegungsgleichung für reine Zustände $|\psi_S(t)\rangle$:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_S(t)\rangle = \hat{H} |\psi_S(t)\rangle$$

Unitärer Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}_S(t, t')$: $|\psi_S(t)\rangle = \hat{U}_S(t, t_0) |\psi_S(t_0)\rangle$

Bewegungsgleichung ist die Schrödingergleichung:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}_S(t, t_0) = H_t \hat{U}_S(t, t_0)$$

H_t : Hamiltonoperator, eventuell explizit zeitabhängig

Lösung: (von Neumannsche Reihe)

$$\begin{aligned} \hat{U}_S(t, t_0) &= 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 H_{t_1} + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H_{t_1} H_{t_2} + \dots \\ &\qquad\qquad\qquad t \geq t_1 \geq t_2 \geq \dots \\ &= \mathbf{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H_{t'}} \end{aligned}$$

mit dem Dysonschen Zeitordnungsoperator $\mathbf{T} (A_{t_1}, B_{t_2}) = \begin{cases} A_{t_1} B_{t_2} & t_1 > t_2 \\ B_{t_2} A_{t_1} & t_2 > t_1 \end{cases}$

Wenn \hat{H} nicht explizit zeitabhängig ist:

$$\hat{U}_S(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}}$$

Bewegungsgleichung für die Dichtematrix:

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \sum_m p_m |\psi_m\rangle \langle \psi_m| \\ i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho} &= [\hat{H}, \hat{\rho}] \end{aligned}$$

mit der Lösung : $\hat{\rho}(t) = \hat{U}_S(t, t_0) \hat{\rho}_S(t_0) \hat{U}_S^\dagger(t, t_0)$

Erwartungswerte:

$$\begin{aligned}\langle \hat{A}(t) \rangle &= \text{tr } \hat{\rho}(t) \hat{A} \quad (\text{allgemein}) \\ &= \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle \quad (\text{bei reinen Zuständen})\end{aligned}$$

2.1.2 Heisenbergbild

Hier ist die Zeitabhängigkeit in den Operatoren enthalten. Das Heisenbergbild ergibt sich durch unitäre Transformation aus dem Schrödingerbild.

Zustand $|\psi_H\rangle := |\psi_S(t_0)\rangle = U_S^\dagger(t, t_0) |\psi_S(t)\rangle$

Operator $\hat{A}_H(t) = \hat{U}_S^\dagger(t, t_0) \hat{A}_S(t_0) \hat{U}_S(t, t_0)$

Der Zeitentwicklungsoperator \hat{U}_S ist derselbe wie im Schrödingerbild.

Bewegungsgleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = [\hat{A}_H, \hat{H}_H] + \underbrace{i\hbar \hat{U}_S^\dagger(t, t_0) \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_S \hat{U}_S(t, t_0)}_{\text{falls } \hat{A}_S \text{ explizit zeitabhängig ist}}$$

Erwartungswerte: Genauso wie beim Schrödingerbild.

2.1.3 Dirac-Bild = Wechselwirkungsbild (= interaction picture)

Dieses Bild nimmt eine Mittelstellung zwischen Schrödinger- und Heisenberg-Bild ein. Wir teilen jetzt den Hamiltonoperator auf. Es sei

$$\boxed{\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_t}$$

und \hat{H}_0 nicht explizit zeitabhängig. \hat{H}_0 braucht nicht exakt gelöst zu sein. Wir definieren den Diracschen Zustandsvektor

$$|\psi_D(t)\rangle := U_0^\dagger(t, t_0) |\psi_S(t)\rangle \quad \text{mit} \quad U_0(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_0}$$

Im Fall von $\hat{V}_t = 0$ erhält man wieder den Heisenbergschen Zustandsvektor.

Bei t_0 sind alle Zustände gleich: $|\psi_D(t_0)\rangle = |\psi_S(t_0)\rangle = |\psi_H\rangle$.

Die Zeitabhängigkeit der Zustände wird jetzt durch \hat{V}_t bestimmt und diejenige der Operatoren durch \hat{H}_0 :

Operatoren: $\hat{A}_D(t) = e^{\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_0} \hat{A}_S e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_0}$

genauso: $\hat{U}_D(t, t_0) := \hat{U}_0^\dagger(t, t_0) \hat{U}_S(t, t_0) \hat{U}_0(t, t_0)$

Zustände: $|\psi_D(t)\rangle = \hat{U}_D(t, t_0) |\psi_D(t_0)\rangle$

Bei fehlender Wechselwirkung sind Dirac- und Heisenbergbild identisch.

Bewegungsgleichungen:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_D(t) = [\hat{A}_D, \hat{H}_0] + i\hbar \hat{U}_0^\dagger(t, t_0) \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_S \right) \hat{U}_0(t, t_0)$$

: wie Heisenbergbild, aber mit \hat{H}_0 statt \hat{H}

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_D(t)\rangle = \hat{V}_t^D(t) |\psi_D(t)\rangle$$

: wie Schrödingerbild, aber mit \hat{V}_t^D statt \hat{H}

$\hat{V}_t^D(t)$ ist im Argument “(t)” über H_0 zeitabhängig wie jeder Operator im Diracbild. Außerdem kann es über den unteren Index t explizit zeitabhängig sein.

Bewegungsgleichung für die Dichte-Matrix: $i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}_D(t) = [\hat{V}_t^D(t), \hat{\rho}_D(t)]$

Achtung: Die Bewegungsgleichung für \hat{U}_D : $i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}_D(t, t_0) = \hat{V}_t^D(t) \hat{U}_D(t, t_0)$
 lautet genauso wie diejenige eines Zustands und hat die Lösung

$$\begin{aligned} \hat{U}_D(t, t_0) &= \mathbf{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tilde{t} \hat{V}_{\tilde{t}}^D(\tilde{t})} \\ &= \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_{t_1}^D(t_1) + \dots \end{aligned}$$

Diese Gleichung ist der Ausgangspunkt für die diagrammatische Störungstheorie mittels Greenscher Funktionen, in welcher man in Potenzen von \hat{V}^D entwickelt.

2.2 Linear Response

Wir möchten die Wechselwirkung eines Systems mit einem äußeren Feld (einer “Störung”) beschreiben. Sie wird durch “Response-Größen” beschrieben, z.B.

elektrische Leitfähigkeit
 magnetische Suszeptibilität
 Wärmeleitfähigkeit

Diese Response-Größen lassen sich in der Theorie der Linear Response (“Lineare Antwort”) als sogenannte “retardierte Greensfunktionen” beschreiben. Wie in der Einleitung dieses Kapitels schon erwähnt, geben die Greensfunktionen auch Auskunft über die Eigenschaften des ungestörten Systems.

Wir arbeiten im Dirac-Bild.

Hamiltonoperator: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_t$ mit “Störung” $\hat{V}_t = \lambda_t \hat{B}$

λ_t : komplexe Zahl, i. a. zeitabhängig

\hat{B} : beliebiger Operator

Es sein nun \hat{A} ein nicht explizit zeitabhängiger Operator.

Wir möchten die *Änderung des Erwartungswertes* $\langle \hat{A} \rangle$ *aufgrund der Störung* \hat{V}_t berechnen.

Ohne Störung: $\langle \hat{A} \rangle_0 = \text{tr}(\hat{\rho}_0 \hat{A})$, mit $\hat{\rho}_0 = \frac{e^{-\beta(\hat{H}_0 - \mu \hat{N})}}{\text{tr} e^{-\beta(\hat{H}_0 - \mu \hat{N})}}$

Mit Störung:

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = \text{tr} \left(\hat{\rho}(t) \hat{A} \right), \quad \hat{\rho}(t) = \hat{U}_S(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}_S^\dagger(t, t_0)$$

Die Störung werde irgendwann eingeschaltet. Wir wählen $t_0 = “-\infty”$, dort sei also keine Störung vorhanden: $\hat{\rho}(t_0 = -\infty) = \hat{\rho}_0$. [Randbedingung!]

$$\Rightarrow \hat{\rho}(t) = \hat{U}_S(t, -\infty) \hat{\rho}_0 \hat{U}_S^\dagger(t, -\infty)$$

Setze $\hat{U}_S = \hat{U}_0 \underbrace{\hat{U}_D}_{\text{Dirac}} \hat{U}_0^\dagger$ ein (alle bei $(t, -\infty)$), mit $\hat{U}_0(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} t \hat{H}_0}$

Wir ziehen \hat{U}_0 ganz nach rechts:

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle(t) &= \text{tr} \hat{U}_0 \overrightarrow{\hat{U}_D \hat{\rho}_0 \hat{U}_0^\dagger \hat{U}_D^\dagger \hat{U}_0^\dagger \hat{A}} \\ & \qquad \qquad \qquad \hat{\rho}_0(t) \qquad \hat{A}^D(t): \text{Zeitenwickl. nur mit } \hat{H}_0 \\ &= \text{tr} \hat{U}_D \hat{\rho}_0(t) \hat{U}_D^\dagger \hat{A}^D(t) \\ & \text{Benutze nun } \hat{U}_D(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_{t_1}^D + \dots \\ & \text{nur bis zur ersten Ordnung in der Störung: "linear response"} \\ &\approx \text{tr} \left\{ (1-x) \hat{\rho}_0(t) (1+x) \hat{A}^D(t) \right\} \quad \text{mit } x = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt_1 \hat{V}_{t_1}^D(t_1) \\ &= \underbrace{\text{tr} \left(\hat{\rho}_0(t) \hat{A}^D(t) \right)}_{\langle \hat{A} \rangle_0(t)} + \underbrace{\text{tr} \left(\hat{\rho}_0 x \hat{A}^D(t) \right) - \text{tr} \left(x \hat{\rho}_0 \hat{A}^D(t) \right)}_{\text{tr}(\hat{\rho}_0[x, \hat{A}^D(t)])} + \mathcal{O}(\lambda^2) \end{aligned}$$

Setzen wir nun x mit der Störung $\hat{V}_t = \lambda_t \hat{B}$ ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} &= \langle \hat{A} \rangle_0(t) - \underbrace{\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \lambda_{t'} \langle [\hat{A}^D(t), \hat{B}^D(t')] \rangle_0}_{= \langle \hat{A} \rangle(t) - \langle \hat{A} \rangle_0(t) =: \Delta \langle \hat{A} \rangle(t)} \leftarrow \text{mit } \hat{\rho}_0 \end{aligned}$$

Retardierte Greensfunktion: Die Änderung des Erwartungswertes ("Lineare Antwort")

$\Delta \langle \hat{A} \rangle(t) \equiv \langle \hat{A} \rangle(t) - \langle \hat{A} \rangle_0(t)$ kann man auch als Integral über eine Greensfunktion schreiben :

$$\boxed{\Delta \langle \hat{A} \rangle(t) = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \lambda_{t'} G_{AB}^{\text{ret}}(t, t')} \quad \text{Dies ist eine "Kubo-Formel"}$$

mit dem Kern (weitere Schreibweisen in der ersten Zeile)

$$\boxed{\begin{aligned} G_{AB}^{\text{ret}}(t, t') &\equiv \langle \langle \hat{A}^D(t); \hat{B}^D(t') \rangle \rangle_0 \stackrel{\text{Schwabl}}{\equiv} -\hbar \chi_{AB}(t, t') \\ &:= -i \theta(t-t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')] \rangle_0 \leftarrow \text{alles bei } \lambda=0 \end{aligned}}$$

$\theta(t-t')$ stellt die Kausalität sicher: $A(t)$ wird nur von $t' < t$ beeinflusst. Daher kann in der Kubo-Formel die obere Integrationsgrenze formal unendlich sein.

Es stellt sich als nützlich heraus, zusätzlich zu dieser Kommutator-Greensfunktion ($\eta = +1$) auch eine Antikommutator-Greensfunktion ($\eta = -1$) zu definieren, also allgemein:

$$\boxed{G_{AB}^{\text{ret}, \eta}(t, t') = -i \theta(t-t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')]_{-\eta} \rangle_0}$$

- Wie wir bald zeigen werden, hängt G bei nicht zeitabhängigem H_0 nur von der Zeitdifferenz $(t - t')$ ab.

N.B.: Man kann mit demselben Formalismus auch Fälle mit einer großen Störung behandeln, indem man statt um $\lambda = 0$ um ein endliches λ entwickelt, oder mit anderen Worten, indem man den größten Teil der “Störung” in \hat{H}_0 hineinsteckt, das dabei allerdings zeitabhängig werden kann.

2.3 Beispiele

2.3.1 Magnetische Suszeptibilität

- Wir betrachten ein System von Spins \vec{S}_i
- Störung sei ein räumlich homogenes, zeitlich variables Magnetfeld $\lambda_t \vec{b}$

$$\text{Es koppelt an das magnetische Moment } \vec{m} = \sum_i \vec{m}_i = \frac{g\mu_0}{\hbar} \sum_i \vec{S}_i$$

$$\Rightarrow \text{Stör-Hamiltonian } \hat{V}_t = -\lambda_t \vec{m} \cdot \vec{b} = -\lambda_t \sum_{\alpha=x,y,z} \hat{m}^\alpha b^\alpha$$

- Untersuche z.B. die Gesamt-Magnetisierung $\vec{M} := \frac{1}{V} \langle \vec{m} \rangle$ (V : Volumen)
Wähle das äußere Magnetfeld \vec{b} parallel zur Magnetisierung. Dann ist die Änderung der Komponente β der Gesamtmagnetisierung

$$\begin{aligned} \Delta M^\beta(t) &= -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \lambda_{t'} G_{\frac{1}{V} \hat{m}^\beta, \vec{m} \cdot \vec{b}}^{ret,+} \\ &= -\frac{1}{\hbar V} \sum_{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \lambda_{t'} b^\alpha \langle \langle m^\beta(t) ; m^\alpha(t') \rangle \rangle \end{aligned}$$

- Da das magnetische Moment \vec{m} zur Summe der Spins proportional ist, ist also allgemeiner alle räumliche, zeitliche, und komponentenbezogene Information in der

<u>Magn. Suszeptibilität</u>	$\chi_{ij}^{\beta\alpha}(t, t') := -\frac{\mu_0}{V\hbar} \frac{g^2 \mu_B^2}{\hbar^2} \langle \langle \hat{S}_i^\beta(t) ; \hat{S}_j^\alpha(t') \rangle \rangle$
------------------------------	---

enthalten. Sie beschreibt die Reaktion der Spin-Komponente \hat{S}^β am Platz i auf eine Änderung der Komponente \hat{S}^α am Platz j . χ ist im Energie- und Impulsraum mittels Neutronenstreuung experimentell gut meßbar.

Aus der Suszeptibilität bekommt man z.B. die gesuchte Änderung der Gesamtmagnetisierung als

$$\Delta M^{(\beta)}(t) = \frac{1}{\mu_0} \sum_{ij} \sum_{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \lambda_{t'} b^{\alpha} \chi_{ij}^{\beta\alpha}(t, t')$$

- Spezialfälle:

Die longitudinale Suszeptibilität χ_{ij}^{zz} mißt die Parallelität der Spins an den Plätzen i und j . Wenn Ferromagnetismus auftritt (“spontane Symmetriebrechung”, siehe Vorlesung über Phasenübergänge), dann sind die Spins bei unendlich großen Abständen parallel ausgerichtet. Die Fouriertransformierte $\chi_{\mathbf{q}}^{zz}$ divergiert dann bei $\mathbf{q} = 0$. Im Falle von Antiferromagnetismus divergiert sie bei $\mathbf{q} = (\pi, \pi, \pi)$.

Die transversale Suszeptibilität χ_{ij}^{+-} zeigt (nach Fouriertransformation vom Zeit- in den Energie-Raum) Pole bei den Energien der Anregungen des Spinsystems, den sogenannten Spinwellen oder Magnonen.

Wir sehen an diesen Beispielen, daß die Responsefunktionen in der Tat Informationen auch über das ungestörte System liefern.

Analog: Elektrische Leitfähigkeit als Reaktion auf ein äußeres elektrisches Feld.

2.3.2 Freie Fermionen

Wir berechnen die retardierte Ein-Elektron (Kommutator-) Greensfunktion $G_{a_k a_k^\dagger}^{\text{ret},+}$ für freie Fermionen direkt anhand der Definition. Diese Funktion ist sehr nützlich, denn im Energieraum (s.u.) hat sie Pole bei den Anregungsenergien ϵ_k .

Der Hamiltonoperator lautet $\hat{H} = \sum_k \epsilon_k a_k^\dagger a_k$. Aus den Heisenbergschen Bewegungsgleichungen folgt die Zeitabhängigkeit der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$a_k(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_k t} a_k, \quad a_k^\dagger(t) = e^{+\frac{i}{\hbar} \epsilon_k t} a_k^\dagger.$$

Einsetzen in die Definition von $G_{a_k a_k^\dagger}^{\text{ret},+}$ ergibt:

$$\begin{aligned} G_{a_k a_k^\dagger}^{\text{ret},+}(t, t') &= -i \theta(t - t') \langle [a_k(t), a_k^\dagger(t')] \rangle_0 \\ &= -i \theta(t - t') e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_k (t-t')} \langle [a_k, a_k^\dagger] \rangle_0 \end{aligned}$$

Mit $a_k a_k^\dagger - a_k^\dagger a_k = a_k a_k^\dagger + a_k^\dagger a_k - 2 a_k^\dagger a_k$ ergibt sich

$$\boxed{G_{a_k a_k^\dagger}^{\text{ret},+}(t, t') = -i \theta(t - t') e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_k (t-t')} (1 - 2 \langle \hat{n}_k \rangle)}$$

Wir sehen eine Oszillation mit der Anregungsenergie ϵ_k , die im Energieraum zu einem Pol wird (s.u.). Wenn man die Greensfunktion stattdessen mit dem Antikommutator berechnet (s.u.), dann fällt der Faktor $(1 - 2 \langle \hat{n}_k \rangle)$ fort.

2.4 Korrelationsfunktionen

Die Greensfunktionen sind aus Korrelationsfunktionen aufgebaut, wie

$$\begin{aligned} C(t, t') &:= \langle \hat{A}(t) \hat{B}(t') \rangle_{0 \leftarrow H = H_0} \text{ nicht explizit zeitabhängig} \\ &= \text{tr } \hat{\rho}_0 e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t'} \hat{B} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t'} \end{aligned}$$

Da die Spur zyklisch ist und $\hat{\rho}_0$ nur von H_0 abhängt, kann man den letzten e-Faktor nach vorne ziehen und mit dem ersten kombinieren

$$\begin{aligned} &= \text{tr } \hat{\rho}_0 e^{\frac{i}{\hbar} H_0 (t-t')} \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 (t-t')} \hat{B} \\ &= \langle \hat{A}(t - t') \hat{B}(0) \rangle_0 \\ &= C(t - t') : \quad \underline{\text{hängt nur von der Zeitdifferenz ab}} \text{ (wenn } H_0 \text{ zeitunabh.)} \end{aligned}$$

- Korrelationsfunktionen sind *meßbar*; z.B. ergibt sich der kohärente Anteil des Streuquerschnitt(s) bei Neutronenstreuung an Atomkernen durch die Dichte-Dichte Korrelationsfunktion (siehe unten und z.B. Schwabl, Kap. 4.1).

2.4.1 Spektraldarstellung in der Zeit

Spektraldarstellung: Darstellung über Eigenzustände $|n\rangle$ von \hat{H}_0

Def.: Als Bausteine aller Greensfunktionen benutzen wir die beiden Korrelationsfunktionen

$$\begin{aligned}
 G_{AB}^>(t) &:= \langle \hat{A}(t) \hat{B}(0) \rangle_0 \\
 &= \frac{1}{Z} \text{tr} \left[e^{-\beta(H_0 - \mu \hat{N})} e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \hat{B} \right] \\
 &\quad \downarrow \qquad \qquad \qquad \uparrow \\
 &\quad |n\rangle \langle n| \qquad \qquad \qquad |m\rangle \langle m| \\
 &= \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} e^{\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t} \langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 G_{AB}^<(t) &:= \langle \hat{B}(0) \hat{A}(t) \rangle_0 \\
 &= \frac{1}{Z} \text{tr} \left[e^{-\beta(H_0 - \mu \hat{N})} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \hat{B} e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \hat{A} \right] \\
 &\quad \downarrow \qquad \qquad \qquad \uparrow \\
 &\quad |m\rangle \langle m| \qquad \qquad \qquad |n\rangle \langle n| \\
 &= \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_m - \mu N_m)} e^{\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t} \langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle \\
 &\quad \uparrow \\
 &\quad \text{einziger Unterschied: m statt n}
 \end{aligned}$$

2.4.2 Spektraldarstellung in der Energie

Fouriertransformation in der Zeit: (FT allgemein von der Form $\frac{1}{\sqrt{V}} \int dx dt e^{-i(kx - \omega t)}$)

$$\tilde{f}(\omega) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dt e^{+\frac{i}{\hbar} E t} f(t) \quad ; \quad \tilde{f}(E) := \tilde{f}(\omega)$$

Vorsicht: Wir folgen nun der Konvention von Nolting und definieren $\tilde{f}(E) \equiv \tilde{f}(\omega)$, also $|E\rangle = |\omega\rangle$ und somit $\langle E|E'\rangle = \hbar \delta(E - E')$ sowie $\int dE |E\rangle \langle E| = \hbar \mathbb{1}$. Dies unterscheidet sich von der in QM I benutzten Konvention im Impulsraum, wo wir $|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} |k\rangle$ definiert hatten und somit $\langle p|p'\rangle = \delta(p - p')$!

$$\Rightarrow G_{AB}^>(E) = \dots \underbrace{\int dt e^{\frac{i}{\hbar}(E+E_n-E_m)t}}_{\hbar 2\pi\delta(E+E_n-E_m)} \dots$$

$$G_{AB}^>(E) = \frac{\sqrt{2\pi}}{Z} \hbar \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n-\mu N_n)} \delta(E - (E_m - E_n)) \langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle$$

$$G_{AB}^<(E) = \frac{\sqrt{2\pi}}{Z} \hbar \sum_{n,m} e^{-\beta(E_m-\mu N_m)} \delta(E - (E_m - E_n)) \langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle$$

$$\left[\begin{array}{l} \text{Spezialfall: } B = A^\dagger \Rightarrow \langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle = |\langle n | \hat{A} | m \rangle|^2 \\ \Rightarrow G^>(\omega) \text{ reell} \end{array} \right]$$

- $\delta(E - E_m + E_n) \Rightarrow E_m = E_n + E$
 $\Rightarrow e^{-\beta(E_m-\mu N_m)} = e^{-\beta(E_n-\mu N_n)} e^{-\beta(E-\mu\Delta N_B)}$

$\Delta N_B = N_m - N_n$ ist eine mögliche Teilchenzahländerung durch den Operator \hat{B} ,
 so daß $|n\rangle$ und $|m\rangle$ in $\langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle$
 verschiedene Teilchenzahlen haben.

$$\Rightarrow \boxed{G_{AB}^<(E) = G_{AB}^>(E) e^{-\beta(E-\mu\Delta N_B)}}$$

- Konsequenz für Streuexperimente: Z.B. ist der kohärente Anteil des Streuquerschnittes bei Neutronenstreuung zur Dichte-Dichte-Korrelation $G_{nn}^>(E)$ proportional (s. z.B. Schwabl). Durch Ersetzen $t \mapsto -t$ in der Definition von $G^>$ sieht man dann

$$\hat{A} = \hat{B} \Rightarrow G_{AA}^>(E) = G_{AA}^<(-E) = G_{AA}^>(-E) e^{+\beta(E-\mu\Delta N_B)}$$

Es folgt, daß die Linien für Emission (Übergang von einem energetisch höheren Zustand zu einem tieferen) um $e^{-\beta E}$ schwächer als Linien für Absorption (Übergang vom tiefer liegenden Zustand zum höheren) sind. Dies folgt auch daraus, daß sich die Besetzungen der Zustände wie $e^{-\beta E}$ verhalten.

2.5 Spektraldichte

Die Spektraldichte ist wie die retardierte Greensfunktion aufgebaut, aber ohne den Faktor $\theta(t - t')$. Das führt im Energieraum zu einer einfacheren Struktur ohne Pole. Wie werden sehen, daß man aus der Spektraldichte die Greensfunktionen wieder extrahieren kann.

Die Spektraldichte wird in zwei Varianten benutzt, mit einem Kommutator ($\eta = +1$) oder mit einem Antikommutator ($\eta = -1$):

$$\begin{aligned} S_{AB}^{(\eta)}(t) &:= \frac{1}{2\pi} \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(0)]_{-\eta} \rangle_0 \\ &\equiv \frac{1}{2\pi} (G_{AB}^>(t) - \eta G_{AB}^<(t)) , \quad \eta = \pm 1 \text{ je nach Nützlichkeit} \end{aligned}$$

Beispiel: Freie Fermionen: Direkt aus der Definition können wir die Einteilchen-Spektraldichte freier Fermionen ausrechnen. Für die Antikommutator-Variante ergibt sich sofort

$$S_{a_k a_k^\dagger}^{(-)}(t) = \frac{1}{2\pi} \langle [a_k(t), a_k^\dagger(0)]_+ \rangle_0 = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{i}{\hbar} \epsilon_k t}$$

eine Oszillation mit der Einteilchenenergie ϵ_k und durch Fouriertransformation

$$S_{a_k a_k^\dagger}^{(-)}(E) = \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi}} \delta(E - \epsilon_k) .$$

Bei der Kommutatorvariante erhält man wieder zusätzlich den Faktor $(1 - 2 \langle \hat{n}_k \rangle)$.

Die Spektraldichte zeigt also unmittelbar die Energien des Systems.

Beispiel: Fermionen im Grundzustand: Aus dem Grundzustand $|E_0\rangle$ entsteht durch Hinzufügen eines Elektrons (\vec{k}, σ) mit $|\vec{k}| > k_F$ der Zustand

$$|\varphi(t)\rangle = a_{\vec{k}, \sigma}^\dagger(t) |E_0\rangle ,$$

bei dem es sich im allgemeinen Fall nicht unbedingt um einen Eigenzustand des Hamiltonians handeln muß. Wegen $|\vec{k}| > k_F$ trägt zu der Spektraldichte $S_{a_k a_k^\dagger}^{(-)}(t)$ mit $t > 0$ nur einer der beiden Summanden im Antikommutator bei und es gilt

$$2\pi S_{a_k a_k^\dagger}^{(-)}(t) = \langle \varphi(t) | \varphi(0) \rangle \equiv \langle E_0 | a_k(t) a_k^\dagger(0) | E_0 \rangle .$$

$2\pi S_{a_k a_k^\dagger}^{(-)}(t)$ ist daher die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, daß der zur Zeit $t = 0$ durch Hinzufügen eines Elektrons zum Grundzustand entstandene Zustand $|\varphi(0)\rangle$ zur Zeit $t > 0$ noch existiert. $S_{a_k a_k^\dagger}^{(-)}(t)$ charakterisiert also die zeitliche Entwicklung (Propagation) eines zusätzlichen (\vec{k}, σ) Elektrons. Analog wird mit $|\vec{k}| < k_F$ und $a_k(t)|E_0\rangle$ die Propagation eines Lochs beschrieben.

2.5.1 Fluktuations-Dissipationstheorem

Die Kommutator-Spektraldichte ($\eta = 1$) hat auch einen anderen Namen:

$$S_{AB}^{(+)}(t) \equiv \frac{\hbar}{\pi} \chi''_{AB}(t) : \quad \text{“dissipative Antwort”}$$

Daß sie mit Dissipation zu tun hat, sieht man z.B. an der folgenden Überlegung. Für eine Störung der Form

$$\hat{V}_t = \theta(t) \left(\hat{A}^\dagger F e^{-i\omega t} + \hat{A} F^* e^{i\omega t} \right)$$

(mit einer komplexen Zahl F) ist nach der goldenen Regel die Übergangsrate pro Zeiteinheit vom Zustand n in den Zustand m

$$\Gamma_{n \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} \left\{ \delta(E_m - E_n - \hbar\omega) |\langle m | \hat{A}^\dagger F | n \rangle|^2 + \delta(E_m - E_n + \hbar\omega) |\langle m | \hat{A} F^* | n \rangle|^2 \right\} .$$

Die pro Zeiteinheit absorbierte Energie ist dann bei einer kanonischen Verteilung von Anfangszuständen

$$\begin{aligned} W &= \sum_{n,m} \frac{e^{-\beta(E_n - \mu N_n)}}{Z} (E_m - E_n) \Gamma_{n \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} \hbar\omega \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} (G_{AA^\dagger}^>(\omega) - G_{AA^\dagger}^<(\omega)) |F|^2 \\ &= 2\omega \sqrt{2\pi} |F|^2 \chi''_{AA^\dagger}(\omega) , \end{aligned}$$

wobei die Spektraldarstellung von $G^>$ und $G^<$ benutzt wurde. In der Nähe von Resonanzen ist $\chi''(\omega)$ und damit auch die Dissipation groß.

Andererseits sind die Korrelationsfunktionen $G_{AA}^> = \langle \hat{A}(t) \hat{A}(0) \rangle_0$ mit den Fluktuationen $\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2$ der Größe \hat{A} verbunden, z.B. ist $\langle \hat{A} \rangle^2 + G_{AA}^>(\omega = 0)$ die statische Schwankungsbreite der Größe A .

Durch Einsetzen der oben abgeleiteten Beziehung zwischen $G^>$ und $G^<$ erhält man nun eine allgemeine Beziehung zwischen der Spektraldichte und der Korrelationsfunktion, eine Form des sogenannten **Fluktuations-Dissipationstheorems**:

Vorsicht beim Dividieren: kann bei $\eta = +1$ Null werden!

$$S_{AB}^{(\eta)}(E) = \frac{1}{2\pi} \overbrace{\left(e^{\beta(E-\mu\Delta N_B)} - \eta \right)} G_{AB}^{<}(E)$$

wobei, zur Erinnerung, ΔN_B die Teilchenzahländerung durch den Operator \hat{B} ist. Diese Gleichung setzt also, speziell bei $\eta = 1$, $A = B$, und $E = 0$ die Stärke der Fluktuationen der Größe \hat{A} im System *ohne* äußeres Feld in Beziehung mit der Dissipation desselben Systems *im* äußeren Feld \hat{A} . Es folgt auch

$$S_{AB}^{(+)}(E) = \frac{e^{\beta(E-\mu\Delta N_B)} - 1}{e^{\beta(E-\mu\Delta N_B)} + 1} S_{AB}^{(-)}(\omega) = \tanh\left(e^{\frac{\beta}{2}(E-\mu\Delta N_B)}\right) S_{AB}^{(-)}(\omega).$$

Aus der Antikommutator-Spektraldichte kann man also die Kommutator-Variante erhalten (aber nicht umgekehrt).

2.5.2 Spektraldarstellung der Spektraldichte

Durch Einsetzen der Spektraldarstellung von $G_{AB}^>(t)$ und $G_{AB}^<(t)$ in die Definition von $S_{AB}^{(\eta)}(t)$ erhält man

$$S_{AB}^{(\eta)}(E) = \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi Z}} \sum_{n,m} \langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle e^{-\beta(E_m - \mu N_m)} \left(e^{\beta(E - \mu\Delta N_B)} - \eta \right) \delta(E - (E_m - E_n))$$

$$= \left(\frac{\hbar}{\sqrt{2\pi Z}} \sum_{\substack{n,m \\ E_n \neq E_m}} (\dots) \right) + \frac{\hbar(1-\eta) D \delta(E)}{2\pi}$$

$$\text{mit } D = \frac{1}{\sqrt{2\pi Z}} \sum_{\substack{n,m \\ E_n = E_m}} \langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle e^{-\beta(E_m - \mu\Delta N_B)}$$

Zuletzt haben wir die Summe aufgeteilt, in einen Anteil mit $E_n \neq E_m$, und den Term D mit der Summe über entartete Zustände $E_n = E_m$. Wegen $E_n = E_m$ erhält D den Faktor

$\delta(E)$ und multipliziert daher als Funktion der Zeit eine *Konstante*. D ist also dann von Null verschieden, wenn eine äußere Störung auch bei unendlicher Zeit eine nicht verschwindende Antwort hervorruft. Im Zusammenhang mit elektromagnetischen Antworten repräsentiert D , je nach betrachtetem Fall, Größen wie die “ideale Leitfähigkeit” (Drude-Gewicht) (also Antwort auf ein äußeres elektrisches Feld) oder die superfluide Dichte (Antwort auf ein äußeres Magnetfeld). Wegen des Faktors $(1 - \eta)$ enthält die *Kommutator*-Spektraldichte keine Information über D .

2.5.3 Spektraltheorem

Das Spektraltheorem benutzt die Spektraldarstellung von S und G , um *Korrelationsfunktionen* über die Spektraldichte darzustellen:

$$\langle \hat{B}(0) \hat{A}(t) \rangle \equiv G_{AB}^<(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dE e^{-\frac{i}{\hbar}Et} G_{AB}^<(E)$$

$$\langle \hat{B}(0) \hat{A}(t) \rangle = \frac{\sqrt{2\pi}}{\hbar} \int dE e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \frac{S_{AB}^{(\eta)}(E)}{e^{\beta(E-\mu\Delta N_B)} - \eta} + \sqrt{2\pi} \frac{1+\eta}{2} D$$

Dies geht natürlich nur, wenn der Nenner nicht Null wird. Diese Gleichung gilt für die beiden Fälle $\eta = 1$ und $\eta = -1$. Wir sehen daß alle Korrelationsfunktionen über die Antikommutator-Spektraldichte ausdrückbar sind, und in der Regel auch über die Kommutator-Spektraldichte, wenn zusätzlich der Term D bekannt ist.

2.5.4 Zustandsdichte

Mit dem Spektraltheorem kann man auch die die mittlere Besetzungszahl bestimmen.

$$\langle \hat{n}_k \rangle = \langle a_k^\dagger(0) a_k(0) \rangle = \frac{\sqrt{2\pi}}{\hbar} \int dE \frac{S_{a_k a_k^\dagger}^{(-)}(E)}{e^{\beta(E-\mu)} + 1}.$$

Der Operator A_k^\dagger erzeugt ein Teilchen, daher ist hier $\Delta N_B = 1$.

Beispiel: Freie Fermionen: Mit dem schon berechneten $S_{a_k a_k^\dagger}^{(-)}(E) = \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi}} \delta(E - \epsilon_k)$ folgt das bekannte Ergebnis

$$\langle \hat{n}_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1} =: f_-(E).$$

Diese Funktion wird auch als *Fermi-Funktion* $f_-(E)$ bezeichnet.

Die Gesamtteilchenzahl N kann man daher im allgemeinen Fall einerseits als Summe über $\langle \hat{n}_k \rangle$ schreiben, und andererseits als ein Integral über die Energie:

$$\begin{aligned} N &= \sum_k \langle \hat{n}_k \rangle \\ &= \sum_k \frac{\sqrt{2\pi}}{\hbar} \int dE \frac{S_{a_k a_k^\dagger}^{(-)}(E)}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} \\ &=: N \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{\rho(E)}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} \end{aligned}$$

mit der **Zustandsdichte**

$$\rho(E) := \frac{\sqrt{2\pi}}{N\hbar} \sum_k S_{a_k a_k^\dagger}^{(-)}(E).$$

Dieser Ausdruck gilt ganz allgemein.

Bei freien Fermionen erhält man $\rho(E) = \frac{1}{N} \sum_k \delta(E - \epsilon_k)$.

2.6 Halbseitige Fouriertransformation (Laplace-Transf.)

Wir wollen im folgenden auch die retardierten Greensfunktionen über $G^>$ und über die Spektraldichte als Funktion der Energie darstellen. Weil $G^{\text{ret}}(t)$ einen Faktor $\theta(t)$ enthält, benötigen wir dazu zunächst die Fouriertransformation von $\theta(t)$. Sie läßt sich über die sogenannte halbseitige Fouriertransformation berechnen. (Siehe z.B. Jelitto, Kap. 9.3.3)

$$\hat{f}(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty dt f(t) e^{izt} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^\infty dt \theta(t) f(t) e^{izt}$$

Dies ist also eine Fouriertransformation von $\theta(t)f(t)$ mit komplexem z .

Sie ist äquivalent zur Laplace-Transformation $f(s) = \int_0^\infty dt f(t)e^{-st}$.

$\hat{f}(z)$ existiert, wenn $\int_0^\infty dt |f(t)| e^{-yt}$ existiert.

Im folgenden setzen wir $z = \omega + iy$.

Beispiel: $f(t) = e^{-i\Omega t}$

$$\begin{aligned} \hat{f}(z) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty dt e^{i(z-\Omega)t} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{-i}{z-\Omega} e^{i(z-\Omega)t} \Big|_0^\infty \\ &= \frac{+i}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{z-\Omega} \equiv \frac{+i}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\omega - \Omega + iy} \end{aligned}$$

Dies existiert, wenn die obere Grenze verschwindet, also $y > 0$

Wegen der Bedingung $\text{Im } z \equiv y > 0$ erhält man nun die normale Fouriertransformation von $\theta(t) e^{-i\Omega t}$ nicht bei $y = 0$, sondern im Limes $y \rightarrow 0^+$:

$$\widetilde{\theta(t) e^{-i\Omega t}}(\omega) \equiv \tilde{f}(\omega) = \lim_{y \rightarrow 0^+} \hat{f}(z),$$

also

$$\widetilde{\theta(t) e^{-i\Omega t}}(\omega) = \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\omega - \Omega + i0^+}$$

Speziell: $\Omega = 0 \Rightarrow$
$$\theta(t) = \frac{i}{2\pi} \int d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i0^+}$$

Dies kann man auch direkt über den Residuensatz zeigen.

2.7 Spektraldarstellung von $G^{\text{ret},\eta}$

Wir sind nun in der Lage, auch die Greensfunktion im Energieraum auszudrücken. Wir gehen aus von:

$$\begin{aligned} G_{AB}^{\text{ret},\eta}(t) &\equiv -i \theta(t) \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(0)]_{-\eta} \rangle_0 \\ &\equiv -i \theta(t) \underbrace{(G_{AB}^>(t) - \eta G_{AB}^<(t))}_{2\pi S_{AB}^{(\eta)}(t)} \end{aligned}$$

$G^>$ sind Summen von Beiträgen der Form $e^{-i\Omega t}$, mit $\Omega = E_n - E_m$. Durch Einsetzen der eben hergeleiteten Fouriertransformation von $\theta(t)e^{-i\Omega t}$ erhält man daher

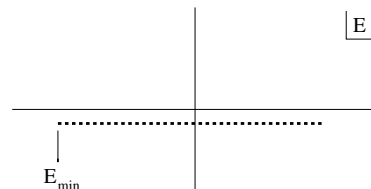
$$G_{AB}^{\text{ret},\eta}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{S_{AB}^{(\eta)}(E')}{E - E' + i0^+} \quad : \underline{G^{\text{ret},\eta} \text{ ist über die Spektraldichte ausdrückbar}}$$

und durch Einsetzen der Spektraldarstellung von $S_{AB}^{(\eta)}$ die Lehmann-Darstellung

$$G_{AB}^{\text{ret},\eta}(E) = \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi Z}} \sum_{nm} \langle n | \hat{A} | m \rangle \langle m | \hat{B} | n \rangle e^{-\beta(E_m - \mu N_m)} \frac{e^{\beta(E_m - E_n - \mu \Delta N_B)} - \eta}{E - (E_m - E_n) + i0^+}$$

- Die *Kausalität* $\theta(t)$ (also die Randbedingung an die retardierte Greensfunktion) drückt sich im Energieraum also durch den Term $+i0^+$ aus !

- $G^{\text{ret},\eta}$ hat einfache Pole bei $\text{Im } E = 0^-$, gerade unterhalb der Anregungsenergien des Systems, und ist ansonsten analytisch und in die obere Halbebene fortsetzbar (s. Übung) Dies folgt direkt aus der Kausalität $\theta(t) \rightarrow \frac{1}{\omega + i0^+}$.



Im thermodynamischen Limes können die einzelnen Pole zu kontinuierlichen Verzweigungsschnitten (branch cuts) werden.

- Falls $S_{AB}^{(\eta)}(E)$ reell ist, z.B. wenn $\hat{A}^\dagger = \hat{B}$, dann folgt mit der (in einem Integral anzuwendenden) Dirac-Identität

$$\boxed{\frac{1}{x + i0^+} = \mathcal{P} \frac{1}{x} - i\pi\delta(x)}$$

und der obigen Integraldarstellung von $G_{AB}^{\text{ret},\eta}(E)$ die Beziehung

$$\boxed{\text{Im } G_{AB}^{\text{ret},\eta}(E) = -\pi S_{AB}^{(\eta)}(E)},$$

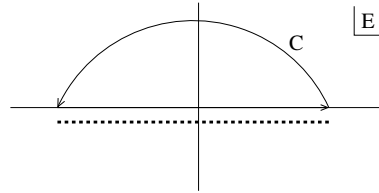
denn der Hauptwert in der Dirac-Identität ist dann reell und es verbleibt für den Imaginärteil die Delta-Funktion, die gerade wieder S ergibt.

2.8 Kramers-Kronig-Relationen (= Dispersionsrelationen)

Aus der Analytizität von $G^{\text{ret},\eta}(\omega)$ in der oberen Halbebene, also aus der Kausalität $\theta(t)$, folgt, daß man den Realteil von $G^{\text{ret},\eta}$ aus dem Imaginärteil berechnen kann, und umgekehrt.

Wir betrachten das Integral

$$I(E) = \oint_C dE' \frac{G^{\text{ret},\eta}(E')}{E - E' - i0^+}$$



Wählt man E reell, so treten keine Pole auf $\Rightarrow I = 0$

Außerdem verschwindet das Integral über den oberen Halbkreis \Rightarrow

$$0 = \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{G^{\text{ret},\eta}(E')}{E - E' - i0^+} = \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{G^{\text{ret},\eta}(E')}{E - E'} + i\pi G^{\text{ret},\eta}(E)$$

$$\Rightarrow \boxed{G^{\text{ret},\eta}(E) = \frac{i}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{G^{\text{ret},\eta}(E')}{E - E'}}$$

$$\Rightarrow \text{Re } G^{\text{ret},\eta}(E) = \frac{-1}{\pi} \mathcal{P} \int dE' \frac{\text{Im } G^{\text{ret},\eta}(E')}{E - E'}$$

2.9 Bewegungsgleichungen für Greensfunktionen

Ein Standard-Verfahren zur Berechnung von Greensfunktionen benutzt ihre Bewegungsgleichungen. Zur Erinnerung:

$$G_{AB}^{\text{ret},\eta}(t, t') = -i \theta(t - t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')]_{-\eta} \rangle_0 .$$

Aus dieser Definition, der Bewegungsgleichung für Heisenbergoperatoren, $\frac{d}{dt} \theta(t) = \delta(t)$ und weil $A(t)$ nach Voraussetzung nicht explizit zeitabhängig ist, folgt durch Einsetzen

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_{AB}^{\text{ret},\eta}(t, t') = \hbar \delta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_{-\eta} \rangle + G_{[A, \hat{H}]_-(t) B(t')}^{\text{ret},\eta}}$$

Dabei gilt wieder die Randbedingung $G^{\text{ret},\eta}(t, t') = 0$ für $t < t'$.

Im Energieraum lautet die Bewegungsgleichung

$$\boxed{E G_{AB}^{\text{ret},\eta}(E) = \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi}} \langle [A, B]_{-\eta} \rangle + G_{[A, \hat{H}]_-(E) B}^{\text{ret},\eta}}$$

Auch hier muß man die Randbedingung berücksichtigen, indem (nachträglich !) in der Lösung die Energie E im Nenner durch $E + i0^+$ ersetzt wird.

Auf der rechten Seite dieser Bewegungsgleichungen taucht wieder eine Greensfunktion auf, so daß sich durch Einsetzen eine *Kette von Bewegungsgleichungen* ergibt.

Für näherungsweise Lösungen bricht man diese Kette oft nach wenigen Gliedern ab. In manchen Fällen, zum Beispiel bei freien Fermionen, bricht die Kette von alleine ab (s. Übung).

2.10 Wechselwirkende Systeme

Wir haben als Beispiele bisher freie Fermionen behandelt und ihre Greensfunktionen berechnet. Die Greensfunktionen wechselwirkender Systeme sind genauso definiert. Ihr spektrales Verhalten beschreibt man in Analogie zum Fall freier Teilchen.

Wir werden im folgenden immer die *Einteilchen-Antikommutator-Funktionen* $G_{a_k a_k^\dagger}^{\text{ret},-}$ und $S_{a_k a_k^\dagger}^{\text{ret},-}$ betrachten und der Einfachheit halber die Indizes weglassen.

Die Greensfunktion freier Fermionen ist

$$G^{(0)}(E) = \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{E - \epsilon_k + i0^+} .$$

Bei wechselwirkenden Systemen parametrisiert man die Greensfunktion formal gleichartig:

$$G(E) = \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{E - \epsilon_k - \Sigma(k, E) + i0^+} .$$

Dies definiert die **Selbstenergie** $\Sigma(k, E)$. Sie hängt im allgemeinen auch von dem hier nicht mitgeschriebenen Spin-Index σ ab. Die Selbstenergie beschreibt den gesamten Einfluß der Wechselwirkung auf die Einteilchen-Funktionen. Weil man aus G auch die Spektraldichte S und daraus die Teilchenzahl $\langle \hat{n}_k \rangle$ gewinnen kann, bestimmt die Selbstenergie auch die *Thermodynamik* des Systems.

Wir können die Definition noch etwas umschreiben. Aus der freien Greensfunktion sehen wir, daß $(E - \epsilon_k + i0^+) = \frac{\sqrt{2\pi}}{\hbar} \frac{1}{G^{(0)}}$ ist. Obige Gleichung hat also die Struktur

$$A = \frac{1}{\frac{1}{A^{(0)}} - \Sigma} \Rightarrow \left(\frac{1}{A^{(0)}} - \Sigma \right) A = 1 \Rightarrow (1 - A^{(0)}\Sigma) A = A^{(0)} \Rightarrow A - A^{(0)}\Sigma A = A^{(0)} .$$

Wir erhalten somit die **Dyson-Gleichung** $G = G^{(0)} + \frac{\sqrt{2\pi}}{\hbar} G^{(0)} \Sigma G$.

Dies ist auch eine alternative Definition der Selbstenergie.

Wir zerlegen nun die Selbstenergie in Real- und Imaginärteil

$$\Sigma(k, E) =: R(k, E) + iI(k, E) ,$$

und somit

$$G(E) = \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi}} \frac{(E - \epsilon_k - R) + iI}{(E - \epsilon_k - R)^2 + I^2 + i0^+} .$$

Diese Funktion hat i.a. **Resonanzstellen** bei

$$E_i = \epsilon_k + R(k, E_i) .$$

Wir berechnen nun aus der Greensfunktion die Spektraldichte. Die Einteilchen-Spektraldichte ist reell. Wie früher abgeleitet gilt daher $S = -\frac{1}{\pi} \text{Im } G$. Wir müssen zwei Fälle unterscheiden.

(1) $I(k, E) = 0$ in einer Umgebung von E_i . Dann enthält S wie bei freien Fermionen durch die Resonanz bei E_i einen Delta-förmigen Anteil

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2\pi}} \alpha_i(k) \delta(E - E_i(k))$$

mit der Stärke

$$\alpha_i(k) = \frac{1}{\left|1 - \frac{\partial}{\partial E} R(k, E)\right|_{E=E_i}}$$

aus der Umformung der Delta-Funktion $\delta(E - \epsilon_k - R(k, E))$ mittels der allgemeinen Relation $\delta(f(x)) = \sum_i \frac{\delta(x-x_i)}{|f'(x_i)|}$.

(2) $I(k, E_i) \neq 0$. Dann gilt

$$S = -\frac{1}{\pi} \text{Im } G = -\frac{\hbar}{\sqrt{2\pi}\pi} \frac{I}{(E - \epsilon_k - R)^2 + I^2}.$$

Wenn zusätzlich I klein gegenüber dem Abstand der Resonanzen ist, dann erhält man durch Entwickeln des Energieterms um E_i eine **Resonanz mit Lorentz-Form**

$$-\frac{\hbar}{\sqrt{2\pi}\pi} \frac{\alpha_i^2 I}{(E - E_i)^2 + (\alpha_i I)^2}.$$

(Den Fall (1) erhält man hier auch als Grenzfall $I \rightarrow 0$.) Die Position der Resonanz wird durch den Realteil R der Selbstenergie bestimmt, und die Breite durch den Imaginärteil I . Wenn I klein gegenüber dem Abstand der Resonanzstellen ist, dann überlappen die Resonanzen kaum.

Wir erwarten also, wenn der Imaginärteil der Selbstenergie nirgends allzu groß wird, daß die *Spektralfunktion eine Summe von Delta- und Lorentz-förmigen Resonanzen* ist. Diese Resonanzen bezeichnet man als **Quasiteilchen**. Jedes dieser Quasiteilchen hat ein spektrales Gewicht α_i . Eine endliche Breite $\alpha_i I$ der Resonanz führt in der zeitlichen Abhängigkeit zu einem Anteil

$$\alpha_i e^{-\frac{1}{\hbar} Et} e^{-\frac{1}{\hbar} |\alpha_i I t|},$$

also zu einer endlichen Lebensdauer $\frac{\hbar}{\alpha_i I}$ der Quasiteilchenanregungen. Oft (aber nicht immer !) ist die Dispersion der Quasiteilchenanregungen im wesentlichen quadratisch, so wie bei den freien Teilchen, und man entwickelt

$$\epsilon_k + R(k, E) = c + \frac{\hbar}{2m^*} k^2 + O(k^4).$$

Dies definiert die effektive Masse m^* des Quasiteilchens.

Das Quasiteilchenkonzept erweist sich in der Praxis als sehr nützlich.

- Bei *Fermi-Flüssigkeiten* treten dieselben Pole wie bei freien Fermionen auf, aber verschoben und eventuell verbreitert. Die Quasiteilchen der Fermi-Flüssigkeit entsprechen also eins zu eins den Anregungen des freien Systems.
- Auch bei stark wechselwirkenden Systemen (z.B. durch das Hubbard-Modell beschrieben) treten oft noch schmale Bänder in der Spektraldichte auf, die man als Quasiteilchen betrachten kann. Im Gegensatz zu Fermi-Flüssigkeiten sind bei starker Wechselwirkung aber andere Greensfunktionen, z.B. Spin-Spin oder Dichte-Dichte-Funktionen, *nicht* durch die Einteilchen-Funktionen bestimmt, sondern können völlig andere Gestalt haben, die zum Teil aber auch die Identifikation von Quasiteilchenartigen Anregungen erlauben.
- Die Spektralfunktionen stark wechselwirkender Systeme können aber auch völlig andere Gestalt haben, ohne klare Quasiteilchenstrukturen.

Ergänzungen

- Wir haben hier, wie im Buch von Schwabl, für die Zeitentwicklung immer den Operator \hat{H} (bzw. \hat{H}_0) benutzt.

Eine andere oft übliche Konvention ist, im großkanonischen Ensemble nicht nur in der Dichtematrix

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}}{\text{tr } e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}},$$

sondern auch für die *Zeitentwicklung* (also etwa für die Definition von Heisenberg- bzw. Dirac-Operatoren) den Operator $\hat{H} - \mu\hat{N}$ zu benutzen. Dies geschieht z.B. in den Büchern von Nolting (ab S. 110) und von Negele/Orland (ab S. 245). Die Eigenenergien verschieben sich ebenfalls um $-\mu\hat{N}$. Dieser Formalismus ist etwas bequemer. Die oben hergeleiteten Beziehungen ändern sich dann um Terme μN , ansonsten bleiben sie gültig. In den Greensfunktionen verschieben sich die Pole um $\mu\Delta N_B$, was für eine gegebene Greensfunktion einer Verschiebung des Energienullpunktes entspricht.

- Es sind oft weitere Greensfunktionen nützlich, z.B. die “avancierte Greensfunktion” G^{av} mit $-\theta(-t)$ statt $\theta(t)$.
- Es existieren einige exakte Relationen für die Greensfunktionen, die z. T. aus der Symmetrie der Operatoren \hat{A} , \hat{B} folgen.
- Summenregeln: Es gibt exakte Relationen für Integrale über Greensfunktionen, z.B. können die Momente $\int E^n S_{AB}(E) dE$ der Spektraldichte über Erwartungswerte von Vielfachkommutatoren der Operatoren \hat{A} und \hat{B} dargestellt werden.
- Grenzwerte: Man kann die Greensfunktion im Grenzfall hoher Energien berechnen (s. Nolting Kap. 3.2.4):

$$G_{AB}^{\text{ret},\eta}(E) \lesssim \frac{\hbar}{E} \langle [A, B]_{-\eta} \rangle \quad (E \rightarrow \infty).$$

Die Greensfunktion muß also zumindest wie $\frac{1}{E}$ abfallen.

Teil II

Relativistische Wellengleichungen

Literatur: Schwabl, Messiah (gut!), Bjorken-Drell, u.v.a.m.

Vorbemerkungen:

- Die Schrödingergleichung $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 |\psi\rangle$ ist nicht relativistisch invariant. Sie weist unterschiedliche Ordnungen der Ableitungen in Raum und Zeit auf. Stattdessen ist sie unter der nichtrelativistischen Galilei-Transformation $x' = x - vt$, $t' = t$ invariant. Sie ist im allgemeinen auch nicht für Wechselwirkungen mit dem elektromagnetischen Feld ($v = c$!) adäquat.
- In diesem Teil der Vorlesung werden wir relativistische Einteilchen-Wellengleichungen analog zur Schrödingergleichung behandeln.

Spin 0 Klein-Gordon-Gleichung

Spin- $\frac{1}{2}$: Dirac-Gleichung

- Die Postulate der Quantenmechanik bleiben in der relativistischen Physik erhalten:
Es gibt Zustände $|\psi\rangle$,
Observable sind hermitesche Operatoren,
Erwartungswerte $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$,
Bewegungsgleichung $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle$,
aber mit einem anderen, relativistischen Hamiltonoperator \hat{H} .

Einen alternativen Zugang bieten der Lagrange-Formalismus der kanonischen Quantisierung und der Pfadintegralformalismus in Teil III der Vorlesung.

- Allerdings werden wir mit dem relativistischen Einteilchen-Hamiltonoperator auch Lösungen mit beliebig tiefer negativer Energie finden. Eine konsistente relativistische Theorie wird sich, daraus resultierend, nur im Rahmen einer *Vielteilchentheorie* finden lassen, der *Relativistischen Quantenfeldtheorie (QFT)*, zu der wir dann im dritten Teil der Vorlesung kommen werden.

Kapitel 3

Auszüge aus der Speziellen Relativitätstheorie

Literatur: (Schwabl); Messiah Kap. 20.1;

Ausführlich: Sexl, Urbantke: “Relativität, Gruppen, Teilchen”

Die spezielle Relativitätstheorie wird in den Vorlesungen über Theoretische Mechanik und über Elektrodynamik ausführlich behandelt. Wir werden daher hier nur in knapper Form einige Auszüge behandeln, insbesondere zur relativistischen Dynamik und zur Elektrodynamik, die wir in den folgenden Kapiteln benötigen werden.

Die bisher behandelten nichtrelativistischen Gleichungen sind invariant unter

- 1) Drehungen und
- 2) *Galilei*-Transformationen: $x' = x - vt, t' = t$

Diese Transformationen sind nur sinnvoll, wenn es absolutes ruhendes Bezugssystem gibt, gegenüber dem die Geschwindigkeit v gemessen wird. Andere Inertialsysteme sind dann nicht äquivalent. Zum Beispiel ist die Lichtgeschwindigkeit unter Galilei-Transformationen nicht konstant.

Experimentell zeigt sich dagegen die Gültigkeit des von Einstein postulierten

Relativitätsprinzips:

Die Naturgesetze sind in allen Inertialsystemen von gleicher Form (“kovariant”)

,

aus dem die spezielle Relativitätstheorie folgt.

3.1 Notation und Definitionen

3.1.1 Einheiten

- Wir werden bis auf weiteres \hbar und c mitschreiben
- Oft findet man die Konvention “ $\hbar = c = 1$ ”

Gemeint ist: In allen Ausdrücken sollen die Einheiten als Potenzen von \hbar , c und entweder *Länge* (z.B. Meter) oder *Zeit* (s) oder *Energie* (eV) geschrieben werden. Meist benutzt man die Energie.

z.B. “ $v = 0.3c$ ”

Anschließend werden dann die Potenzen von \hbar , c nicht mitgeschrieben: “ $v = 0.3$ ”
Aus der physikalischen Dimension des Ergebnisses lassen sich diese Potenzen rekonstruieren.

- Elektromagnetische Einheiten: Es gibt leider viele verschiedene Systeme.
 - In der theoretischen Festkörperphysik sind die cgs-Einheiten gebräuchlich.
 - Im Buch von Schwabl (s.S. 311) werden die sogenannten “Rationalisierten Einheiten” = “Lorentz-Heaviside-Einheiten” benutzt. Diese unterscheiden sich von den cgs-Einheiten dadurch, daß die Faktoren 4π wegfallen.
 - Wir werden hier die SI-Einheiten benutzen.

Eine gute Übersicht über die verschiedenen Einheiten findet man im Anhang des Buchs von Jackson.

3.1.2 Relativistische Notation

Wir müssen einen neuen Formalismus einführen (z.B. metrischer Tensor, untere und obere Indizes), um danach relativistische Ausdrücke effizient schreiben zu können, insbesondere das relativistische Skalarprodukt, das unter Lorentztransformationen invariant ist.

Raum-Zeit-Punkt: festgelegt durch räumliche Koordinaten

$$\vec{x} = (x, y, z) \equiv (x^1, x^2, x^3) \quad (\text{Indizes oben!})$$

und durch die Zeit t

Kontravarianter Vierervektor:

$$x = (x^\mu) = (x^0, x^1, x^2, x^3) \quad \text{mit } x^0 \equiv ct : \text{Indizes oben!}$$

Indizes:

Griechisch $\mu, \nu, \rho, \dots = 0, 1, 2, 3$

Lateinisch $i, j, k, \dots = 1, 2, 3$

Kovarianter Vierervektor:

$$(x_\mu) = (x_0, x_1, x_2, x_3) := (x_0, -\vec{x}) : \text{Indizes unten!}$$

Also gilt $x_0 = x^0, \quad x_k = -x^k$

Metrischer Tensor:

$$(g^{\mu\nu}) = (g_{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Andere Konventionen sind inzwischen selten geworden.

(N.B.: in der allgemeinen Relativitätstheorie wird der metrische Tensor von der lokalen Energiedichte abhängig.)

Der metrische Tensor vermittelt die *Transformation zwischen unteren und oberen Indizes*:

Sei a ein Vierervektor. Dann gilt

$$\boxed{a_\mu = g_{\mu\nu} a^\nu} \equiv \sum_\nu g_{\mu\nu} a^\nu \quad \text{also} \quad \boxed{a_0 = a^0, \quad a_k = -a^k}$$

Genauso werden Tensoren transformiert. Insbesondere gilt $\boxed{(g^\mu_\nu) = (g_\mu^\nu) = \mathbb{1}}$.

Einsteinsche Summationskonvention:

Über doppelt auftretende Indizes wird summiert. Von diesen muß einer unten und einer oben stehen, sonst ist in der Regel etwas falsch !

Skalarprodukt:

- Beispiel (nicht relativistisch):
Räumliche Drehungen $\vec{x}' = R\vec{x}$ zeichnen sich dadurch aus, daß das Skalarprodukt der Dreiervektoren invariant ist: $\vec{x}' \cdot \vec{y}' = \vec{x} \cdot \vec{y}$
- Lorentztransformationen (s. u.) zeichnen sich dadurch aus, daß das Skalarprodukt der Vierervektoren invariant ist.

Def. Skalarprodukt:

$$\begin{aligned} \boxed{a \cdot b := a_\mu b^\mu} &\equiv a^\mu b_\mu \equiv g_{\mu\nu} a^\mu b^\nu \\ &\equiv a^0 b^0 - \vec{a} \cdot \vec{b} \equiv a^0 b^0 - \sum_k a^k b^k \\ &\equiv a_0 b_0 - \sum_k a_k b_k \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \text{Norm eines Vierervektors: } \boxed{a^2 = a_\mu a^\mu = (a^0)^2 - (\vec{a})^2}$$

Beispiel: Raum-Zeit-Punkt: $x^2 = (ct)^2 - (\vec{x})^2$

Bemerkungen:

- Das Viererskalarprodukt enthält das räumliche Skalarprodukt $\vec{a} \cdot \vec{b}$, aber mit negativem Vorzeichen: Dies ist eine Konvention !
- Wichtig ist das relative Vorzeichen zwischen Zeit- und Raumkomponenten.

Differentialoperatoren:

Kovarianter Gradient und Nabla-Operator: (Ableitung nach *oberen* Indizes !)

$$\partial_\mu := \frac{\partial}{\partial x^\mu}, \quad (\partial_\mu) = \left(\frac{\partial}{\partial x^0}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3} \right) =: \left(\frac{\partial}{\partial x^0}, \vec{\nabla} \right)$$

Kontravarianter Gradient:

$$\partial^\mu = g^{\mu\nu} \partial_\nu = \frac{\partial}{\partial x_\mu}, \quad (\partial^\mu) = \left(\frac{\partial}{\partial x^0}, -\vec{\nabla} \right)$$

d'Alembert-Operator:

$$\square = \partial_\mu \partial^\mu \equiv \frac{\partial^2}{\partial(x^0)^2} - \sum_k \frac{\partial^2}{\partial(x^k)^2} \equiv \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta, \text{ mit } \Delta = \vec{\nabla} \vec{\nabla}$$

3.1.3 Elektromagnetisches Feld

- Die elektromagnetischen Felder werden relativistisch durch den *Vierervektor des elektromagnetischen Potentials* beschrieben (wir benutzen SI-Einheiten) :

$$(A^\mu) = \left(\frac{\varphi}{c}, \vec{A} \right), \text{ mit } \left[\vec{B} = \text{rot } \vec{A}, \vec{E} = -\vec{\nabla} \varphi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right]$$

φ : skalares Potential (bei Lorentz-Heaviside ohne c)

\vec{A} : Vektorpotential

- \vec{B} und \vec{E} sind nicht Komponenten von Vierervektoren, sondern Komponenten des antisymmetrischen Feldstärketensors

$$F^{\mu\nu} := \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu \equiv A^{\nu,\mu} - A^{\mu,\nu} \text{ (Notation der Ableitung mittels Komma)}$$

$$(F^{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{E^x}{c} & -\frac{E^y}{c} & -\frac{E^z}{c} \\ \frac{E^x}{c} & 0 & -B^z & B^y \\ \frac{E^y}{c} & B^z & 0 & -B^x \\ \frac{E^z}{c} & -B^y & B^x & 0 \end{pmatrix}$$

Also $\frac{E^i}{c} = F^{i0}$, $B^i = -\frac{1}{2} \epsilon^{ijk} F_{jk}$ [\leftarrow Summe!] , mit $\epsilon^{123} = -\epsilon_{123} = 1$.

Man beachte, daß sich bei $F_{\mu\nu}$ die Vorzeichen der Komponenten von \vec{E} umkehren, nicht aber von \vec{B} .

Im Lorentz-Heaviside System (s. Schwabl) fehlt der Faktor $\frac{1}{c}$ bei E .

Achtung: Wir benutzen hier die in den meisten Büchern gebräuchliche Vorzeichenkonvention. Im Buch von Schwabl hat $F^{\mu\nu}$ das umgekehrte Vorzeichen.

Achtung: In den Büchern von Schwabl und Messiah werden bei Dreiervektoren untere und obere Indizes benutzt, aber nicht unterschieden; es gilt dort also z.B. $E_x \equiv E^x$! Wir benutzen bei Dreiervektoren immer obere Indizes $\vec{a} = (a^i)$.

• Maxwell-Gleichungen im Vakuum:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{1}{\epsilon_0} \rho, \quad \vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{j} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$$

- In SI-Einheiten gilt $\epsilon_0 \mu_0 = \frac{1}{c^2}$.
- Die homogenen Gleichungen $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$, und $\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$ folgen aus den Definitionen von \vec{B} und \vec{E} und aus der Struktur von $F_{\mu\nu}$.
- Die inhomogenen Gleichungen $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{1}{\epsilon_0} \rho$, $\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{j} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$ sind jetzt äquivalent zu

$$\mu_0 j^\mu = \partial_\nu F^{\nu\mu} \equiv \square A^\mu - \partial^\mu \partial_\nu A^\nu$$

mit dem

$$\text{Viererstrom } (j^\mu) = (c\rho, \vec{j})$$

- Aus der Antisymmetrie von $F^{\mu\nu}$ folgt auch die

$$\text{Kontinuitätsgleichung } \partial_\mu j^\mu = \frac{1}{\mu_0} \partial_\mu \partial_\nu F^{\nu\mu} = 0 = \frac{\partial}{\partial t} \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}$$

- Da man die Maxwellgleichungen als Beziehungen zwischen Vierervektoren und ihren Skalarprodukten schreiben kann, sind sie relativistisch invariant !

Die spezielle Relativitätstheorie wurde gerade durch die Forderung dieser (damals in komponentenweiser Notation noch sehr undurchsichtigen) Invarianz gefunden. Der Titel von Einsteins berühmter Arbeit ist "Zur Elektrodynamik bewegter Körper".

Die Lorentz-Kraft $\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$ folgt nicht aus den Maxwellgleichungen, sondern benötigt eine zusätzliche Hamiltonfunktion (s.u.) für die geladenen Teilchen, welche die Wirkung der elektromagnetischen Felder beschreibt. Letztlich folgt sie aus der Quantenelektrodynamik (QED).

Das Coulomb-Potential $V = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r}$ beschreibt eine *instantane* Wechselwirkung, ist also *nicht* relativistisch invariant. Es wird sich im Rahmen der QED als eine effektive Wechselwirkung bei niedrigen Energien herausstellen.

Feinstrukturkonstante:

$$\alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e_0^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137} \left[= \frac{e_0^2}{\hbar c} \text{ im Gaußschen System} \right]$$

- **Lokale Eichinvarianz:** $F^{\mu\nu}$ (und damit die Maxwellgleichungen) sind invariant unter den lokalen Eichtransformationen

$$A^\mu(x, t) \mapsto A'^\mu(x, t) = A^\mu(x, t) + \partial^\mu \lambda(x, t)$$

mit einer beliebigen ortsabhängigen (“lokalen”) differenzierbaren Funktion $\lambda(x, t)$
 Die Eichinvarianz stellt sich im Nachhinein als die wesentliche charakterisierende Eigenschaft der Elektrodynamik heraus und wird später weiter besprochen. Für praktische Rechnungen führt sie aber zu Komplikationen. Mögliche Behandlungen:

- Lorentz-Eichung: $\partial_\mu A^\mu = 0 \Rightarrow$ Maxwellgleichungen: $\square A^\mu = j^\mu$
 - Coulomb-Eichung: $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} \equiv \partial_k A^k = 0$
 - Zeitliche Eichung: $A^0 = 0$
 - Axiale Eichung: $A^3 = 0$
- } nicht relativistisch invariant
- Eichinvariant rechnen (!), z.B. in der Gittereichtheorie.

3.2 Die Lorentz-Gruppe

Def. Inertialsystem: Bezugssystem, in dem sich kräftefreie Teilchen gleichförmig (d.h. mit konstanter Geschwindigkeit) bewegen.

Relativitätsprinzip: Die Naturgesetze sind in allen Inertialsystemen von gleicher Form (“kovariant”).

Transformation zwischen Inertialsystemen:

Allgemein: Inhomogene Lorentztransformation (= Poincaré-Transformation)

$$x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu + a^\mu$$

Im Folgenden: ohne Verschiebung: $a^\mu \equiv 0$: “Homogene Lorentztransformation”

Herleitung der Lorentztransformation:

- Aus dem Relativitätsprinzip alleine kann man die Lorentztransformation herleiten (!), mit einer dann noch nicht bestimmten konstanten Geschwindigkeit “ c ” (siehe Sexl, Urbantke).

- Alle Vierervektoren transformieren sich so wie x^μ .

Als entscheidendes Charakteristikum der Lorentztransformationen ergibt sich:

Das Skalarprodukt zwischen zwei beliebigen Vierervektoren ist unter Lorentztransformationen invariant.

Wir berechnen nun Konsequenzen für die Transformationsmatrix Λ , mit $x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu$

Dabei sind Matrixprodukte immer so zu verstehen, daß untere mit oberen Indizes summiert werden. In den Gleichungen mit Indizes stehen Produkte von *Zahlen*, die man miteinander vertauschen kann. Eine transponierte Matrix M^T erfüllt $(M^T)^\mu_{\nu} = M_{\nu\mu}$ \Rightarrow $(M^T)^\mu_\nu = M_\nu^\mu$. Aus der Invarianz des Skalarproduktes

$$a'_\mu b'^\mu \stackrel{!}{=} a_\mu b^\mu \quad \text{für beliebige Vierervektoren } a, b \text{ folgt nun}$$

$$\begin{aligned} a'_\mu b'^\mu &= a'^\nu g_{\nu\mu} b'^\mu = \Lambda^\nu_\rho a^\rho g_{\nu\mu} \Lambda^\mu_\sigma b^\sigma \\ &\stackrel{!}{=} a_\sigma b^\sigma = a^\rho g_{\rho\sigma} b^\sigma \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\Lambda^\nu_\rho g_{\nu\mu} \Lambda^\mu_\sigma = g_{\rho\sigma}} \quad (*) \quad \Leftrightarrow \quad \boxed{\Lambda^T g \Lambda = g} \quad (**)$$

$$\Rightarrow \quad (\Lambda_{\mu\rho} \Lambda^{\mu\sigma}) = (g_\rho^\sigma) = \mathbb{1} \quad \Leftrightarrow \quad ((\Lambda^T \Lambda)_\rho^\sigma) = \mathbb{1}$$

Durch Multiplizieren von $x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu$ mit Λ_μ^ν von links folgt nun $x^\nu = \Lambda_\mu^\nu x'^\mu$

Aus (**) folgt $(\det \Lambda)^2 = 1$, und aus (*) folgt bei $\rho = \sigma = 0$

$$1 \equiv g_{00} = \Lambda^\nu_0 g_{\nu\mu} \Lambda^\mu_0 = (\Lambda^0_0)^2 - \sum_i (\Lambda^i_0)^2 \quad \Rightarrow \quad \underline{(\Lambda^0_0)^2 \geq 1}$$

Klassifikation der Lorentztransformationen: Homogene Lorentztransformationen (LT) sind zusammensetzbar aus:

$$\begin{aligned} \text{Raum-Spiegelung } \Lambda = P &\equiv \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} \\ \text{Zeit-Spiegelung } \Lambda = T &\equiv \begin{pmatrix} -1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

und der “eigentlichen Lorentzgruppe” mit $\det \Lambda = 1, \Lambda^0_0 \geq 1$.

Diese enthält noch die räumlichen Drehungen z.B. um die x -Achse

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \cos \varphi & -\sin \varphi \\ & & \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix}$$

und setzt sich zusammen aus Drehungen und einer

Speziellen LT = “Boost” ($\Lambda = \text{Drehung} \cdot \text{Boost} \cdot \text{Drehung}$):

Transformation zwischen Inertialsystemen mit gleich orientierten Koordinatensystemen, die sich nur durch eine relative Geschwindigkeit unterscheiden.

Wähle OBdA: $\vec{v} = (v_x, 0, 0)$. Dann gilt

$$\Lambda^\nu_\mu = \begin{pmatrix} \cosh \eta & -\sinh \eta & & \\ -\sinh \eta & \cosh \eta & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}, \quad \text{mit } \begin{array}{l} \cosh \eta = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \equiv \gamma \\ \sinh \eta = \frac{v}{c} \gamma \end{array}$$

Der Parameter η heißt *Rapidity* und ist bei aufeinanderfolgenden LT additiv.

Explizit:

$$\begin{array}{l} x'^0 = \gamma \left(x^0 - \frac{\vec{v}}{c} \cdot \vec{x} \right) \\ \vec{x}' = \gamma \left(\vec{x} - \frac{\vec{v}}{c} x_0 \right) \end{array}$$

Überprüfen der Invarianz:

$$\begin{aligned} (x'^0)^2 - (\vec{x}')^2 &= \gamma^2 \left[\left(x^0 - \frac{\vec{v}}{c} \cdot \vec{x} \right)^2 - \left(\vec{x} - \frac{\vec{v}}{c} x_0 \right)^2 \right] \\ &= \gamma^2 \left[(x^0)^2 - (\vec{x})^2 \right] \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right) = (x_0)^2 - (\vec{x})^2 \quad \checkmark \end{aligned}$$

Die spezielle Lorentztransformation kann man auch als eine “Drehung” um $-i\eta$ im vierdimensionalen Raum beschreiben, wenn man statt der normalen Zeitkoordinate t die imaginäre Zeit it als Koordinate wählt (s. Übung).

3.3 Relativistische Dynamik

Invariantes Linienelement "ds":

Beispiel aus der normalen euklidischen Geometrie: Kurve $(x(\lambda), y(\lambda))$

$$\begin{aligned} \text{Kurvenlänge } L &= \int_{\lambda_0}^{\lambda_1} \sqrt{\left(\frac{dx}{d\lambda}\right)^2 + \left(\frac{dy}{d\lambda}\right)^2} d\lambda \\ &= \lim \sum \sqrt{\left(\frac{\Delta x}{\Delta \lambda}\right)^2 + \left(\frac{\Delta y}{\Delta \lambda}\right)^2} \Delta \lambda = \lim \sum \sqrt{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2} \\ &= \int \sqrt{(dx)^2 + (dy)^2} =: \int ds \end{aligned}$$

⇒ Ein unter Reparametrisierung (insbesondere Drehung) invariantes Maß für die Kurvenlänge ist "ds" mit $(ds)^2 = (dx)^2 + (dy)^2 = (d\vec{x})^2$.

Bei Lorentztransformationen: Invariantes Linienelement

$$(ds)^2 = (dt)^2 - (dx)^2 - (dy)^2 - (dz)^2$$

$$\boxed{ds^2 \equiv (ds)^2 = (dx_\mu)(dx^\mu)} \quad \text{Invariante Kurvenlänge einer Weltlinie ist } \int_1^2 ds$$

Eigenzeit: $\tau :=$ Zeit im Ruhesystem eines Massenpunktes (ex. nur bei $m > 0$!)

Im Ruhesystem, mit Koordinatenursprung im Massepunkt:

$$\begin{aligned} x^\mu &= (ct, \vec{0}) \stackrel{\text{hier}}{=} (c\tau, \vec{0}) \Rightarrow (ds)^2 = c^2 (d\tau)^2 + 0 \\ \Rightarrow \boxed{ds = c d\tau} \quad , \quad \int_1^2 ds &= c(\tau_2 - \tau_1) \end{aligned}$$

Bewegter Massepunkt: $\vec{x} = \vec{x}_{(0)} + \vec{v}t \Rightarrow \Delta \vec{x} = \vec{v} \Delta t = \frac{1}{c} \vec{v} \Delta x_0$

$$\Rightarrow (ds)^2 = (dx^0)^2 - (d\vec{x})^2 = (dx^0)^2 \underbrace{\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)}_{1/\gamma^2}$$

$$\Rightarrow \boxed{ds = c d\tau = \frac{1}{\gamma} dx^0} \quad \text{invariant unter LT}$$

⇔ $dt = \gamma d\tau$: Zeitdilatation ! (⇒ z.B. längere Lebensdauer instabiler Teilchen)

Die Eigenzeit können wir benutzen, um lorentzkovariante Ableitungen zu definieren, wie Geschwindigkeit, Impuls, und Kraft.

Vierer-Geschwindigkeit:
$$u^\mu := \frac{dx^\mu}{d\tau} = \gamma \frac{d(ct, \vec{x})}{dt} = \gamma(c, \vec{v})$$

Da (x^μ) ein Vierervektor ist und $d\tau$ invariant, transformiert sich auch (u^μ) unter LT als Vierervektor. Invariant unter LT ist $u^2 \equiv u_\mu u^\mu = \gamma^2(c^2 - v^2) = c^2$.

Im elektromagnetischen Feld müssen wir im folgenden *zwei Versionen des Impulses unterscheiden*. Wir definieren zunächst den

Vierer-Impuls:
$$\Pi^\mu := m_0 u^\mu = m_0 \gamma(c, \vec{v}) =: M(c, \vec{v})$$

mit der Ruhemasse m_0 (Bei Schwabl und später auch bei uns einfach: “ m ”)

und der “bewegten Masse” $M \equiv \gamma m_0$

Invariant:
$$\underbrace{\left[\text{“}\Pi^2\text{“} \right]}_{\text{gefährliche Schreibweise}} \quad \Pi_\mu \Pi^\mu = m_0^2 c^2$$

(N.B. *Ohne* elektromagnetisches Feld ist die Energie $E = \Pi^0 c = M c^2 = \gamma m_0 c^2$)

Vierer-Kraft:
$$K^\mu := \frac{d\Pi^\mu}{d\tau} = m_0 \frac{d^2 x^\mu}{d\tau^2} = (K^0, \vec{K})$$

Speziell untersuchen wir die **Lorentz-Kraft:**

$$\vec{K} = \frac{d\vec{\Pi}}{d\tau} \equiv \gamma \frac{d\vec{\Pi}}{dt} = \gamma q (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$$

Die Lorentzkraft (mit $\frac{d}{d\tau}$) enthält also einen Faktor γ ! Sie kann auch kovariant geschrieben werden:

$$K^\mu = q F^{\mu\nu} u_\nu$$

Die nullte Komponente der Viererkraft

$$K^0 = \frac{d\Pi^0}{d\tau} = \gamma q \frac{\vec{E}}{c} \cdot \vec{v} = \vec{K} \cdot \frac{\vec{v}}{c}$$

entspricht der am Massenpunkt verrichteten Leistung.

Die Lorentzkraft kann man aus einer Hamilton-Funktion herleiten. Dazu definieren wir zunächst den sogenannten

Kanonischen Impuls:
$$p^\mu := \Pi^\mu + q A^\mu$$

Dies ist ein Vierervektor, da er Summe zweier Vierervektoren ist. Er ist nicht eichinvariant !! Diese Definition erscheint hier ad hoc. Sie folgt im Lagrange-Formalismus, der in einem späteren Kapitel behandelt wird, als "kanonischer Impuls". Wir stellen fest:

$$p^0 \equiv \Pi^0 + q A^0 = M c + \underbrace{q \frac{\varphi}{c}}_{\frac{1}{c} \cdot \text{pot. Energie im Potential } \varphi} = \frac{E}{c} \quad \text{Gesamtenergie im Feld}$$

$$(p^\mu) = \left(\frac{E}{c}, \vec{p} \right)$$

Hamilton-Funktion: Aus
$$E = p_0 c = M c^2 + q \varphi$$
 mit $M \equiv \gamma m_0$ und

$$\begin{aligned} m_0^2 c^2 &= \Pi_\mu \Pi^\mu = \underbrace{\Pi_0^2}_{=M^2 c^2} - (\vec{p} - q \vec{A})^2 \\ \Rightarrow M^2 c^2 &= m_0^2 c^2 + (\vec{p} - q \vec{A})^2 \end{aligned}$$

folgt die Hamiltonfunktion

$$(E =) \quad H = q \varphi + c \sqrt{m_0^2 c^2 + (\vec{p} - q \vec{A})^2}$$

In der Tat erhält man hieraus über die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen $\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$ und $\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$ (mit den Koordinaten "q_i" = x^μ) die Lorentzkraft.

Anders geschrieben lautet die obige Beziehung

$$(E - q\varphi)^2 = m_0^2 c^4 + c^2 (\vec{p} - q \vec{A})^2$$

Ohne elektromagnetisches Feld und mit "c=1" ergibt sich die vertraute Beziehung

$$E^2 = m_0^2 + \vec{p}^2 .$$

Kapitel 4

Die Klein-Gordon-Gleichung

Wir suchen nun relativistische quantenmechanische Wellengleichungen. Dazu benutzen wir das Korrespondenzprinzip. Es zeigt sich, daß weiterhin die vertrauten Ersetzungen

$$\underbrace{\vec{p}}_{\text{nicht } \vec{\Pi}!} \mapsto -i\hbar \vec{\nabla} \quad \text{und} \quad E \mapsto i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \text{also} \quad \boxed{p^\mu \mapsto i\hbar \partial^\mu}$$

zu korrekten, dem Experiment entsprechenden Gleichungen führen. Bemerkenswerterweise ist diese Ersetzung von p^μ eine kovariante Beziehung.

Wenn man sie in $E = \dots \sqrt{\vec{p}^2 + \dots}$ einsetzte, ergäben sich (mit Potenzreihenentwicklung der Wurzel) unendlich hohe Ableitungen, und damit auch eine *nichtlokale* Theorie, in der Ort und Zeit immer noch unterschiedlich behandelt würden.

Stattdessen kann man die quadratische Beziehung für die Energie benutzen, ohne Wurzel, und damit über das Korrespondenzprinzip eine Differentialgleichung 2. Ordnung herleiten, die die relativistische Energie-Impulsbeziehung ausdrückt. Dies ist die Klein-Gordon-Gleichung (KGG). Wir beginnen also mit

$$m_0^2 c^2 = \Pi_\mu \Pi^\mu = \Pi_0^2 - \vec{\Pi}^2 = \left(\frac{E}{c} - \frac{q}{c} \varphi \right)^2 - \left(\vec{p} - q \vec{A} \right)^2$$

Zunächst betrachten wir den Fall ohne Feld: $A^\mu = 0$. Dann ist $p^\mu = \Pi^\mu$ und

$$p_\mu p^\mu = m_0^2 c^2$$

Mit dem Korrespondenzprinzip erhalten wir die

Freie Klein-Gordon-Gleichung (Schrödinger; Gordon; Klein)

$$\boxed{(\hbar^2 \partial_\mu \partial^\mu + m_0^2 c^2) |\psi\rangle = 0} \quad \Leftrightarrow \quad \left(\square + \underbrace{m_0^2 \frac{c^2}{\hbar^2}}_{1/(\lambda_C)^2} \right) |\psi\rangle = 0$$

Dies ist eine Wellengleichung. Sie enthält als charakteristische Länge die Compton-Wellenlänge $\lambda_C = \frac{\hbar}{mc}$, die für Elektronen $380 \text{ fm} = 0.0038 \text{ \AA}$ beträgt.

Mit endlichem Feld A^μ : Wegen $\Pi^\mu = p^\mu - q A^\mu$ muß man die Ableitungen in der freien Gleichung ergänzen:

$$i \hbar \partial^\mu \mapsto i \hbar \partial^\mu - q A^\mu = i \hbar \left(\partial^\mu + i \frac{q}{\hbar} A^\mu \right)$$

Der Viererimpuls Π^μ korrespondiert also quantenmechanisch zur sogenannten

Kovarianten Ableitung

$$\boxed{\Pi^\mu \mapsto D^\mu = \partial^\mu + i \frac{q}{\hbar} A^\mu}$$

Diese Ersetzung bezeichnet man auch als “**Minimalankopplung**” des Eichfeldes A^μ (nachdem man bei nichtabelschen Eichtheorien auch andere Kopplungen versucht hat, wobei sich auch dort die Minimalankopplung als korrekt herausgestellt hat). Es ergibt sich also die

Klein-Gordon-Gleichung mit elm. Feld

$$\boxed{(\hbar^2 D_\mu D^\mu + m_0^2 c^2) |\psi\rangle = 0}$$

Bemerkungen: (vgl. Übungen)

- 1) Die KG-Gleichung (und andere Gleichungen mit Minimalankopplung D_μ) sind eichinvariant unter $A^\mu \mapsto A^\mu + \partial^\mu \lambda$, $\psi \mapsto e^{-iq\lambda} \psi$ mit orts- und zeitabhängigem λ : lokale Eichinvarianz.
- 2) $[D_\mu, D_\nu] \sim F_{\mu\nu}$ (!)

Eigenschaften der KG-Gleichung:

- 1) Relativistisch invariant, da nur Skalarprodukte von Vierervektoren auftreten.
- 2) Beschreibt die relativistische Energie-Impulsbeziehung von Teilchen. Sie enthält aber keinen Spin. Teilchen mit Spin erfüllen daher zwar die KGG, werden aber von ihr nicht vollständig beschrieben, im Gegensatz zu Teilchen ohne Spin (z.B. Pi-Mesonen).

- 3) Gleichung 2. Ordnung: Anfangsbedingung ψ und $\frac{d\psi}{dt}$ nötig.
 4) Äquivalent kann man für die Klein-Gordon-Gleichung auch eine Dgl. 1. Ordnung in der Zeit für die 2-komponentige Wellenfunktion $\begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}$ schreiben, mit

$$\phi = \psi + \frac{i}{m} \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad \chi = \psi - \frac{i}{m} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (\text{s.a. Messiah S. 362})$$

- 5) Die Lösungen der freien ($A^\mu = 0$) KG-Gleichung sind ebene Wellen

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{x})} \equiv e^{\frac{i}{\hbar} x_\mu p^\mu} \quad \text{mit} \quad E = \pm \sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4}$$

Die KG-Gleichung läßt also auch beliebig tiefe negative Energien zu und beschreibt deshalb anscheinend keine stabile Welt. Sie wurde deshalb historisch zunächst verworfen und es wurde anfänglich die Dirac-Gleichung für das Elektron weiterverfolgt, die aber im wesentlichen dasselbe Problem hat ! Die Lösung dieses Problems ergibt sich später im Rahmen einer Vielteilchentheorie (QFT) mit Teilchen und Antiteilchen.

- 6) Kontinuitätsgleichung (Fall $A^\mu = 0$)

Multipliziert man die KG-Gleichung von links mit ψ^* und zieht davon die komplex konjugierte Gleichung ab, so erhält man

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

Nach Multiplizieren mit $\frac{\hbar}{2m_0 i}$ also (Der h.c. Teil enthält ein Minuszeichen !)

$$\boxed{\partial_\mu j^\mu = 0} \quad \text{mit} \quad j^\mu = \frac{1}{2m_0} (\psi^* (i \hbar \partial^\mu) \psi + \text{h.c.})$$

In Komponenten geschrieben lautet dies, mit $j = (c \rho, \vec{j})$ und $\partial^\mu = \left(\frac{\partial}{\partial ct}, -\vec{\nabla} \right)$

$$\dot{\rho} + \text{div} \vec{j} = 0$$

$$\text{mit} \quad \rho = \frac{i \hbar}{2 m_0 c^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right)$$

$$\text{und} \quad \vec{j} = \frac{\hbar}{2 m_0 i} \left(\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right)$$

- ρ ist nicht positiv definit, kann also nicht als Wahrscheinlichkeitsdichte aufgefaßt werden, sondern, wie wir noch sehen werden, nur als eine Ladungsdichte.

Kapitel 5

Die Dirac-Gleichung

Die Dirac-Gleichung ist eine relativistisch forminvariante Differentialgleichung 1. Ordnung, die, wie wir sehen werden, Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$ beschreibt, also insbesondere Elektronen. Sie ist die fundamentale Einteilchengleichung für Elektronen. Ihre vollständige Interpretation ist aber erst im Rahmen der Vielteilchenphysik, also der relativistischen Quantenfeldtheorie, möglich.

Wir folgen hier, wie die meisten Darstellungen in der Literatur, im wesentlichen dem historischen Ablauf, da die dabei eingeführten Konventionen weiter gebräuchlich sind. Eine sehr schöne direkte Herleitung der Dirac-Gleichung findet man z.B. bei Jelitto, S. 345.

Notation: Wir schreiben jetzt der Kürze halber “ m ” für die Ruhemasse statt m_0 .

5.1 Aufstellen der Dirac-Gleichung (DG)

Gesucht: Eine Differentialgleichung 1. Ordnung in der Zeit (wie die Schrödingergleichung), die relativistisch invariant ist. Eine Hoffnung dabei war ursprünglich, negative Energien aus dem Auftreten einer negativen Wurzel vermeiden zu können.

Ansatz: (Zunächst für $A^\mu = 0$). Wir machen einen Ansatz der Form

$$i \hbar (\alpha^\mu \partial_\mu) \psi = \beta m \psi \quad \text{mit festen Matrizen } \alpha^\mu, \beta \\ \text{und einem mehrkomponentigen “Spinor” } \psi$$

Man kann o.B.d.A. $\alpha^0 = \mathbb{1}$ wählen.

Anders geschrieben lautet der Ansatz also (Dirac-Gleichung):

$$\boxed{i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (-i \hbar c \alpha^k \partial_k + \beta m c) \psi \equiv \hat{H} \psi}$$

Hier ist ψ ein N -komponentiger Spaltenvektor (N noch unbestimmt). Die charakteristische Länge ist auch in der DG die Compton-Wellenlänge λ_C . Dieser Ansatz ist nicht *explizit* kovariant.

- Forderungen: (1) Relativistische Energie-Impulsbeziehung, also die freie KGG für die Komponenten von ψ ($\Rightarrow E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$)
- (2) Kontinuitätsgleichung mit positiver nullter Komponente, die man als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretieren könnte.
- (3) Lorentz-Kovarianz: gleiche Form der DG in allen Inertialsystemen. (siehe Kap. 5.2 und 5.6).

Ob diese Forderungen relevant sind, entscheidet letztlich das Experiment.

zu (1): Zweifache Anwendung von H ergibt

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = -\hbar^2 c^2 \sum_{ij} \overbrace{\alpha^i \partial_i \alpha^j \partial_j}^{\sum_{ij} \frac{1}{2} (\alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i) \partial_i \partial_j} \psi - i \hbar m c^3 (\alpha^i \beta + \beta \alpha^i) \partial_i \psi + \beta^2 m^2 c^4 \psi$$

Vergleich mit der KGG führt auf

$$(*) \quad \left. \begin{array}{l} \alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i = 2 \delta^{ij} \mathbb{1} \\ \alpha^i \beta + \beta \alpha^i = 0 \\ (\alpha^i)^2 = \beta^2 = \mathbb{1} \end{array} \right\} \text{d. h. die } \{\alpha^i, \beta\} \text{ antikommutieren}$$

Die dritte Gleichung folgt hier direkt aus der ersten. (N.B. (1) Man könnte diese Beziehungen auch kurz als $\{\alpha^\mu, \alpha^\nu\} = 2\delta^{\mu\nu}$ schreiben, wenn man $\alpha^0 = \beta$ definieren würde, was aber nicht üblich ist).

Zu (2): Kontinuitätsgleichung: Benutze $\psi^\dagger = (\psi_1^*, \dots, \psi_N^*)$. Multipliziere DG von links mit ψ^\dagger :

$$i \hbar \psi^\dagger \partial_t \psi = -i \hbar c \psi^\dagger \alpha^i \partial_i \psi + m c^2 \psi^\dagger \beta \psi$$

Subtrahiere diese von der komplex-konjugierten Relation

$$\begin{aligned}
 -i\hbar \left(\frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} \right) \psi &= i\hbar c (\partial_i \psi^\dagger) (\alpha^i)^\dagger \psi + m c^2 \psi^\dagger \beta^\dagger \psi \\
 \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\left(\psi^\dagger \psi \right)}_{\rho} &= -c \underbrace{\left((\partial_i \psi^\dagger) (\alpha^i)^\dagger \psi + \psi^\dagger \alpha^i (\partial_i \psi) \right)}_{\stackrel{!}{=} \partial_i j^i} + \frac{i}{\hbar} m c^2 \underbrace{\left(\psi^\dagger \beta^\dagger \psi - \psi^\dagger \beta \psi \right)}_{\stackrel{!}{=} 0} \\
 \Rightarrow \text{Forderung: } \boxed{\alpha, \beta \text{ hermitesch}} &\quad \alpha^i = (\alpha^i)^\dagger, \quad \beta = \beta^\dagger
 \end{aligned}$$

Dann gibt es eine Kontinuitätsgleichung: $\partial_t \rho + \text{div} \vec{j} = 0$

mit positiver definiter Dichte $\boxed{\rho = \psi^\dagger \psi} \equiv \sum_{\alpha=1}^N \psi_\alpha^* \psi_\alpha$

und Stromdichte $\boxed{j^k = c \psi^\dagger \alpha^k \psi}$

Kovariant: $\boxed{\partial_\mu j^\mu = 0}$ mit $\boxed{j^\mu = c \psi^\dagger \alpha^\mu \psi}$ und $\alpha^0 := \mathbb{1}$, also $j = (c\rho, \vec{j})$

Es zeigt sich, daß die kleinste Dimension mit Lösungen für α, β $\boxed{N = 4}$ ist: ψ ist ein ‘Vierer-Spinor’
 Es gibt viele, zu einander äquivalente, Lösungen. Eine davon ist die

“Standarddarstellung von α^i und β ”: $\boxed{\alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}}$

mit $\sigma^1 = \begin{pmatrix} & 1 \\ 1 & \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} & -i \\ i & \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$

5.2 Kovariante Form der Dirac-Gleichung

Wir definieren die γ -Matrizen: $\boxed{\gamma^\mu = \beta \alpha^\mu}$ mit $\alpha^0 = \mathbb{1}$, also $\gamma_0 = \gamma^0 = \beta$.

Durch Multiplizieren der obigen DG mit $\beta \equiv \gamma_0$ erhält man die kovariante Form der DG (noch ohne elektromagnetisches Feld)

Freie Dirac-Gleichung $\boxed{(i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu - mc) \psi = 0}$

Mit der Feynmanschen Kurzschreibweise $\boxed{\not{a} := \gamma^\mu a_\mu = \gamma_\mu a^\mu}$

(gesprochen “a slash”) für jeden Vierervektor a wird hieraus $(i\hbar \not{a} - mc) \psi = 0$.

Und mit “ $\hbar = c = 1$ ” wird es richtig kurz: $(i\not{D} - m) \psi = 0$.

(Man beachte, daß “ $\gamma^\mu \partial_\mu$ ” trotz der suggestiven Schreibweise *nicht* lorentzinvariant ist, da die γ^μ konstante Matrizen sind, die nicht lorentztransformiert werden.)

DG mit elektromagnetischem Feld: Es zeigt sich, daß wieder der Übergang zur kovarianten Ableitung zur korrekten Beschreibung führt:

$$\partial_\mu \mapsto D_\mu = \partial_\mu + i\frac{q}{\hbar} A^\mu$$

$$(i\hbar \gamma^\mu D_\mu - mc) \psi = 0 \quad \text{oder kurz} \quad (i\not{D} - m) \psi = 0$$

Die Dirac-Gleichung mit elektromagnetischem Feld ist auch wieder *invariant gegenüber lokalen Eichtransformationen* (siehe Übungsaufgabe)

$$A^\mu \mapsto A^\mu + \partial^\mu \lambda(x, t) \quad , \quad \psi \mapsto e^{-i\frac{q}{\hbar c} \lambda(x, t)} \psi$$

(N.B.: Im Fall mit Wechselwirkung folgt aus der DG nicht die KGG mit kovarianter Ableitung D^μ , sondern man erhält einen Zusatzterm $\sim F^{\mu\nu}$!)

5.3 Eigenschaften der γ -Matrizen

Aus der obigen Definition der γ -Matrizen und dem Antikommutieren von α^k und β folgt

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

Dies kann man alternativ als die *definierende Eigenschaft* der γ -Matrizen auffassen, analog zu $[\sigma^i, \sigma^j] = 2 \delta^{ij}$ bei den Pauli-Matrizen. Aus der Hermitizität der α^k, β folgt zusätzlich

$$(\gamma^0)^\dagger = \gamma^0, \quad (\gamma^k)^\dagger = -\gamma^k$$

Dies ist äquivalent zu

$$(\gamma^\mu)^\dagger = \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0$$

Also ist $(\gamma^\mu)^\dagger = \gamma_\mu := g_{\mu\nu} \gamma^\nu$ und die Matrizen $\frac{\gamma^\mu}{\sqrt{2}}$ sind unitär:

$$\left(\frac{\gamma^\mu}{\sqrt{2}}\right)^\dagger = \left(\frac{\gamma^\mu}{\sqrt{2}}\right)^{-1} = \frac{\gamma_\mu}{\sqrt{2}}$$

Standarddarstellung: ergibt sich aus der Standarddarstellung der α^k, β zu

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} & \sigma^i \\ -\sigma^i & \end{pmatrix}$$

Man kommt zu anderen Darstellungen über Transformationen $\gamma \rightarrow M\gamma M^{-1}$ mit beliebiger nichtsingulärer Matrix M .

Die γ^μ sind die “Erzeuger” einer Basis aller komplexen 4x4 Matrizen, in dem Sinne, daß sich die Basis aus Produkten von bis zu vier γ -Matrizen ergibt, einschließlich der Matrix γ^5 mit (in der Literatur nicht eindeutiger) Definition

$$\begin{aligned} \text{“}\gamma^5\text{”} &:= i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \\ &= \begin{pmatrix} \mathbb{1} \\ \mathbb{1} \end{pmatrix} \text{ in Standarddarstellung} \end{aligned}$$

Die sich ergebende Basis ist

$$\Gamma^{(i)} = \left\{ \begin{array}{llllll} \mathbb{1} & , & \gamma_\mu & , & \sigma_{\mu\nu} := \frac{i}{2}[\gamma_\mu, \gamma_\nu] & , & \gamma_5 \gamma_\mu & , & \gamma_5 \\ \text{(Skalar)} & & \text{(Vektor)} & & \text{(Tensor)} & & \text{(Axialvektor)} & & \text{(Pseudoskalar)} \end{array} \right\}$$

Die Benennung ergibt sich aus den Transformationseigenschaften von $\bar{\psi} \Gamma^{(i)} \psi$ unter LT,

mit dem “adjungierten Spinor” $\bar{\psi} \equiv \psi^\dagger \gamma^0$

Beispiel: Der Strom $j^\mu = c\psi^\dagger \alpha^\mu \psi$
 $= c\psi^\dagger \gamma^0 \gamma^0 \alpha^\mu \psi$

$$j^\mu = c\bar{\psi} \gamma^\mu \psi$$

transformiert sich als ein *Vektor*. Für ihn gilt die Stromerhaltung $\partial_\mu j^\mu = 0 \Leftrightarrow \partial_t \rho + \text{div} \vec{j} = 0$, mit

$$\rho = \psi^\dagger \psi \quad : \quad \text{Ladungsdichte}$$

$$\vec{j} = \psi^\dagger (c\vec{\alpha}) \psi = \text{“}q \cdot \vec{v}\text{”}$$

und man kann $(c\vec{\alpha})$ als eine Art “Geschwindigkeitsoperator” auffassen,

wozu es auch eine Analogie in der Kopplung $(c\alpha^k)(-i\hbar\partial_k)$ gibt.

5.4 Lösungen der Dirac-Gleichung für ein ruhendes freies Teilchen

“Freies Teilchen”: $A^\mu = 0$. “Ruhend”: $\hat{p}\psi \stackrel{!}{=} 0$. Aus der Dirac-Gleichung wird dann

$$\begin{aligned} i\hbar\gamma_0\partial_0\psi &= mc\psi \\ \Leftrightarrow i\hbar\gamma_0\partial_t\psi &= mc^2\psi \end{aligned}$$

mit $\gamma_0 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & \\ & -\mathbb{1} \end{pmatrix}$ in der Standarddarstellung. Da γ_0 hier diagonal ist, zerfällt die DG.

- ψ ist ein “Spinor” mit 4 Komponenten
- 4 Lösungen: ebene Wellen:

$$\psi_r(x) = w_r e^{-i\epsilon_r \frac{mc^2}{\hbar} t}$$

$$\text{mit } w_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, w_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, w_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, w_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\text{und } \epsilon_r = \begin{cases} 1 & r = 1, 2 \\ -1 & r = 3, 4 \end{cases}$$

- Wegen $E\psi = i\hbar\partial_t\psi$ haben die ersten beiden Lösungen positive Energie $+mc^2$, die letzten beiden *negative* Energie $-mc^2$. Dies wird später im Rahmen der “Löcher-Theorie” (\Rightarrow Positronen) bzw. vollständig im Rahmen der QFT interpretiert.
- Wie werden sehen, daß die Komponenten 1 und 2, bzw. 3 und 4, dem Spin-Index (\uparrow und \downarrow) entsprechen.
- Die Transformation auf ein bewegtes Bezugssystem folgt später, nach Besprechung der Lorentz-Kovarianz.

5.5 Nichtrelativistischer Grenzfall der Dirac-Gleichung

Zerlege ψ in zweikomponentige Spaltenvektoren $\tilde{\phi}, \tilde{\chi}$: $\psi =: \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix}$

Verwende die Dirac-Gleichung in Standarddarstellung.

Üblicherweise schreibt man jetzt auch wieder der Viererimpuls $\hat{\Pi}^i := i\hbar D^i \equiv i\hbar \partial^i - qA^i$ ausdrücklich als einen Impuls(operator).

$$\begin{aligned} \underline{DG}: \quad 0 &= (i\hbar \gamma^\mu D_\mu - mc) \psi \quad | \cdot \gamma^0 \text{ von links} \\ &= (i\hbar \gamma^0 \gamma^\mu D_\mu - \gamma^0 mc) \psi \\ &= (i\hbar D_0 - i\hbar \vec{\alpha} \vec{D} - \gamma^0 mc) \psi \end{aligned}$$

wegen $\gamma^k = \gamma^0 \alpha^k$. Daher gilt

$$\begin{aligned} (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{q}{c} \varphi) \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} &= \underbrace{c \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \hat{\Pi} \tilde{\chi} \\ \vec{\sigma} \hat{\Pi} \tilde{\phi} \end{pmatrix}}_{\substack{\uparrow \\ \text{von } \gamma^0 \gamma^k = \alpha^k = \begin{pmatrix} & \sigma^k \\ \sigma^k & \end{pmatrix}}} + \underbrace{m c^2 \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ -\tilde{\chi} \end{pmatrix}}_{\substack{\uparrow \\ \text{von } \gamma^0 = \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & \\ & -\mathbb{1} \end{pmatrix}}} \end{aligned}$$

Nichtrelativistisch ist mc^2 die größte Energie im System. Wir spalten die entsprechenden Oszillationen ab:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix} &=: e^{-\frac{imc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \\ \Rightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} &= c \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \hat{\Pi} \chi \\ \vec{\sigma} \hat{\Pi} \phi \end{pmatrix} + \frac{q}{c} \varphi \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} - 2mc^2 \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Bis hier ist die Rechnung exakt.

Näherung: Wir betrachten die Vor"factoren" von χ in der zweiten Gleichung und vernachlässige die Energien $(\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi)$ und $(\frac{q}{c} \varphi \chi)$ gegenüber $(2mc^2 \chi)$. Es folgt

$$\boxed{\chi \simeq \frac{\vec{\sigma} \cdot \hat{\Pi}}{2mc} \phi}$$

Wegen " $\hat{\Pi} = m\vec{v}$ " ist also χ um die Ordnung $\frac{v}{c}$ kleiner als ϕ . Man spricht von *kleinen und großen Komponenten* von ψ im nichtrelativistischen Fall.

Einsetzen: $\Rightarrow i \hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \left(\frac{1}{2m} (\vec{\sigma} \hat{\Pi})(\vec{\sigma} \hat{\Pi}) + \frac{q}{c} \varphi \right) \phi$

Benutze $\sigma^i \sigma^j = \delta^{ij} + i \epsilon^{ijk} \sigma^k \Rightarrow (\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = \vec{a} \cdot \vec{b} + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})$

$$\begin{aligned} \Rightarrow (\vec{\sigma} \cdot \hat{\Pi})(\vec{\sigma} \cdot \hat{\Pi}) &= (\hat{\Pi})^2 + i \sigma^k \epsilon^{ijk} \hat{\Pi}^i \hat{\Pi}^j \\ &= \hat{\Pi}^2 + i \sigma^k \epsilon^{ijk} \left(i \hbar \partial^i - \frac{q}{c} A^i \right) \left(i \hbar \partial^j - \frac{q}{c} A^j \right) \\ &\qquad \qquad \qquad \partial^i \partial^j, A^i A^j : \text{symmetrisch} \rightarrow 0 \\ &= \hat{\Pi}^2 + \sigma^k \epsilon^{ijk} \hbar \frac{q}{c} \left(A^i \partial^j + \underbrace{\partial^i A^j}_{\text{symm.} \rightarrow 0} \right) \\ &\qquad \qquad \qquad = (\partial^i A^j) + \underbrace{A^j \partial^i}_{\text{symm.} \rightarrow 0} \\ &= \hat{\Pi}^2 + \sigma^k \epsilon^{ijk} (\partial^i A^j) \hbar \frac{q}{c} \\ &= \hat{\Pi}^2 - \underbrace{\hbar \frac{q}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}}_{\partial^i = -\partial_i} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{i \hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} (\hat{p} - q \vec{A})^2 - \frac{q \hbar}{2m c} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} + \frac{q}{c} \varphi \right] \phi}$$

$$\frac{q \hbar}{2m c} \vec{\sigma} : \text{magnetisches Moment } \vec{\mu}$$

= Nichtrelativistische **Pauli-Gleichung**: enthält automatisch den Spin

g-Faktor: Das Ergebnis für das magnetische Moment weicht von demjenigen für ein klassisches Teilchen in der Elektrodynamik stark ab, um den Faktor g :

$$\vec{\mu}_{\text{Spin}} = g \underbrace{\frac{q}{2m c}}_{\text{klass.}} \vec{S} \quad \text{mit} \quad \vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$$

Ergebnis für klass. Teilchen aus Elektrodynamik

- \Rightarrow Pauli-Gleichung = nicht-relativistischer Grenzfall der Dirac-Gleichung hat anomales magnetisches Moment mit Faktor $g = 2$
- Weitere Korrekturen aus voller DG
- Nach zusätzlichen Beiträgen aus der QED und der elektroschwachen WW ist der g-Faktor eines der am genauesten verifizierten Ergebnisse der theoretischen Physik !

5.6 Lorentz-Kovarianz der Dirac-Gleichung

Wir wollen nun zeigen, daß die Dirac-Gleichung tatsächlich bei Lorentztransformationen (LT) forminvariant ist, und explizit die LT für Dirac-Spinoren herleiten.

(Ab sofort lassen wir \hbar und c weg!)

5.6.1 Bedingungsgleichung für Forminvarianz

Die Diracgleichung $(i \gamma^\mu D_\mu - m) \psi(x) = 0$ soll in allen Inertialsystemen dieselbe Form haben, d. h. bei einer allgemeinen Poincaré-Transformation von I nach I'

$$\begin{aligned} x' &= \Lambda x + a \\ \Leftrightarrow x'^\mu &= \Lambda^\mu_\nu x^\nu + a^\mu \end{aligned}$$

soll für die Wellenfunktion ψ' im neuen Inertialsystem wieder $(i \gamma^\mu D'_\mu - m) \psi'(x') = 0$ gelten und ψ' soll durch eine lineare Transformation $\psi'(x') = S \psi(x)$ aus ψ hervorgehen. Dabei wird γ^μ nicht transformiert. Wenn eine solche Transformation S *existiert*, dann ist damit die DG forminvariant.

Transformation von ψ :	$\psi'(x') = S \psi(x)$	(Die Matrix S hängt von Λ ab)
In Komponenten:	$\psi'_\alpha(x') = \sum_\beta S_{\alpha\beta} \psi_\beta(x)$	
Umgekehrt:	$\psi(x) = S^{-1} \psi'(x')$	
D_μ transformiert sich als Vierervektor	$D'_\mu = \Lambda^\nu_\mu D_\nu$	

Die Matrix $S_{\alpha\beta}$ wirkt im Raum der Spinorkomponenten; dagegen wirkt die Lorentztransformation Λ in den Raum-Zeit-Koordinaten. Einsetzen von $\psi(x) = S^{-1} \psi'(x')$ in die ursprüngliche DG und Multiplikation mit S von links ergibt:

$$(S (i \gamma^\mu D_\mu) S^{-1} - \overbrace{S S^{-1}}^{\mathbb{1}} m) \psi'(x') = 0$$

Man erhält daher Forminvarianz, falls $\underline{S \gamma^\mu D_\mu S^{-1}} = \gamma^\mu D'_\mu \equiv \gamma^\nu D'_\nu = \underline{\gamma^\nu \Lambda^\mu_\nu D_\mu}$, also falls

$$\boxed{S \gamma^\mu S^{-1} \stackrel{!}{=} \gamma^\nu \Lambda^\mu_\nu} \quad \text{oder äquivalent} \quad \boxed{S^{-1} \gamma^\mu S \stackrel{!}{=} \gamma^\nu \Lambda^\mu_\nu}$$

(Die zweite dieser Beziehungen erhält man mittels Multiplikation der ersten von links mit $\Lambda^\rho_\mu S^{-1}$ und von rechts mit S , womit sich $\Lambda^\rho_\mu \gamma^\mu = S^{-1} \gamma^\nu S \underbrace{\Lambda^\rho_\mu \Lambda^\mu_\nu}_{=g^\rho_\nu}$ ergibt.)

5.6.2 Allgemeine Form der Spinortransformation

Lie-Gruppen: Die Lorentz-Gruppe ist eine *Lie-Gruppe*¹, genauso wie etwa die Drehungen der Gruppe $SO(3)$ im dreidimensionalen Raum, oder die Drehungen der Gruppe $SU(2)$ für Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen. Elemente einer Lie-Gruppe sind von der Form

$$e^{-i\varphi \sum_i n_i J_i}$$

mit “*Erzeugern*” J_i , welche die zur Lie-Gruppe zugehörige *Lie-Algebra* aufspannen. Aus der QM I vertraut sind zum Beispiel die Drehungen für Spinoren

$$e^{-i\varphi \vec{n} \cdot \frac{\vec{\sigma}}{2}}$$

mit den Erzeugern $\frac{\sigma_i}{2}$, welche den für die Lie-Algebra der Drehgruppe charakteristischen Vertauschungsrelationen

$$\left[\frac{\sigma_i}{2}, \frac{\sigma_j}{2}\right] = i \epsilon_{ijk} \frac{\sigma_k}{2}$$

gehörchen, genauso wie etwa die Erzeuger \vec{J} der Drehungen von (Spin 1)-Vektoren.

Literatur dazu: z.B. Sexl/Urbantke (ausführlich) und H. Georgi, “Lie Algebras in Particle Physics”, 2nd edition.

Die Elemente einer Lie-Gruppe hängen (innerhalb einer “Zusammenhangskomponente”) kontinuierlich mit (z.B.) dem 1-Operator zusammen. Bei Lie-Gruppen genügt es deswegen, das Verhalten von *infinitesimalen Transformationen* in der Nähe der $\mathbb{1}$ zu quadratischer Ordnung zu untersuchen, in der Regel sogar nur zu erster Ordnung in φ , um schon das Verhalten der ganzen Gruppe zu charakterisieren. Dies erleichtert die Rechnungen sehr.

Wir wollen die Transformationsmatrix S für Spinoren bestimmen. Dazu werden wir hier zunächst *infinitesimale* Lorentztransformationen untersuchen, und zwar zunächst auch nur eigentliche orthochrone Lorentztransformationen, also solche ohne Raum-Zeit-Spiegelung.

Für eine Lorentztransformation $x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu} x^{\nu}$ setzen wir an

$$\Lambda^{\mu}_{\nu} = e^{\omega^{\mu}_{\nu}}$$

Eine infinitesimale Transformation um $\delta\omega^{\mu}_{\nu}$ lautet also

$$\Lambda^{\mu}_{\nu} = g^{\mu}_{\nu} + \delta\omega^{\mu}_{\nu}$$

¹hier mit 4 Zusammenhangskomponenten aufgrund von Raum- und Zeitspiegelungen

mit $(g^\mu{}_\nu) = \mathbb{1}$. Dieses Λ erfüllt die Bestimmungsgleichung für LT: $\Lambda g \Lambda^T = g$, (oder ausgeschrieben $\Lambda^\mu{}_\nu g^{\nu\sigma} \Lambda^\rho{}_\sigma \stackrel{!}{=} g^{\mu\rho}$) in der Ordnung $\delta\omega$, falls der Tensor $\delta\omega$ antisymmetrisch ist: $\delta\omega^{\mu\nu} = -\delta\omega^{\nu\mu}$ [Einsetzen!]

Daher gibt es in der 4×4 Matrix $\delta\omega$ nur 6 unabhängige Elemente, nämlich diejenigen, die (wie erwartet) den Drehungen um die x -, y - und die z -Achse und den Boosts in x -, y - und z -Richtung entsprechen. (Explizite Rechnungen dazu in Kap. 5.6.3 und 5.6.4).

Zur Bestimmung der Spinor-Transformationsmatrix S setzen wir auch diese als Exponentialfunktion $S = e^\tau$ an und entwickeln für infinitesimale Transformationen in eine Potenzreihe: $S \approx \mathbb{1} + \delta\tau$. Einsetzen in $S \gamma^\mu S^{-1} \stackrel{!}{=} \gamma^\nu \Lambda_\nu{}^\mu$ (Kap. 5.6.1) ergibt dann

$$(1 + \delta\tau) \gamma^\mu (1 - \delta\tau) = \gamma^\mu + [\delta\tau, \gamma^\mu] + \mathcal{O}(\delta\tau^2) \stackrel{!}{=} \gamma^\mu + \gamma^\nu \delta\omega_\nu{}^\mu,$$

also

$$[\delta\tau, \gamma^\mu] \stackrel{!}{=} \gamma^\nu \delta\omega_\nu{}^\mu \quad (*)$$

Die Norm von ψ soll bei $\psi \mapsto S\psi$ invariant sein (Wahrscheinlichkeitsinterpretation!). Wegen $\boxed{\det e^A = e^{\text{tr} A}}$ folgt

$$1 \stackrel{!}{=} |\det S| = |1 + \text{tr} \delta\tau| + \mathcal{O}(\delta\tau^2) \Rightarrow \text{tr} \delta\tau \stackrel{!}{=} 0 \quad (**)$$

Die Lösung von (*) und (**) lautet (Beweis durch Einsetzen): $\delta\tau = -\frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \delta\omega^{\mu\nu}$

$$\text{mit} \quad \boxed{\sigma_{\mu\nu} := \frac{i}{2} [\gamma_\mu, \gamma_\nu]}$$

Wegen der Lie-Gruppe-Struktur der LT erhalten wir aus den infinitesimalen Transformationen schließlich auch das gesuchte Transformationsverhalten von Dirac-Spinoren unter endlichen Lorentztransformationen

$$\boxed{x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu \quad \text{mit} \quad \Lambda^\mu{}_\nu = e^{\omega^\mu{}_\nu},}$$

nämlich

$$\boxed{\psi'(x') = S \psi(x) \quad \text{mit} \quad S = e^{-\frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \omega^{\mu\nu}}}$$

Diese Transformationen werden wir im folgenden explizit berechnen. Insbesondere sehen wir hier, daß die gesuchte Transformation S tatsächlich existiert. Also ist die DG in der Tat Lorentz-forminvariant!

Für die Elemente von $\sigma_{\mu\nu}$ gilt wegen $[\gamma_\mu, \gamma_\nu] = 2\gamma_\mu\gamma_\nu - \{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2\gamma_\mu\gamma_\nu - 2g_{\mu\nu}$

$$\begin{array}{l} \sigma_{0i} = \frac{i}{2} [\gamma_0, \gamma_i] = i\gamma_0\gamma_i = i\alpha_i \\ \sigma_{ij} =: \epsilon^{ijk} \Sigma^k, \quad \Sigma^k = \begin{pmatrix} \sigma^k & \\ & \sigma^k \end{pmatrix} \end{array}$$

wobei die explizite Form von Σ^k für die Standard-Darstellung der γ -Matrizen gilt.

Also ist $\Sigma^1 = \sigma_{23}$, $\Sigma^2 = \sigma_{31}$, $\Sigma^3 = \sigma_{12}$. Zum Beispiel:

$$\Sigma^3 = \sigma_{12} = i\gamma_1\gamma_2 = i \begin{pmatrix} 0 & \sigma^1 \\ -\sigma^1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma^2 \\ -\sigma^2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma^3 & 0 \\ 0 & \sigma^3 \end{pmatrix}$$

Die Σ^k bilden einen Vektor und erfüllen bemerkenswerterweise die Pauli-Algebra,

z.B. $\Sigma^3\Sigma^1 = \sigma_{12}\sigma_{23} = -\gamma^1\gamma^2\gamma^2\gamma^3 = +\gamma^1\gamma^3 = -i\sigma_{13} = i\Sigma^2$

und $\Sigma^3\Sigma^3 = \sigma_{12}\sigma_{12} = -\gamma_1\gamma_2\gamma_1\gamma_2 = +\gamma_1\gamma_2\gamma_2\gamma_1 = 1$.

5.6.3 Lorentzboost

Nun berechnen wir die Lorentztransformationen der Dirac-Spinoren explizit. Zunächst betrachten wir eine Lorentztransformation in x^1 -Richtung, also $x' = \Lambda x$ mit

$$\Lambda^\nu_\mu = \begin{pmatrix} \cosh \eta & -\sinh \eta & & \\ -\sinh \eta & \cosh \eta & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix} \equiv e^{\eta I} \quad \text{mit} \quad I^\mu_\nu = \begin{pmatrix} 0 & -1 & & \\ -1 & 0 & & \\ & & 0 & \\ & & & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \tanh \eta = \frac{v}{c}$$

Wenn man den zweiten Index nach oben zieht, erhält man daher

$$\omega^{\mu\nu} \equiv \eta I^{\mu\nu} = \eta I^\mu_\rho g^{\rho\nu} = \begin{pmatrix} 0 & +\eta & & \\ -\eta & 0 & & \\ & & 0 & \\ & & & 0 \end{pmatrix}$$

und

$$\begin{aligned} \sigma_{\mu\nu} \omega^{\mu\nu} &= (-\sigma_{10} + \sigma_{01})\eta = 2\sigma_{01}\eta = i\eta[\gamma_0, \gamma_1] \\ &= 2i\eta\alpha_1 \end{aligned}$$

Die Transformationsmatrix des Spinors ist also

$$\begin{aligned}
 S &= e^{-\frac{i}{4}\sigma_{\mu\nu}\omega^{\mu\nu}} = e^{\frac{\eta}{2}\alpha_1} = \mathbb{1} \cosh \frac{\eta}{2} + \alpha_1 \sinh \frac{\eta}{2} \\
 &= \cosh \frac{\eta}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \tilde{v} \\ 0 & 1 & \tilde{v} & 0 \\ 0 & \tilde{v} & 1 & 0 \\ \tilde{v} & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 &\text{mit } \tilde{v} = \tanh \frac{\eta}{2}
 \end{aligned}$$

Allgemein: Boost in Richtung \vec{v} :

$$S = e^{\frac{\eta}{2}\vec{\alpha}\frac{\vec{v}}{|\vec{v}|}} = \mathbb{1} \cosh \frac{\eta}{2} + \vec{\alpha}\frac{\vec{v}}{|\vec{v}|} \sinh \frac{\eta}{2} \quad \text{ist hermitesch f\u00fcr Boosts}$$

Achtung: Hier tritt $\frac{\eta}{2}$ auf, nicht η (s.u.).

Man kann S auch mittels Energie und Impuls ausdr\u00fccken:

$$\tanh \frac{\eta}{2} = \frac{\tanh \eta}{1 + \sqrt{1 - \tanh^2 \eta}} = \frac{v}{1 + \sqrt{1 - v^2}} \quad \text{mit } \gamma m \text{ erweitern } \frac{|p|}{E + m}$$

(wegen $|p| = \gamma m |v|$, $E = \gamma m$)

$$\cosh \frac{\eta}{2} = \frac{1}{\sqrt{1 - \tanh^2 \frac{\eta}{2}}} = \sqrt{\frac{E + m}{2m}}$$

$$\Rightarrow S = \frac{1}{\sqrt{2m}\sqrt{E + m}} \begin{pmatrix} E + m & 0 & p^3 & p^- \\ 0 & E + m & p^+ & -p^3 \\ p^3 & p^- & E + m & 0 \\ p^+ & -p^3 & 0 & E + m \end{pmatrix}$$

mit $p^\pm := p^1 \pm i p^2$ bei Standarddarstellung

Wir sehen, da\u00df Nicht-Diagonalelemente proportional zu Geschwindigkeitskomponenten auftauchen, allerdings an vielleicht unerwarteter Position in der Matrix.

5.6.4 Drehung um eine Achse

Die Lorentztransformation bei Drehung um die z-Achse ist $x' = \Lambda x$ mit

$$\Lambda^\mu{}_\nu = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \cos \theta & \sin \theta & \\ & -\sin \theta & \cos \theta & \\ & & & 1 \end{pmatrix} = e^{\theta M} \quad \text{mit Erzeuger} \quad (M^\mu{}_\nu) = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & 0 & 1 & \\ & -1 & 0 & \\ & & & 0 \end{pmatrix}$$

(Man beachte, daß $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}^2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. Die Rechnung ist dieselbe wie bei Zweierspinoren: $e^{i\phi\sigma_2} = e^{\phi\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}} = \mathbb{1} \cos \phi + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \sin \phi$.) Also ist die Drehmatrix im Exponenten von $\Lambda^{\mu\nu} = e^{\omega^{\mu\nu}}$ (mit zwei oberen Indizes)

$$(\omega^{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & 0 & -\theta & \\ & \theta & 0 & \\ & & & 0 \end{pmatrix}$$

und $\sigma_{\mu\nu} \omega^{\mu\nu} = -2\theta \sigma_{12} = -2\theta \Sigma^3 = -2\theta \begin{pmatrix} \sigma^3 & \\ & \sigma^3 \end{pmatrix}$.

Die letzte Beziehung gilt in Standarddarstellung.

$$\Rightarrow \boxed{S = e^{-\frac{i}{4}\sigma_{\mu\nu}\omega^{\mu\nu}} = e^{i\frac{\theta}{2}\Sigma_3} = \cos \frac{\theta}{2} + i \Sigma_3 \sin \frac{\theta}{2}}$$

Beliebige Drehachse \vec{n} :

$$\boxed{S = e^{i\frac{\theta}{2}\vec{n}\cdot\vec{\Sigma}} = \cos \frac{\theta}{2} + i \vec{n} \cdot \vec{\Sigma} \sin \frac{\theta}{2}} \quad \underline{\text{Unitär}} \text{ bei Drehungen}$$

- Wir sehen, daß sich der Dirac-Spinor unter Rotationen genauso transformiert wie der zweikomponentige Spinor eines Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchens in der nichtrelativistischen Quantenmechanik, aber mit Verdopplung der Komponentenzahl:

$$\vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & \\ & \vec{\sigma} \end{pmatrix} \quad \text{statt} \quad \vec{\sigma} \quad (\text{bei Standarddarstellung})$$

Also auch hier Drehung um den halben Winkel, $\mathbb{1}$ erst nach Drehung um 4π .

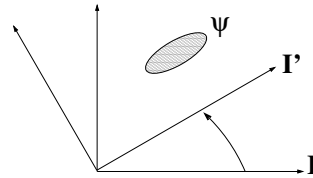
5.6.5 Drehimpuls

Die Rechnung hier verläuft analog zur QM I.

Bisher haben wir nur passive Transformationen betrachtet:

Transformation des *Koordinatensystems* um Λ , bei festgehaltenen Zuständen:

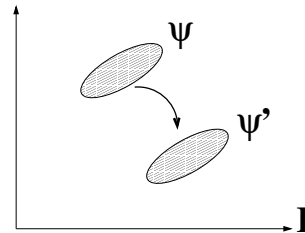
$$\begin{aligned} x' &= \Lambda x \\ \psi'(x') &= S(\Lambda) \psi(x) \\ &= S(\Lambda) \psi(\Lambda^{-1} x') \quad (*) \end{aligned}$$



Äquivalent: Aktive Transformation: Transformation des Zustandes um Λ^{-1}

im unveränderten Koordinatensystem: Hier sieht ψ' von I aus betrachtet genauso aus wie bei der passiven Transformation ψ von I' aus. Also: ersetze in Gl. (*) x' durch x :

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



Infinitesimale Transformation:

$$\begin{aligned} \Lambda^\mu_\nu &= g^\mu_\nu + \delta\omega^\mu_\nu + \dots \\ S &= \mathbb{1} - \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \delta\omega^{\mu\nu} + \dots \end{aligned}$$

Also

$$\begin{aligned} \psi'(x) &\approx \left(\mathbb{1} - \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \delta\omega^{\mu\nu} \right) \underbrace{\psi(x^\rho - \delta\omega^\rho_\nu x^\nu)}_{\approx (1 - \delta\omega^\mu_\nu x^\nu \partial_\mu) \psi(x) \quad \text{(Taylorreihe)}} \\ &= \left(\mathbb{1} + \delta\omega^{\mu\nu} \left(-\frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} + x_\mu \partial_\nu \right) \right) \psi(x) \end{aligned}$$

Speziell: Drehungen um $\delta\varphi$ mit $\delta\omega^{ij} = -\epsilon^{ijk} \delta\varphi^k$ (vgl. Kap. 5.6.4) und $\sigma_{ij} = \epsilon^{ijk} \Sigma^k$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \psi'(x) &= \left(1 + i(\delta\varphi^k) \underbrace{\left(\frac{1}{2} \Sigma^k + i \epsilon^{ijk} x^i \partial^j \right)}_{J^k} \right) \psi(x) \\ &=: (1 + i(\delta\varphi^k) J^k) \psi(x) \end{aligned}$$

Dies definiert den Gesamtdrehimpuls

$$J^k = -i \hbar \epsilon^{ijk} x^i \partial_j + \frac{\hbar}{2} \Sigma^k$$

$$\vec{J} = -i \hbar \vec{x} \times \vec{\nabla} \mathbb{1} \leftarrow \text{Spinor-Raum} + \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma} = \vec{L} + \underbrace{\frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma}}_{\vec{S}}, \quad \vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$$

Endliche Drehungen:

$$\psi'(x) = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{\varphi} \cdot \vec{J}} \psi(x)$$

Wir sehen, daß der Gesamtdrehimpuls eine Summe $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ ist, also die Summe aus Bahndrehimpuls und Spin $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma}$. Weil $\vec{\Sigma}$ die Pauli-Vertauschungsrelationen erfüllt, gilt also, daß **Dirac-Spinoren den** $\boxed{\text{Spin } \mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}}$ besitzen ! Die DG beschreibt also, wie angekündigt, Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen in relativistisch kovarianter Weise.

Quantenzahlen:

$$\vec{S} \quad : \quad \text{Wegen } \vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & \\ & \vec{\sigma} \end{pmatrix} \text{ sind die Eigenwerte } \pm \frac{\hbar}{2}$$

$$(\vec{S})^2 \quad : \quad \vec{S}^2 = \left(\frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma} \right)^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \mathbb{1} \quad : \quad \text{Eigenwert } \frac{3}{4} \hbar^2$$

$$(\vec{L})^2 \quad : \quad \hbar^2 l(l+1)$$

$$L_3 \quad : \quad \hbar m_l, \quad m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l$$

$$(\vec{J})^2 \quad : \quad \hbar^2 j(j+1) \quad , \quad j = \frac{1}{2} \text{ für } l = 0, \quad j = l + \frac{1}{2} \text{ für } l > 0$$

$$J_3 \quad : \quad \hbar m_j \quad , \quad m_j = -j, \dots, j-1, j$$

Gleichzeitig diagonalisierbar sind $\vec{J}^2, \vec{L}^2, \vec{S}^2$ und J_3

5.7 Lösungen der freien Dirac-Gleichung

5.7.1 Lösungen in beliebigem Bezugssystem

Freie DG: $\frac{\partial \psi}{\partial t} = \beta m \psi$

Die Lösung im Ruhsystem $((p^\mu) = (E, \vec{0}) (x^\mu) = (t, \vec{0}))$ lautet (Kap. 5.4):

$$\psi_r = w_r(0) e^{-i\epsilon_r m t}, \quad \epsilon_r = \begin{cases} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \end{cases}, \quad w_r = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Jetzt in beliebigem Bezugssystem: Nutze

$$\underbrace{m t}_{\text{Ruhsystem}} = \underbrace{p_\mu x^\mu}_{\text{invariant}}$$

$$\Rightarrow \psi_r(x) = w_r(p) e^{-i\epsilon_r p_\mu x^\mu}$$

Lorentztransformation der Spinorkomponenten:

$$w_r(p) = e^{-\frac{i}{4}\sigma_{\mu\nu}\omega^{\mu\nu}} w_r(0) = \frac{1}{\sqrt{2m}\sqrt{E+m}} \begin{pmatrix} E+m & 0 & p^3 & p^- \\ 0 & E+m & p^+ & -p^3 \\ p^3 & p^- & E+m & 0 \\ p^+ & -p^3 & 0 & E+m \end{pmatrix} w_r(0)$$

$$= \sqrt{\frac{E+m}{m}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{p_z}{E+m} & \frac{p_-}{E+m} \\ 0 & 1 & \frac{p_+}{E+m} & \frac{-p_z}{E+m} \\ \frac{p_z}{E+m} & \frac{p_-}{E+m} & 1 & 0 \\ \frac{p_+}{E+m} & \frac{-p_z}{E+m} & 0 & 1 \end{pmatrix} w_r(0)$$

$$\underbrace{\hspace{1.5cm}}_{w_1(p)} \quad \underbrace{\hspace{1.5cm}}_{w_2(p)} \quad \underbrace{\hspace{1.5cm}}_{w_3(p)} \quad \underbrace{\hspace{1.5cm}}_{w_4(p)}$$

mit $p_{\pm} := p_x \pm i p_y$ in der Standarddarstellung.

Durch die Lorentztransformation erhalten wir also im Spinor neue (“kleine”) Komponenten mit umgekehrtem Energievorzeichen. Bei $p \ll m$ dominieren die “großen Komponenten”.

Bemerkungen:

- Wellenpakete (z.B. gaussisch) enthalten i.a. ebenfalls entsprechende Anteile negativer Energie (s. Schwabl Kap. 10.1), auch wenn man bei $t = 0$ nur mit positiver Energie beginnt.
- Streuung an einer Potentialschwelle: Analog SG, außer bei $\Delta V > 2m$. Letzteres führt zum sogenannten “Kleinschen Paradoxon”, ist aber unphysikalisch, da bei $\Delta V > 2m$ Paarerzeugung auftritt! (\rightarrow Vielteilchenphysik)

5.7.2 Freie DG im Impulsraum

DG:

$$(i \not{\partial} - m) \psi = 0 \quad ; \quad \text{Ansatz: } \psi = w_r(p) e^{-i \epsilon_r p x} \quad \Rightarrow \quad i \not{\partial} \psi = \epsilon_r \not{p} \psi$$

↑ kein Operator!

$$\Rightarrow \quad \boxed{(\not{p} - \epsilon_r m) w_r(p) = 0} \quad \text{DG im Impulsraum}$$

Übliche Schreibweise:

$$w_{1,2} = u_{1,2} \quad : \quad \text{Lösungen zu “positiver Energie” (in den großen Komponenten)}$$

$$w_{3,4} = v_{1,2} \quad : \quad \text{Lösungen zu “negativer Energie” (in den großen Komponenten)}$$

also

$$\boxed{\begin{aligned} (\not{p} - m) u_r(p) &= 0 \\ (\not{p} + m) v_r(p) &= 0 \end{aligned}}, \quad r = 1, 2$$

Konstruktion der Lösungen bei endlichem Impuls:

$$\begin{aligned} \not{p} \not{p} &= m^2 \Rightarrow (\not{p} - m)(\not{p} + m) = \not{p} \not{p} - m^2 = 0 \\ &\Rightarrow (\not{p} + m) u_r(0) \quad \text{ist (bis auf Normierung) Lösung der DG zu Impuls } p ! \end{aligned}$$

Mit Normierung:

$$\left. \begin{aligned} u_r(p) &= \frac{1}{\sqrt{2m(E+m)}} (\not{p} + m) u_r(0) \\ v_r(p) &= \frac{1}{\sqrt{2m(E+m)}} (\not{p} - m) v_r(0) \end{aligned} \right\} \text{ Ohne explizite LT gefunden!}$$

Adjungierte DG: (Mit Einfügen von $\gamma_0^2 = \mathbb{1}$ und mit $\bar{u} = u^\dagger \gamma_0$)

$$\begin{aligned} 0 &= u_r^\dagger(p) (\gamma_\mu^\dagger p^\mu - m) = \bar{u}_r(p) \gamma_0 (\gamma_\mu^\dagger p^\mu - m) \quad | \cdot \gamma_0 \\ 0 &= \bar{u}_r(p) \underbrace{(\gamma_0 \gamma_\mu^\dagger \gamma_0)}_{\gamma_\mu} p^\mu - \underbrace{\gamma_0^2}_1 m \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{\begin{aligned} \bar{u}_r(p) (\not{p} - m) &= 0 \\ \bar{v}_r(p) (\not{p} + m) &= 0 \end{aligned}}$$

Normierung: [(Vorsicht, es existieren verschiedene Konventionen!)]

$$\begin{cases} \bar{u}_r(p) u_s(p) = \delta_{rs}, & \bar{u}_r(p) v_s(p) = 0 \\ \bar{v}_r(p) v_s(p) = -\delta_{rs}, & \bar{v}_r(p) u_s(p) = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \bar{w}_r(p) w_s(p) = \epsilon_r \delta_{rs} :$$

5.7.3 Projektionsoperatoren für Energie und Spin

Energieprojektionsoperator:

Wegen $(\not{p} - m)u = 0$ gilt $(\not{p} + m)u = (\not{p} - m + 2m)u = 2mu$. Zusammen mit der analogen Gleichung $(\not{p} + m)v = 0$ ergibt dies einen Projektionsoperator auf u bzw. v , also auf die Lösungen “positiver” bzw. “negativer” Energie:

$$\Omega_\pm(p) = \frac{\pm \not{p} + m}{2m} \Rightarrow \begin{aligned} \Omega_+ u &= u, & \Omega_- u &= 0 \\ \Omega_+ v &= 0, & \Omega_- v &= v \end{aligned}$$

Spinprojektionsoperator:

Ebenso gibt es eine Projektion auf den Spin, analog zum nichtrelativistischen Operator $P_{\vec{n}} = \frac{1 + \vec{n} \cdot \vec{\sigma}}{2}$

Relativistisch lautet der Operator:

$$\Sigma(n) := \frac{1 + \gamma_5 \not{n}}{2}$$

mit dem Polarisations-Vierervektor $n := (0, \vec{n})$ im Ruhesystem (also $(p = (m, \vec{0}))$), wobei \vec{n} ein Einheitsvektor ist

$$\Rightarrow n_\mu n^\mu = -1, \quad n_\mu p^\mu = 0.$$

Insbesondere gilt für den Polarisationsvektor $(z^\mu) := (0, 0, 0, 1)$, also für einen Spin in z-Richtung, ($\Rightarrow \not{z} \equiv z^\mu \gamma_\mu = \gamma_3$) bei Verwendung der Standarddarstellung:

$$\gamma_5 \not{z} = \gamma_5 \gamma_3 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1} \\ \mathbb{1} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_3 \\ \sigma_3 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & -\sigma_3 \end{pmatrix}$$

Also

$$\begin{aligned} \Sigma(+z) w_1(0) &= w_1(0) & \Sigma(-z) w_2(0) &= w_2(0) \\ \Sigma(-z) w_3(0) &= w_3(0) & \Sigma(+z) w_4(0) &= w_4(0) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow z\text{-Komponente des Spins im Ruhesystem: } \begin{pmatrix} + \\ - \\ - \\ + \end{pmatrix} .$$

5.8 Das Wasserstoffatom

Die Dirac-Gleichung kann man für Atome mit einem einzelnen Elektron und Kernladung Z exakt lösen. Hier werden wir die Lösung in ihren wesentlichen Schritten skizzieren und das Ergebnis diskutieren. Details sind in allen Lehrbüchern zur Dirac-Gleichung zu finden. Wir wählen die Standarddarstellung und die Formulierung mit $\vec{\alpha}$, β , die hier besonders günstig sind.

Dirac-Gleichung: (kurzzeitig wieder mit \hbar und c)

$$i \hbar \partial_t \psi(\vec{x}, t) = \left[c \vec{\alpha} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) + \beta m c^2 + q \varphi \right] \psi(\vec{x}, t)$$

Coulomb-Potential: Wähle $\vec{A} = 0$,
$$q \varphi = V(r) = -Z \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e_0^2}{r} = -Z \frac{\alpha}{r}$$

$$\alpha \approx \frac{1}{137} : \text{Feinstrukturkonstante}$$

Zeitabhängigkeit:

$$\psi(\vec{x}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \psi(\vec{x}) \quad \Rightarrow \quad \underbrace{\left[c \vec{\alpha} \vec{p} + \beta m c^2 + V(r) \right]}_{\hat{H}} \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x})$$

Hamiltonoperator: (ausgedrückt in 2×2 -Matrizen in der Standarddarstellung)

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} (m + V)\mathbb{1} & \vec{\sigma} \hat{\vec{p}} \\ \vec{\sigma} \hat{\vec{p}} & (-m + V)\mathbb{1} \end{pmatrix}$$

5.8.1 Winkelanteil der Lösung

Symmetrieeigenschaften: \hat{H} ist rotationsinvariant, also:

- 1) \hat{H} kommutiert mit $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$,
mit $\vec{L} = -i \hbar \vec{x} \times \vec{\nabla}$ und $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \Sigma = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}$ (Standarddst.) (s. Kap. 5.6.5).
Es gibt also gemeinsame Eigenzustände zu \hat{H} , \vec{J}^2 , und J_z .
- 2) \hat{H} kommutiert nicht mit L_z , S_z , \vec{L}^2 .
- 3) Der Gesamtdrehimpuls \vec{J} kommutiert auch mit \vec{L}^2 , $\vec{S}^2 = \frac{3}{4}$ und $\vec{L} \cdot \vec{S}$,
weil diese unter Rotationen invariant ("Skalare") sind.

Wir werden ψ aus zwei Pauli-Spinoren zusammensetzen: $\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$.

Es folgen zwei Differentialgleichungen, für φ und χ , in denen nur $\vec{\sigma} \cdot \vec{p}$ und $V \pm m$ vorkommt.

Wir betrachten deshalb zunächst Drehimpulseigenfunktionen für die zweikomponentigen Pauli-Spinoren, nämlich (siehe nichtrelativistische QM)

$$\text{Zu } \underline{j = l + \frac{1}{2}} : \quad \varphi_{jm}^{(+)} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+\frac{1}{2}+m}{2l+1}} Y_{l,m-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{\frac{l+\frac{1}{2}-m}{2l+1}} Y_{l,m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

$$\text{Zu } \underline{j = l - \frac{1}{2}} : \quad \varphi_{jm}^{(-)} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+\frac{1}{2}+m}{2l+1}} Y_{l,m-\frac{1}{2}} \\ -\sqrt{\frac{l+\frac{1}{2}-m}{2l+1}} Y_{l,m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

Dies sind jeweils Eigenzustände von \vec{J}^2 , J_z und \vec{L}^2 mit Eigenwerten $j(j+1)$, m , $l(l+1)$, wobei $m = -j, -j+1, \dots, j$.

Weil $\vec{J}^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2\vec{L}\vec{S}$ und weil \vec{J}^2 mit \vec{L}^2 und mit $\vec{S}^2 = \frac{3}{4}$ kommutiert, sind die φ_{jm} auch Eigenfunktionen von $\vec{L} \cdot \vec{\sigma}$:

$$\begin{aligned} (\vec{L} \cdot \vec{\sigma}) \varphi_{jm}^{(\pm)} &= \frac{1}{2} \left(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \frac{3}{4} \right) \varphi_{jm}^{(\pm)} = \frac{1}{2} \begin{Bmatrix} l & \varphi_{jm}^{(+)} \\ -l-1 & \varphi_{jm}^{(-)} \end{Bmatrix} \\ &=: -\frac{1}{2} (\kappa + 1) \varphi_{jm}^{(\pm)} \quad \text{mit} \quad \kappa \equiv \mp \left(j + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

Für gegebenes j haben $\varphi_{jm}^{(+)}$ und $\varphi_{jm}^{(-)}$ unterschiedliche Parität, da sie sich in l um 1 unterscheiden und $Y_{lm}(-x) = (-1)^l Y_{lm}(x)$.

Außerdem gilt (ohne Beweis, siehe z.B. Schwabl, Aufgabe 8.2)

$$\varphi_{jm}^{(+)} = \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{x}}{r} \varphi_{jm}^{(-)}$$

\hat{H} ist auch unter der Paritätstransformation invariant. Die Eigenzustände sind daher auch nach der Parität klassifizierbar, zusätzlich zu j und m .

Unter der Paritätstransformation $\vec{x} \mapsto -\vec{x}$ (s. Kap. 5.9.2) transformiert sich

$$\psi(x) \mapsto \beta \psi(-x) = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & \\ & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \psi(-x),$$

d. h. die oberen und die unteren Komponenten transformieren sich mit entgegengesetzten Vorzeichen, so wie dies auch $\varphi^{(+)}$ und $\varphi^{(-)}$ tun.

⇒ Ein sinnvoller *Ansatz* ist daher, die oberen Komponenten proportional zu $\varphi_{jm}^{(\pm)}$ zu wählen, und die unteren Komponenten proportional zu $\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{x}}{r} \varphi_{jm}^{(\pm)}$.

5.8.2 Radiale Anteile der Lösung

Wir führen jetzt radiale Anteile der Lösung ein und setzen an

$$\psi_{jm}^{(\pm)}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \frac{iG_j^{(\pm)}(r)}{r} \varphi_{jm}^{(\pm)} \\ \frac{F_j^{(\pm)}}{r} \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{x}}{r} \varphi_{jm}^{(\pm)} \end{pmatrix}$$

In der Dirac-Gleichung taucht $\vec{\sigma} \cdot \hat{p}$ auf, und in ψ erscheint $\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{x}}{r}$.

In der Rechnung tauchen unter anderem die folgenden Ausdrücke auf:

$$\begin{aligned} \sigma_i \sigma_j &= \delta_{ij} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k \\ \Rightarrow \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{x}}{r} \cdot \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{x}}{r} &= \frac{\vec{x}^2}{r^2} = 1 \\ \text{und } (\vec{\sigma} \cdot \vec{x})(\vec{\sigma} \cdot \hat{p}) &= \vec{x} \cdot \hat{p} + i \vec{\sigma}(\vec{x} \times \hat{p}) \\ &= -i \hbar r \partial_r + i \underbrace{\vec{\sigma} \cdot \vec{L}} \end{aligned}$$

Spin-Bahn-Kopplung!

Aus der Spin-Bahn-Kopplung werden wir die Feinstruktur erhalten.

Weil $\varphi_{jm}^{(\pm)}$ Eigenfunktion zu $\vec{L} \cdot \vec{\sigma}$ mit den Eigenwerten $-\frac{1}{2}(\kappa + 1)$ ist (s.o.), ergeben sich die Radialgleichungen

$$\begin{aligned} \partial_r F - \kappa \frac{F}{r} &= \left(m - E - \frac{Z\alpha}{r} \right) G \\ \partial_r G + \kappa \frac{G}{r} &= \left(m + E + \frac{Z\alpha}{r} \right) F \end{aligned}$$

Sie werden auf ähnliche Weise gelöst wie im nichtrelativischen Fall:

Für große r : Hier fallen die $\frac{1}{r}$ -Terme näherungsweise fort und wir erhalten exponentielles Verhalten:

$$F, G \sim e^{-\rho}, \quad \text{mit} \quad \rho = \sqrt{m^2 - E^2} r$$

Ansatz: $F(\rho) = f(\rho) e^{-\rho}$, $G(\rho) = g(\rho) e^{-\rho}$ mit Potenzreihen,

$$f(\rho) = \rho^s \sum_{\nu=0}^{\infty} b_{\nu} \rho^{\nu} \quad , \quad g(\rho) = \rho^s \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} \rho^{\nu}$$

\Rightarrow Rekursionsgleichungen für a_{ν} , b_{ν}

Bestimmung der Potenz s : Die Terme a_0, b_0 sollen nicht verschwinden

\Rightarrow Koeffizientendeterminante von a_0, b_0 muß Null sein

$$\Rightarrow \dots \Rightarrow s = +\sqrt{\kappa^2 - \alpha^2 Z^2}$$

Potenzreihe muß abbrechen für Normierbarkeit \Rightarrow Hauptquantenzahl und Bedingung für die Energie.

5.8.3 Energieniveaus

Es ergibt sich

$$E_{nj} = \frac{m c^2}{\sqrt{1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{(n - \epsilon_j)^2}}} \quad , \quad \begin{aligned} \epsilon_j &= (j + \frac{1}{2}) - \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - Z^2 \alpha^2} \\ n &= 1, 2, \dots \\ j &= \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, n - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

mit der Hauptquantenzahl n und der Drehimpulsquantenzahl j . Die Energie ist wegen der Rotationssymmetrie des Potentials in der magnetischen Quantenzahl $m_j = -j, -j+1, \dots, j$ $(2j+1)$ -fach entartet.

Bei Entwicklung nach $(Z \alpha)$ findet man das nichtrelativistische Resultat wieder:

$$E_{nj} = m c^2 \left\{ \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Ruheenergie}}}{1} - \frac{(Z \alpha)^2}{2 n^2} - \frac{(Z \alpha)^4}{2 n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4 n} \right) + \mathcal{O}((Z \alpha)^6) \right\}$$

\uparrow \uparrow \uparrow
 nichtrel. hebt Entartung
 Resultat in j auf : Feinstruktur

⇒ Termschema:

$$\left[\begin{array}{l} n = 3 \\ n = 2 \\ n = 1 \end{array} \right. \left\{ \begin{array}{ll} \text{--- } 3s_{\frac{1}{2}} & \text{--- } 3p_{\frac{3}{2}} \quad \text{--- } 3d_{\frac{5}{2}} \\ & \text{--- } 3p_{\frac{1}{2}} \quad \text{--- } 3d_{\frac{3}{2}} \\ & \text{--- } 2p_{\frac{3}{2}} \\ & \text{--- } 2s_{\frac{1}{2}} \quad \text{--- } 2p_{\frac{1}{2}} \\ & \text{--- } 1s_{\frac{1}{2}} \end{array} \right.$$

- Üblicherweise wird die nichtrelativistische Nomenklatur mit s, p, d, ... für $l = 0, 1, 2, \dots$ benutzt, obwohl l keine Quantenzahl der Zustände ist, sondern nur die Parität $(-1)^l$ zu gegebenem j angibt, mit $l = j \pm \frac{1}{2}$
- Die Feinstruktur, also die j -Abhängigkeit der Energie, erscheint aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung. Sie ist also ein *relativistischer Effekt* !
- Bei $Z\alpha > 1$, also bei $Z > 137$ ist die hier ausgerechnete Energie nicht reell. Für die dann auftretenden hohen Energien kann man aber die Einteilchen-Dirac-Gleichung nicht mehr verwenden, sondern muß Vielteilcheneffekte berücksichtigen, also die Quantenelektrodynamik (QED).

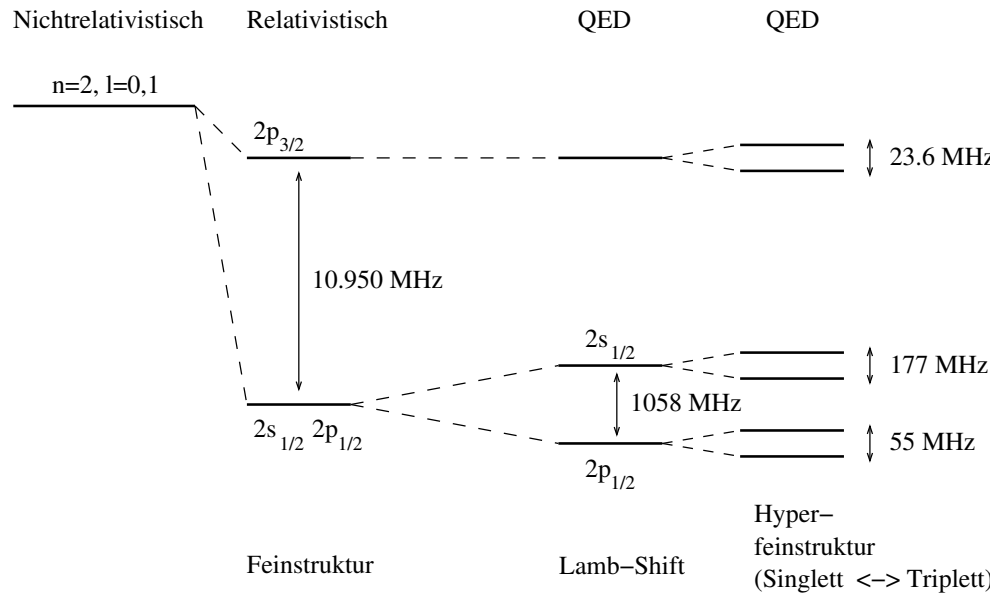
5.8.4 Korrekturen in der QED

Wir haben die Dirac-Gleichung exakt gelöst. Das Ergebnis stimmt aber nicht völlig mit dem Experiment überein. Es fehlen “zwei” Effekte:

- 1) Hyperfinestruktur: durch Wechselwirkung des Magnetfelds (Spins) des Kerns mit dem Spin des Elektrons. Dies läßt sich nichtrelativistisch mit der Schrödingergleichung (Pauli-Gleichung) approximieren. Man erhält eine Aufspaltung aller Energien in zwei Niveaus (Singulett/Triplett).
- 2) Lamb-Shift: durch “Strahlungskorrekturen” : braucht Vielteilchentheorie für Protonen, Elektronen, Photonen : QED.

Beide Effekte lassen sich in der QED berechnen.

Man findet dann sehr genau die experimentellen Resultate wieder, z.B. für die $n = 2$ Niveaus des Wasserstoffs:



Dies war ein sehr großer Erfolg für die Dirac-Gleichung und die Quantenelektrodynamik.

5.8.5 DG für andere Potentiale: Foldy-Wouthuysen-Transformation

- Für nicht-rotationssymmetrische Potentiale ist die Dirac-Gleichung nicht exakt lösbar.
- Man kann aber die nichtrelativistische Näherung zu höheren Ordnungen in $\frac{v}{c}$ betreiben.
- In Ordnung $\frac{v}{c}$ separieren obere und untere Komponenten, und wir haben dafür schon die Pauli-Gleichung hergeleitet.
- In beliebiger höherer Ordnung in $\frac{v}{c}$ erreicht man durch die "Foldy-Wouthuysen-Transformation" ($\psi \mapsto e^{iS} \psi$ geeignet) ebenfalls eine Entkoppelung; es treten dann weitere Korrekturterme in der Pauli-Gleichung auf.

5.9 Symmetrien der Dirac-Gleichung

Die kontinuierlichen Symmetrien der Dirac-Gleichung haben wir schon kennengelernt. In diesem Kapitel untersuchen wir besonders die *diskreten* Symmetrien unter Raumspiegelung, Ladungskonjugation, und Bewegungsumkehr.

5.9.1 Kontinuierliche Symmetrien

1) Lorentztransformationen: Boost, Drehung, Translation

$$\begin{aligned} \text{mit } \psi'(x') &= S \psi(x) \\ x'^{\mu} &= \Lambda^{\mu}_{\nu} x^{\nu} + a^{\mu} \\ S^{-1} \gamma^{\mu} S &= \Lambda^{\mu}_{\nu} \gamma^{\nu} \quad [\Rightarrow \quad S^{-1} = \gamma^0 S^{\dagger} \gamma^0 \cdot \text{sign } \Lambda^0_0] \end{aligned}$$

2) Lokale Eichtransformationen:

$$\begin{aligned} \psi'(x, t) &= e^{-iq\lambda(x,t)} \psi(x, t) \\ A'_{\mu}(x, t) &= A_{\mu}(x, t) + \partial_{\mu} \lambda(x, t) \end{aligned}$$

5.9.2 Paritätstransformation \equiv Raumspiegelung

$$\boxed{\mathcal{P} : \vec{x}' = -\vec{x} \quad , \quad t' = t;} \quad \text{also eine } \underline{\text{LT}} \text{ mit } \Lambda^{\mu}_{\nu} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}$$

Das elektromagnetische Feld transformiert sich wie der Vierervektor x :

$$A'_i(\vec{x}', t) = -A_i(\vec{x}, t) \quad , \quad A_0 \text{ ist invariant}$$

Der Spinor ψ transformiert sich mit einer Matrix S

$$\boxed{\mathcal{P} : \psi'(x') = S \psi(x)}$$

Die Dirac-Gleichung $(i\hbar \gamma^\mu D_\mu - m) \psi = 0$ ist invariant unter dieser Transformation, wenn

$$S = \gamma^0,$$

denn γ^0 kommutiert mit γ^0 und antikommutiert mit γ^i

Interpretation: Man betrachtet ein physikalisches Ereignis mittels eines Spiegels. Das Spiegelbild ist bei der Dirac-Gleichung ebenfalls ein physikalisch mögliches Ereignis.

ABER: Die Parität ist keine allgemeingültige Symmetrie der Naturgesetze:

Sie ist in der schwachen Wechselwirkung (z.B. radioaktiver Zerfall) verletzt: dort koppeln nur die Anteile mit sogenannter “linkshändiger Chiralität”

$$\frac{1 - \gamma_5}{2} \psi$$

von Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen, mit dem Projektionsoperator $\frac{1 \pm \gamma_5}{2}$ der Chiralität.

Wegen $\{\gamma_5, \gamma_0\} = 0$ ändert die Chiralität aber unter der Paritätstransformation \mathcal{P} das Vorzeichen; die Paritätssymmetrie ist hier maximal verletzt.

Im allgemeinen ist das Spiegelbild eines Ereignisses also *kein* mögliches Ereignis !

Dieses experimentelle Ergebnis aus der schwachen Wechselwirkung ist gegenüber der Alltagserfahrung extrem überraschend.

5.9.3 Ladungskonjugationen

Wir betrachten das Verhalten der Dirac-Gleichung unter komplexer Konjugation:

$$\text{DG: } [\gamma_\mu (i \partial^\mu - q A^\mu) - m] \psi = 0$$

$$\text{komplex konj.: } [\gamma_\mu^* (-i \partial^\mu - q A^\mu) - m] \psi^* = 0 \quad \text{da } A^\mu \text{ reell}$$

1) Wir erreichen eine neue Lösung der Dirac-Gleichung, wenn wir eine Transformation

$$\mathcal{C}: \psi \mapsto \psi_C := \tilde{C} \psi^*$$

so finden, daß $\tilde{C} \gamma_\mu^* \tilde{C}^{-1} = -\gamma^\mu$

Lösung in Standarddarstellung: $\tilde{C} = i\gamma_2$

Lösung in Majoranadarstellung: $\tilde{C} = 1$ (s. Übung)

Dann gilt $[\gamma_\mu(i\partial^\mu + qA^\mu) - m]\psi_C = 0$ d. h. ψ_C erfüllt die Dirac-Gleichung zu demselben elektromagnetischen Feld A^μ , aber mit Vorzeichenwechsel der Ladung;

\Rightarrow Zu jedem Teilchen mit Ladung q gibt es ein **Antiteilchen** mit Ladung $-q$.

2) Alternative Transformation: $\psi \mapsto \psi_C$ und $A_\mu \mapsto A_\mu^C = -A_\mu$

Dann ist die Dirac-Gleichung invariant, ohne Änderung von q .

Bemerkung: Die Ladungskonjugations-Symmetrie ist bei der schwachen Wechselwirkung ebenfalls krass verletzt.

Dagegen ist die Kombination \mathcal{CP} "beinahe" erhalten, mit Ausnahmen in den Zerfällen von schweren Quarks wie des "strange" Quarks (K-Mesonen). Die experimentelle Beobachtung dieser \mathcal{CP} -Verletzung kam ebenfalls extrem überraschend.

5.9.4 "Zeitumkehr" (Bewegungsumkehr)

Zur Erläuterung des Konzeptes der Bewegungsumkehr betrachten wir zunächst die klassische Physik und die nichtrelativistische Quantenmechanik, und erst dann die Dirac-Gleichung.

1) Klassische Physik:

Trajektorie eines Teilchens:



Bewegungsumkehr: Kehre zum Zeitpunkt t_0 (z.B. $t_0 = 0$) den Impuls des Teilchens um:

$$\vec{p}(t_0) \mapsto \vec{p}'(t_0) = -\vec{p}(t_0)$$

Das System ist invariant, falls dann dieselbe Trajektorie wieder durchlaufen wird, nunmehr rückwärts. (Dies ist also keine Bewegung "rückwärts in der Zeit"!)



Bei Invarianz gilt also:

$$\vec{p}'(t_0 + \Delta t) = -\vec{p}(t_0 - \Delta t) \quad , \quad \vec{x}'(t_0 + \Delta t) = +\vec{x}(t_0 - \Delta t)$$

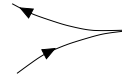
und mit der Wahl $t_0 = 0$ und $t = \Delta t$:

$$\vec{p}'(t) = -\vec{p}(-t) \quad , \quad \vec{x}'(t) = +\vec{x}(-t) .$$

Invarianz erfüllt, falls \hat{H} den Impuls quadratisch enthält;

nicht erfüllt bei Kräften $\sim \vec{p}$,

z.B. im Magnetfeld, außer wenn man auch $\vec{A} \mapsto -\vec{A}$ transformiert [$\Rightarrow \vec{B} \mapsto -\vec{B}$]



2) Nichtrel. QM:

Schrödingergleichung: $i \partial_t \psi(t) = H_t \psi(t)$

Komplex konjugiert: $-i \partial_t \psi^*(t) = H_t^* \psi^*(t)$

Umbenennung $t \mapsto -t$: $i \partial_t \underbrace{\psi^*(-t)}_{=: \psi'(t)} = H_{-t}^* \psi^*(-t)$

Invariant wenn $H_t = H_{-t}^*$

Effekt auf Erwartungswerte wie im klassischen Fall:

$$\langle x \rangle_{\psi'(t)} = \langle x \rangle_{\psi(-t)}$$

$$\langle \hat{p} \rangle_{\psi'(t)} \stackrel{\hat{p}^* \equiv -\hat{p}}{=} - \langle \hat{p} \rangle_{\psi(-t)}$$

3) Dirac-Gleichung: (Rechnung s. Übung)

Analog zum Fall der SG. Die Dirac-Gleichung ist invariant unter der Transformation

$$\mathcal{T} : \psi'(t) = S \psi^*(-t) \quad \text{mit} \quad S = i \gamma_1 \gamma_3 \quad \text{in Standarddarst.}$$

wobei auch wieder das elm. Feld transformiert werden muß

$$\vec{A}'(x, t) = -\vec{A}(x, -t), \quad A_0'(x, t) = A_0(x, -t)$$

Eine mögliche Interpretation (Bjorken, Drell):

Man filme ein physikalisches Ereignis und lassen dann den Film rückwärts ablaufen. Bei der Dirac-Gleichung zeigt dies wieder eine physikalisch mögliche Situation.

Bemerkung:

In der Natur ist die \mathcal{T} -Invarianz ebenfalls verletzt, in den gleichen Fällen wie die \mathcal{CP} -Invarianz, denn es gilt das

\mathcal{CPT} -Theorem:

In einer Quantenfeldtheorie mit lokalen Wechselwirkungen und Lorentzinvarianz ist \mathcal{CPT} eine erhaltene Symmetrie.

Es folgt z.B., daß für jedes geladene Teilchen auch ein Antiteilchen existiert, mit gleicher Masse und gleichem Spin.

Literatur: Streater, Wightman: \mathcal{CPT} , *Spin, Statistics, and all that*.

Speziell in einer Lagrangeschen Feldtheorie (s.u.) bewirkt die \mathcal{CPT} Transformation

$$\mathcal{L}(x) \mapsto \mathcal{L}(-x) ,$$

worunter die Theorie invariant ist.

Teil III

Quantenfeldtheorie

Kapitel 6

Kanonische Quantenfeldtheorie

Es folgt eine kurze Einführung in die “2. Quantisierung” von relativistischen Quantentheorien, also den Übergang zur relativistischen **Vielteilchenphysik**, mittels des Lagrange-Formalismus und “kanonischer Quantisierung”.

Verwandt und alternativ kann man auch, wie wir danach kurz einführen werden, mittels *Pfadintegralen* vorgehen, wobei sich ein gemeinsamer Formalismus gleichartiger erzeugender Funktionen für klassische Theorien, Quantenmechanik, Quantenfeldtheorie und statistische Mechanik ergibt ! Weiterführendes findet sich z.B. in den Vorlesungen über *Pfadintegrale* und über *Quantenfeldtheorie*.

Der Zugang zur relativistischen Vielteilchenphysik verläuft ähnlich wie der nichtrelativistische Zugang in Kap. 1, insbesondere Kap. 1.5 (Feldoperatoren). Wir benötigen zusätzlich zur Hamiltonschen die Lagrangesche Formulierung.

6.1 Lagrange-Formalismus

Da der Lagrange-Formalismus schon in der Klassischen Mechanik behandelt wurde, werden wir ihn hier nur knapp zusammenfassen.

6.1.1 Lagrangesche Mechanik (Erinnerung)

Lagrange-Funktion:

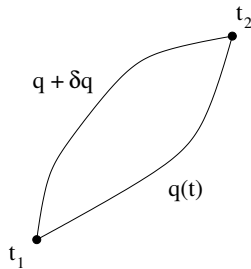
$$L(q_i, \dot{q}_i) = T - V = \sum_i \left[\frac{1}{2} m_i \dot{q}_i^2 - V(q_i) \right] \quad (\text{z.B.})$$

Wirkung:

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt L(t)$$

Die Bewegungsgleichungen ergeben sich aus dem Prinzip der kleinsten Wirkung:

$$\delta S = 0 \quad \text{bei Variation einer Bahn}$$



Daraus folgen die

Euler-Lagrange-Bewegungsgleichungen

$$\frac{\partial L}{\partial q_i(t)} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i(t)} = 0$$

Sie enthalten die kanonisch konjugierten Impulse: $p_i := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$

Die Hamilton-Funktion: $H(p_i, q_i) = \sum_i p_i \dot{q}_i - L = T + V$

ist durch eine Legendre-Transformation mit der Lagrange-Funktion verknüpft.

6.1.2 Bewegungsgleichungen in der Feldtheorie

Index $i \rightarrow$ Ort x : Dynamische **Feldvariable** $\phi(x)$ an jedem Ort (diskret oder kontinuierlich)

(N.B. Bei kontinuierlicher Ortsvariable ergeben sich in der relativistischen Quantenfeldtheorie erhebliche Probleme durch Divergenzen, die durch Regularisierung und Renormierung behoben werden müssen (s.a. später).)

Wir betrachten allgemeiner nun ein Feld $\phi_r(x)$ an jedem Ort, wobei der Index verschiedene Komponenten des Feldes numeriert.

Lagrangedichte: $\mathcal{L}(\phi_r(x), \partial_\mu \phi_r(x))$

Lagrangefunktion: $L(t) = \int d^3x \mathcal{L}$

Die Wirkung (“Action”): $S(\Omega) = \int_\Omega d^4x \mathcal{L} = \int dt L(t)$

ist auf einem Raumzeitgebiet Ω definiert.

Wieder ergeben sich aus dem Prinzip der kleinsten Wirkung, (nämlich $\delta S = 0$ bei einer Variation der Felder, die auf der Oberfläche von Ω verschwindet) die

$$\text{Bewegungsgleichungen} \quad \boxed{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_r(x)} - \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi_r(x))} = 0}$$

Der kanonisch konjugierte Impuls ist nun ein Feld, genauso wie $\phi_r(x)$:

$$\pi_r(x) := \frac{\delta \mathcal{L}}{\delta \dot{\phi}_r(x)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}_r(x)}$$

N.B.: Die Einführung eines Impulses zeichnet die Zeitkoordinate aus, wodurch die resultierenden Gleichungen oft nicht mehr offensichtlich (manifest) Lorentz-kovariant sind.

Die Hamilton-Funktion ergibt sich wieder als Legendre-Transformierte der Lagrangefunktion

$$H(\pi_r, \phi_r) = \int d^3x \underbrace{\left(\pi_r(x) \dot{\phi}_r(x) - \mathcal{L}(\phi_r, \partial_\mu \phi_r) \right)}_{\text{Hamiltondichte } \mathcal{H}}$$

Bemerkungen:

- 1) Bei komplexen Feldern behandelt man (z.B.) ϕ und ϕ^* als unabhängige Komponenten.
- 2) Relativistische Invarianz:
 - \mathcal{L} soll x_μ nur als Argument der Felder, aber nicht explizit enthalten (mit einem Term $x_\mu x^\mu$ wäre ein Raum-Zeit-Punkt ausgezeichnet)
 - d^4x ist relativistisch invariant (Rotation in $dx^0 dx^1 dx^2 dx^3$!)
 - ⇒ Damit die Wirkung S relativistisch invariant ist, muß auch \mathcal{L} relativistisch invariant sein, d.h.

$$\mathcal{L}(\phi'(x'), \partial'_\mu \phi'(x')) = \mathcal{L}(\phi(x), \partial_\mu \phi(x))$$
 - \mathcal{L} muß lokal sein (darf keine Raumzeitintegrale enthalten), sonst wäre Akausalität möglich
- 3) \mathcal{L} ist nur bis auf eine totale Divergenz $\mathcal{L} \rightarrow \mathcal{L} + \partial_\nu f^\nu(x)$ bestimmt !
 → Randterm bei Integration → Bewegungsgl. invariant wenn die Felder im Unendlichen genügend schnell abfallen
- 4) \mathcal{L} muß hermitesch sein (bis auf eine totale Divergenz)

6.1.3 Beispiel: Einteilchen - Klein-Gordon-Gleichung

Eine mögliche Lagrangedichte ist hier

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left((\partial_\mu \phi) (\partial^\mu \phi) - m^2 \phi^2 \right)$$

Ableitungen:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} = -m^2 \phi \quad , \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} = \partial^\mu \phi$$

$$\Rightarrow \text{Euler-Lagrange: } (\partial_\mu \partial^\mu + m^2) \phi = 0 \quad : \text{ (reelle) KG-Gleichung}$$

Konjugierter Impuls:

$$\pi(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}(x)} = \dot{\phi}(x)$$

Hamilton-Dichte:

$$\mathcal{H} = \pi \dot{\phi} - \mathcal{L} = \frac{1}{2} (\pi^2(x) + (\nabla\phi(x))^2 + m^2 \phi^2(x))$$

Dies sieht wie eine Kette von gekoppelten harmonischen Oszillatoren mit Impulsen π und Koordinaten ϕ aus !

N.B. Über diese Darstellung kann man auch die 2. Quantisierung der KGG finden, indem man \mathcal{H} als Kontinuumslimit einer diskreten Kette von gekoppelten harmonischen Oszillatoren an Punkten x_i betrachtet und jeden dieser Oszillatoren quantenmechanisch behandelt. Siehe z.B. Schwabl, Kap. 12.1.

6.1.4 Noethersches Theorem

- Aus jeder kontinuierlichen Symmetrie der Wirkung S folgt ein Erhaltungssatz
- Wir betrachten eine infinitesimale Transformation mit Parametern $\delta\omega^a$ (den Index r lassen wir zur Vereinfachung fort)

$$\begin{aligned} x^\mu &\mapsto x^\mu + \delta x^\mu = x^\mu + \frac{\delta x^\mu}{\delta\omega^a} \delta\omega^a \\ \phi &\mapsto \phi + \delta\phi = \phi + \frac{\delta\phi}{\delta\omega^a} \delta\omega^a \end{aligned}$$

wobei a die Parameter der Transformation numeriert. Durch mehrfaches Anwenden der Kettenregel und Benutzen der Euler-Lagrange-Bewegungsgleichung erhält man dann nach einiger Rechnung für die Änderung der Wirkung S unter dieser Transformation

$$0 = \delta S = - \int d^4x (\partial_\mu j_a^\mu) \delta\omega^a$$

mit dem zu der Transformation gehörigen **Strom**

$$j_a^\mu = - \left[\underbrace{\mathcal{L} g^\mu{}_\rho - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \phi)} \partial_\rho \phi}_{T^\mu{}_\rho} \right] \frac{\delta x^\rho}{\delta\omega^a} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \phi)} \frac{\partial \phi}{\delta\omega^a}$$

der den *Energie-Impuls-Tensor* $T^\mu{}_\rho$ enthält. Da die Parameter ω^a beliebig sind, ist dieser Strom erhalten:

$$\partial_\mu j^\mu = 0$$

- \Rightarrow die "Ladung" $Q = \int d^3x j^0(x, t)$ ist zeitlich erhalten,
weil das Integral über eine Divergenz $\int d^3x \partial_i j^i$ verschwindet.

Beispiele:

1) Translationen:

$$\Rightarrow \partial_\mu T^{\mu\nu} = 0$$

\Rightarrow erhaltener räumlicher "Strom": Spannungstensor T^{ij}

Erhaltene "Ladung": Viererimpuls $P^\nu = \int d^3x T^{0\nu}(x, t)$

mit der nullten Komponente

$$P^0 = \int d^3x \mathcal{H} = H$$

2) Rotationen: Gesamtdrehimpuls erhalten

3) Globale Eichtransformationen: $\phi \mapsto e^{i\epsilon} \phi$:

Symmetrie z.B. bei Lagrangedichten der Form $\phi^\dagger \phi$, oder $\partial_\mu \phi^\dagger \partial^\mu \phi$

\Rightarrow (elm.) Strom (bei der komplexen KGG)

$$j^\mu = \sum_r \left(i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \phi_r} \phi_r \right) + \text{h.c.} \stackrel{\text{KGG}}{=} (i \partial_\mu \phi)^\dagger \phi + \text{h.c.}$$

\Rightarrow (elm.) Ladung erhalten: $Q = q \int d^3x (i \pi^\dagger(x) \phi(x) + \text{h.c.})$,

wobei q hier willkürlich ist.

Zusammenhang mit den Erzeugenden der Symmetrietransformation:

Wir haben Symmetrietransformationen betrachtet, die sich mit einem kleinen Parameter aus der $\mathbb{1}$ entwickeln lassen, also Elemente U einer Lie-Gruppe

$$U = e^{i\alpha T} = \mathbb{1} + i\alpha T + O(\alpha^2)$$

mit Erzeuger $T = T^\dagger$ und reellem stetigem α . Ein Operator A transformiert sich als

$$A' = U A U^\dagger = (1 + i\alpha T) A (1 - i\alpha T) + O(\alpha^2) = A + i\alpha [T, A] + O(\alpha^2)$$

Wenn der Operator A unter der Transformation invariant ist, gilt also $[A, T] = 0$. Insbesondere ist bei einer Symmetrie des Systems der Hamiltonoperator invariant, also

$$[H, T] = 0 .$$

Umgekehrt wird durch jede Erhaltungsgröße Q (also $\frac{dQ}{dt} = i[H, Q] = 0$) über den unitären Operator

$$U = e^{i\alpha Q}$$

eine Symmetrietransformation erzeugt, nämlich genau diejenige, zu der nach dem Noether'schen Theorem die "Ladung" Q gehört !

6.2 Zweite Quantisierung

6.2.1 Erinnerung an die 2. Quantisierung der Schrödingergleichung (Kap. 1)

- Beginne mit einer Einteilchen-Basis $|i\rangle$
- Spanne total (anti-) symmetrischen Vielteilchen-Fock-Raum auf mit der Basis

$$|n_1 n_2 \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle$$

wobei die Erzeuger a_i^\dagger ein Teilchen im Zustand $|i\rangle$ erzeugen

⇒ Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned} [a_i, a_j^\dagger]_{-\epsilon} &= \delta_{ij} \\ [a_i, a_j]_{-\epsilon} = [a_i^\dagger, a_j^\dagger]_{-\epsilon} &= 0 \end{aligned}$$

[Kommutator $\epsilon = +1$ für Bosonen, Antikommutator $\epsilon = -1$ für Fermionen]

- Feldoperatoren: Transformation auf Ortsraumbasis $|x\rangle$

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{\psi}(x) &:= \sum_i \varphi_i(x) a_i \\ \hat{\psi}^\dagger(x) &:= \sum_i \varphi_i^\dagger(x) a_i^\dagger \end{aligned}} \quad \text{mit Wellenfunktion } \varphi_i(x) = \langle x | i \rangle$$

⇒ Vertauschungsrelationen wie bei a_i (ersetze δ_{ij} durch $\delta(x - x')$)

- Im Vielteilchensystem sehen die 1- und (die im Ortsraum diagonalen) 2-Teilchenoperatoren, ausgedrückt in Operatoren $\hat{\psi}, \hat{\psi}^\dagger$, formal genauso aus wie im Einteilchensystem – dort ausgedrückt in Wellenfunktionen $\psi(x), \psi^*(x)$.

- Ebenso ergeben sich formal dieselben Bewegungsgleichungen.
- Also ist bei der Schrödingergleichung die “2. Quantisierung” durchführbar durch die Ersetzung $\psi \mapsto \hat{\psi}$, $\psi^* \mapsto \hat{\psi}^\dagger$, mit kanonischen Vertauschungsrelationen für die Operatoren $\hat{\psi}$, $\hat{\psi}^\dagger$.

6.2.2 Verallgemeinerung

- Die Lagrangefunktion der Schrödingergleichung

$$i\hbar \dot{\psi}(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right) \psi(x)$$

ist

$$L = i\hbar \psi^* \dot{\psi} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^* \cdot \nabla \psi - V(r) \psi^* \psi$$

Daraus ergibt sich der zu ψ kanonisch konjugierte Impuls

$$\pi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} = i\hbar \psi^*$$

Es ist daher plausibel, daß im allgemeinen nicht ψ^* , sondern der kanonisch konjugierte Impuls π in die zweite Quantisierung eingeht.

- Das durch den Erfolg begründete allgemeine Rezept für die 2. Quantisierung (= Übergang zur Vielteilchenphysik) ist

$$\boxed{\psi, \pi \mapsto \hat{\psi}, \hat{\pi}}$$

mit kanonischen gleichzeitigen Vertauschungsrelationen zwischen dem Feldoperator $\hat{\psi}$ und dem konjugierten Impuls-Feldoperator $\hat{\pi}$:

$$[\hat{\psi}_r(x), \hat{\pi}_s(x')]_{-\epsilon} = i\hbar \delta_{rs} \delta(x - x')$$

also analog zu den Vertauschungsrelationen von Ort und Impuls in der Einteilchen-Quantenmechanik.

Bei der SG mit $\hat{\pi} = i\hbar \hat{\psi}^\dagger$ also $[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^\dagger(x)] = \delta(x - x')$ wie in Kapitel 1.

- $\hat{\psi}$ und $\hat{\pi}$ erfüllen wieder dieselben Wellengleichungen wie ψ und π .

- Die Operatorzeichen $\hat{}$ werden wieder meist weggelassen!
- Auch bei relativistischen Theorien erhält (postuliert) man so die gleichzeitigen Kommutatoren:

$$[\psi_r(x, t), \pi_s(x', t)]_{-\epsilon} = i \hbar \delta_{rs} \delta(\vec{x} - \vec{x}')$$

Alle anderen Kommutatoren verschwinden

Wegen der Deltafunktionen im Raum sind diese Beziehungen nur wirksam, falls Ort \vec{x} und Zeit t übereinstimmen und sind deswegen lorentzinvariant.

- Durch die Benutzung des kanonischen Impulses wird die Zeitkoordinate ausgezeichnet, wodurch die explizite Lorentzkovarianz der Gleichungen in dieser kanonischen 2. Quantisierung verlorenght. Dieser Schönheitsfehler wird beim Pfadintegralformalismus vermieden. (Literatur zu diesen und anderen Quantisierungsformalismen: z.B. Kaku, Quantum Field Theory, S. 61 ff)
- Explizite Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren werden wir bei den Impulsraumdarstellungen finden.
- Es existieren auch andere, letztlich äquivalente “Quantisierungsverfahren”, darunter z.B.:
 - das explizit kovariante Gupta-Bleuler-Verfahren, in dem aber zunächst unphysikalische Zustände, sogenannte “Geister”, auftauchen und über Nebenbedingungen eliminiert werden müssen,
 - die stochastische Quantisierung mit einer fiktiven 5. zeitartigen Koordinate,
 - und die Quantisierung über Pfadintegrale.

6.3 Quantisierung des reellen Klein-Gordon-Feldes

Als erstes Beispiel betrachten wir ein *reelles* Klein-Gordon-Feld. (Das komplexe Klein-Gordon-Feld wird in den Übungen behandelt).

6.3.1 Ortsraum

KGG: $(\partial_\mu \partial^\mu + m^2) \phi(x, t) = 0$ Einteilchengleichung für reelles KG Feld

- Die Vielteilchengleichung erreicht man durch Übergang zu Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für ϕ und π .

Hier ist $\pi = \dot{\phi}$ (s. Abschnitt 6.1.3), also lauten die gleichzeitigen Kommutatoren

$$\begin{aligned} [\hat{\phi}(\vec{x}, t), \hat{\phi}(\vec{x}', t)] &= i\hbar \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \\ [\hat{\phi}, \hat{\phi}] = [\hat{\dot{\phi}}, \hat{\dot{\phi}}] &= 0 \end{aligned}$$

- Beim reellen KG Feld mit $\phi^* = \phi$ sind $\hat{\phi}^\dagger = \hat{\phi}$ und $\hat{\pi}^\dagger = \hat{\pi}$ hermitesch
- $\hat{\phi}$ hermitesch \Rightarrow keine Eichinvarianz (Multiplikation mit globaler Phase)
 \Rightarrow elm. Ladung Null. Es gibt keine von den Teilchen verschiedenen Antiteilchen (Auch bei den Operatoren $\hat{\phi}$ und $\hat{\pi}$ spricht man weiterhin von "reellen" oder "komplexen" Feldern.)
- Unter Lorentztransformationen sind die Felder Skalare. Sie beschreiben daher Teilchen mit Spin Null, z.B. das Pion π^0 .

6.3.2 Impulsraum

Wir konstruieren nun die in der Literatur übliche Fourierdarstellung von ϕ , mit positiver Energie, welche die KGG $(\partial_\mu \partial^\mu + m^2) \phi = 0$ erfüllt.

(Durch die Verwendung von kontinuierlichen Impulsen statt Summen entstehen Normierungsprobleme, die wir nicht weiter besprechen. Siehe auch Schwabl, Kaku, Le Bellac)

Lorentzinvarianter Ansatz:

$$\phi(x) =: \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^4k \underbrace{\delta(k^2 - m^2)}_{\Rightarrow \text{KGG}} \underbrace{\theta(k_0)}_{\text{pos. Energie}} \underbrace{\left[A_{\vec{k}} e^{-ikx} + A_{\vec{k}}^\dagger e^{ikx} \right]}_{\text{"ebene Wellen"}}$$

Wir benutzen

$$\delta(f(x)) = \sum_{\text{Nullstellen } x_{(i)}} \frac{\delta(x - x_{(i)})}{|f'(x_{(i)})|}$$

und betrachten $\delta(k^2 - m^2)$ als Funktion von k_0 , also

$$\delta(k^2 - m^2) = \frac{\delta(k_0 - \sqrt{\vec{k}^2 + m^2})}{2k_0} + \frac{\delta(k_0 + \sqrt{\vec{k}^2 + m^2})}{2k_0}$$

$$\Rightarrow \int d^4k \delta(k^2 - m^2) \theta(k_0) f(k) = \int d^3k \int \frac{dk_0}{2k_0} \delta(k_0 - \sqrt{\vec{k}^2 + m^2}) f(k)$$

$$= \int \frac{d^3k}{2\omega_{\vec{k}}} f(k)$$

mit der Nebenbedingung $\omega_{\vec{k}} \equiv k_0 = \sqrt{\vec{k}^2 + m^2}$

Wir sehen, daß $\int \frac{d^3k}{2\omega_{\vec{k}}}$ ein lorentzinvarianter Ausdruck ist. Um einfache Vertauschungsrelationen zu erhalten, setzen wir $A_{\vec{k}} = \sqrt{2\omega_{\vec{k}}} a_{\vec{k}}$ und erhalten

$$\boxed{\phi(x) = \int \frac{d^3k}{\sqrt{(2\pi)^3 2\omega_{\vec{k}}}} \left(a_{\vec{k}} e^{-ikx} + a_{\vec{k}}^\dagger e^{ikx} \right)}$$

$$\Rightarrow \left(\pi(x) = \dot{\phi}(x) = \int \frac{d^3k}{\sqrt{(2\pi)^3 2\omega_{\vec{k}}}} i\omega_{\vec{k}} \left(-a_{\vec{k}} e^{-ikx} + a_{\vec{k}}^\dagger e^{ikx} \right) \right)$$

Aus den gleichzeitigen Vertauschungsrelationen der $\phi, \dot{\phi}$ wird die gleichzeitige Relation:

$$\boxed{[a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}'}^\dagger] = \delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}')}$$

Alle anderen Kommutatoren verschwinden

also die Vertauschungsrelationen von unabhängigen harmonischen Oszillatoren!

Hamiltonian: Aus der Hamiltondichte (Kap. 6.1.3)

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} (\pi^2 + (\nabla\phi)^2 + m^2\phi^2)$$

wird durch Einsetzen

$$\boxed{H = \int d^3x \mathcal{H} = \int d^3k \frac{\omega_{\vec{k}}}{2} \left(a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + a_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger \right) = \int d^3k \omega_{\vec{k}} \left(\underbrace{a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}}_{n_{\vec{k}} \text{ (Dichte)}} + \frac{1}{2} \right)},$$

d.h. unabhängige harmonische Oszillatoren mit "Auslenkungen" ϕ_x und "Impulsen" π_x , und mit kanonischen Vertauschungsrelationen $[\phi, \pi]$.

Also erzeugt $a_{\vec{k}}^\dagger$ ein “Teilchen” mit (per Konstruktion) positiver Energie, $a_{\vec{k}}$ vernichtet eines. Wir haben eine Vielteilchentheorie von unabhängigen Bosonen erhalten.

Vakuum: Wegen der Vertauschungsrelationen gibt es einen Vakuumzustand $|0\rangle$ so, daß

$$\begin{aligned} a_{\vec{k}} |0\rangle &= 0 \\ a_{\vec{k}}^\dagger |0\rangle &= |1_{\vec{k}}\rangle \end{aligned}$$

(Bei der reellen KGG gibt es keine separaten Antiteilchen (s.o.), wohl aber bei der komplexen KGG.)

6.3.3 Normalordnung

Die Energie des Vakuums (“Nullpunktsenergie”) ist $\int d^3k \frac{\omega_{\vec{k}}}{2}$ in diesem Vielteilchensystem. Bei kontinuierlichem Impulsraum ist dies ein Problem, denn die Energie des Vakuums divergiert! Andererseits ist diese Nullpunktsenergie aber *nicht beobachtbar* und man kann sie deswegen *zu Null normieren*! Ähnliche Probleme treten bei Vakuumserwartungswerten anderer Observablen auf. Man **definiert daher geeignete neue, ”normalgeordnete” Operatoren so, dass ihr Erwartungswert im Vakuum per Konstruktion Null ist:**

Normalordnung:: Alle Erzeuger sollen links von allen Vernichtern stehen

Dies erreicht man durch entsprechendes Umsortieren der Erzeuger und Vernichter, *ohne Berücksichtigung der Vertauschungsrelationen*, aber mit einem Minuszeichen beim Vertauschen im Falle von Fermionen.

Das normalgeordnete Produkt wird durch Einschluß in zwei Doppelpunkte gekennzeichnet. Z.B. ist bei Bosonen

$$\begin{aligned} : a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + a_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger : &= 2a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} \\ : (a_1^\dagger + a_1)(a_2^\dagger + a_2) : &= a_1^\dagger a_2^\dagger + \underline{a_2^\dagger a_1} + a_1^\dagger a_2 + a_1 a_2 \end{aligned}$$

Neudefinition: Setze überall Normalordnung in \mathcal{L} , \mathcal{H} , Observablen, ...

$$\text{z.B. } H \mapsto \int d^3k \frac{\omega_{\vec{k}}}{2} : \underbrace{a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} + a_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger}_{2a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}} :$$

Die Nullpunktsenergie taucht nicht mehr auf !

Gleichzeitig wird durch generelle Normalordnung das Problem vermieden, daß im Kontinuum ein (nicht normalgeordnetes) Produkt von zwei Operatoren an demselben Raumzeitpunkt nicht wohldefiniert ist.

6.3.4 Propagatoren

Zur Definition von Propagatoren zerlegen wir zunächst die Lösung der freien Klein-Gordon-Gleichung in Anteile positiver und negativer Frequenz

$$\begin{aligned}\phi(x) &= \phi^+(x) + \phi^-(x) \\ &= \int \frac{d^3k}{\sqrt{(2\pi)^3 2\omega_{\vec{k}}}} a_{\vec{k}} e^{-ikx} + \int \frac{d^3k}{\sqrt{(2\pi)^3 2\omega_{\vec{k}}}} a_{\vec{k}}^\dagger e^{ikx}\end{aligned}$$

Man beachte, daß hier der Anteil positiver Frequenz ϕ^+ den *Vernichter* $a_{\vec{k}}$ und der Anteil negativer Frequenz ϕ^- den *Erzeuger* $a_{\vec{k}}^\dagger$ enthält !

Der **Feynman-Propagator** Δ_F ist über das zeitgeordnete Produkt definiert:

$$\begin{aligned}i\Delta_F(x) &:= \langle 0 | \mathbf{T} \phi(x) \phi(0) | 0 \rangle \\ &\equiv \theta(t) \langle 0 | \phi(x) \phi(0) | 0 \rangle + \theta(-t) \langle 0 | \phi(0) \phi(x) | 0 \rangle \\ &= \theta(t) \langle 0 | \phi^+(x) \phi^-(0) | 0 \rangle + \theta(-t) \langle 0 | \phi^+(0) \phi^-(x) | 0 \rangle \\ &= \theta(t) \langle 0 | [\phi^+(x), \phi^-(0)] | 0 \rangle + \theta(-t) \langle 0 | [\phi^+(0), \phi^-(x)] | 0 \rangle \\ &= \theta(t) [\phi^+(x), \phi^-(0)] + \theta(-t) [\phi^+(0), \phi^-(x)]\end{aligned}$$

Um zur dritten und vierten Zeile zu gelangen, wurde ausgenutzt, daß $\phi^+ |0\rangle = \langle 0| \phi^- = 0$. Die letzte Zeile ergibt sich, weil der Kommutator nicht operatorwertig ist.

In der dritten Zeile sehen wir, daß beide Summanden Prozesse beschreiben, die in der Zeit *vorwärts* propagieren: Beim ersten Summanden wird ein Teilchen bei 0 erzeugt und propagiert nach x , beim zweiten umgekehrt.

Der im relativistischen Fall übliche Feynmanpropagator Δ_F beschreibt diese *beiden* Prozesse, im Unterschied zur früher betrachteten nichtrelativistischen Greensfunktion wie

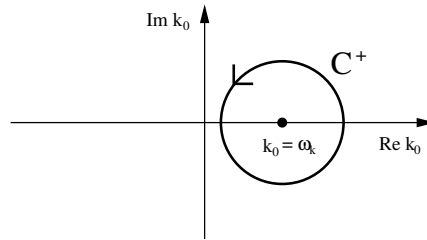
$i G_{a_k, a_k^\dagger}^{ret}(t) = \theta(t) \langle [a_k(t), a_k^\dagger(0)] \rangle$. (N.B. Auch im nichtrelativistischen Fall kann man Δ_F ganz analog definieren.)

Den Kommutator berechnet man mittels der Vertauschungsrelationen von $a_{\vec{k}}$ und $a_{\vec{k}}^\dagger$:

$$\begin{aligned} [\phi^+(x), \phi^-(0)] &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} d\vec{k}' \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{k}}} 2\omega_{\vec{k}'}} [a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}'}^\dagger] e^{-ikx} \\ &= \int \frac{d^3k}{2\omega_{\vec{k}}} \frac{e^{-ikx}}{(2\pi)^3} =: i\Delta^+(x) \quad (\text{mit } k_0 = \omega_{\vec{k}}) \end{aligned}$$

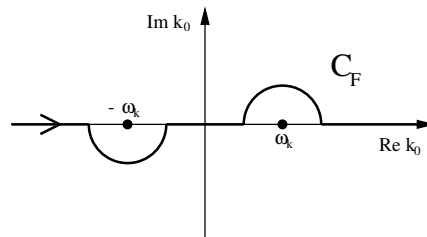
Man kann Δ^+ und den Feynman-Propagator auch als vierdimensionale Integrale schreiben:

$$\Delta^+(x) = - \int_{C^+} \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \frac{e^{-ikx}}{k^2 - m^2}$$



und

$$\Delta_F = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \frac{e^{-ikx}}{k^2 - m^2 + i0^+}$$



Der Term $+i0^+$ bewirkt eine Integration entlang des skizzierten Pfades und damit die Zeitordnung mit $\theta(t)$ und $\theta(-t)$ in Δ_F . Aus dieser Darstellung sieht man, daß Δ_F eine Greensche Funktion der KGG ist:

$$(\partial_\mu \partial^\mu + m^2) \Delta_F(x) = -\delta^{(4)}(x)$$

Die KGG mit einer äußeren Quelle $J(x)$

$$(\partial_\mu \partial^\mu + m^2) \phi(x) = J(x)$$

wird also von

$$\phi(x) = \phi_0(x) - \int d^4x \Delta_F(x-y) J(y)$$

gelöst, wobei $\phi_0(x)$ eine Lösung der freien KGG ist. Dies macht man sich in der Störungstheorie für wechselwirkende Theorien zunutze.

6.4 Φ^4 -Modell: Störungstheorie

Die Φ^4 -Theorie mit der Lagrangedichte

$$\mathcal{L}(\phi, \partial_\nu \phi) = \frac{1}{2}(\partial_\nu \phi)(\partial^\nu \phi) - \frac{m^2}{2} \phi^2 - \frac{\lambda}{4!} \phi^4$$

und reellem Feld $\phi(x)$ ist eine der einfachsten wechselwirkenden Feldtheorien und ein Standardbeispiel. Wir werden anhand dieser Theorie kurz die Herleitung der Störungstheorie skizzieren.

Die klassische ϕ^4 -Feldtheorie wird in den Übungen behandelt.

Die **zweite Quantisierung** verläuft wie beim skalaren Feld ohne Wechselwirkung. Der Hamiltonian enthält nun zusätzlich den ϕ^4 -Term:

$$H = H_0 + H_1, \quad \text{mit } H_1 = \int d^3x \frac{\lambda}{4!} \phi^4$$

und ϕ und π sind nun Operatoren.

Die **Störungstheorie** erhält man durch Entwicklung in der Kopplung λ . Dazu geht man, analog zur QM I, vom bisherigen Heisenberg-Bild zum **Wechselwirkungsbild** (*Dirac-Bild*) über, das wir schon in Kapitel 2 benutzt haben. Zustände entwickeln sich gemäß

$$|\psi(t)\rangle^D = U^D(t) |\psi\rangle$$

in der Zeit, und Operatoren wie ϕ und π gemäß

$$\Phi^D(\vec{x}, t) = U^D(t) \phi(\vec{x}, t) (U^D)^{-1}(t).$$

Die (nicht explizit zeitabhängigen) Operatoren im Wechselwirkungsbild erfüllen die *freien* Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} \phi^D &= [\phi^D, H_0] \\ i \frac{d}{dt} \pi^D &= [\pi^D, H_0] \end{aligned}$$

deren Lösungen uns schon bekannt sind. Es bleiben die Bewegungsgleichungen des Zeitentwicklungsoperators

$$i \frac{d}{dt} U^D(t) = H_1 U^D(t)$$

mit der formalen Lösung

$$\begin{aligned} U^D(t, t_0) &= \mathbf{T} e^{-i \int_{t_0}^t d\tilde{t} H_1^D(\tilde{t})} \\ &= 1 - i \int_{t_0}^t dt_1 H_1^D(t_1) + \dots \end{aligned}$$

die man in eine Potenzreihe in λ entwickeln kann. (Zuvor hatten wir $t_0 = 0$ gewählt.)

Im allgemeinen möchte man n-Punkt-Greensfunktionen

$$G^{(n)}(x_1, \dots, x_n) = \langle 0 | \mathbf{T} \phi(x_1), \dots, \phi(x_n) | 0 \rangle$$

berechnen, um daraus Streuquerschnitte zu erhalten. Dazu betrachtet man $t_0 \rightarrow -\infty$ und $t \rightarrow \infty$, und nimmt an, daß die einlaufenden und auslaufenden Zustände (Teilchen) zu diesen Zeiten dieselben Matrixelemente wie die freien Teilchen haben. Über das *Wicksche Theorem* kann man die auftretenden Produkte von mehreren zeitgeordneten Operatoren auf eine Linearkombination von Produkten von Zweipunkt-Propagatoren Δ_F dieser Operatoren zurückführen. Auf diese Weise kann man schließlich die n-Punkt Greensfunktionen störungstheoretisch auf Integrale über Zweipunkt-Propagatoren zurückführen. Im Impulsraum erhält man damit die Greensfunktionen

$$(2\pi)^4 \delta^{(4)}(p_1 + p_2 + \dots + p_n) G^{(n)}(p_1, \dots, p_n) = \int \prod_{i=1}^n d^4 x_i e^{-i p_i x_i} G^{(n)}(x_1, \dots, x_n)$$

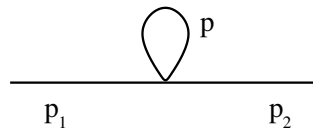
6.4.1 Feynmanregeln

Die auftretenden Integrale in verschiedenen Ordnungen der Störungstheorie kann man mit Hilfe der Feynmanregeln graphisch sehr anschaulich darstellen. Für die ϕ^4 -Theorie lauten sie im Impulsraum:

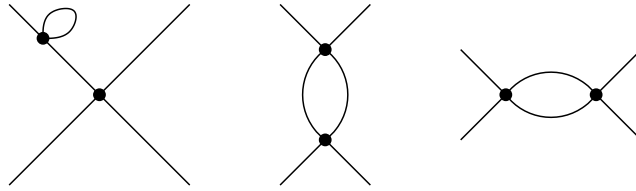
1. Zeichne jeden verbundenen topologisch unterschiedlichen Graphen mit n externen Linien, und summiere im folgenden die Beiträge aller Graphen.
2. Jede externe Linie erhält einen Faktor $i \Delta_F(p_i)$ für den äußeren Impuls p_i .
3. Jede innere Linie erhält einen Faktor $i \Delta_F(p)$.
4. Jeder Vertex erhält einen Faktor $-i\lambda$. An jedem Vertex gilt Impulserhaltung.
5. Integriere über jeden inneren Impuls, der nicht durch die Impulserhaltung an den Vertizes fixiert ist.
6. Der Beitrag jedes Graphen wird durch die Anzahl der möglichen Permutationen innerer Linien (bei festen Vertizes) dividiert..

Beispiele:

1. Die Zweipunktfunktion $G^{(2)}$ ist in nullter Ordnung der Propagator Δ_F . In Ordnung λ^1 kommt ein Vertex mit einer Schleife hinzu, über deren Impuls zu integrieren ist.



2. Die Vierpunktfunktion $G^{(4)}$ ist in nullter Ordnung Null. In erster Ordnung ist sie einfach ein Vertex mit 4 äußeren Beinen. In zweiter Ordnung der Störungstheorie kommen Beiträge wie die hier skizzierten dazu.



Die Feynmanregeln lassen sich auch systematisch im Rahmen der Pfadintegralformulierung aus dem erzeugenden Funktional $\log Z$ als eine Entwicklung in der Anzahl der inneren *Schleifen* (Loops) herleiten. Dies stellt sich gleichzeitig als eine Entwicklung in Potenzen von \hbar heraus !

6.4.2 Regularisierung

Die in den Feynmangraphen auftretenden Integrale divergieren bei kontinuierlichem Raum für große Impulse (“UV-Divergenz”). Man braucht daher einen *Regularisierungsparameter*, z.B.

- eine maximale Impulsskala Λ (in vielen Varianten), wie z.B. auch
- ein diskretes Raum-Zeit-Gitter (Gittertheorie); oder
- eine Dimension $4 - \epsilon$ (!)

Den Regularisierungsparameter muß man am Ende der Rechnung entfernen.

6.4.3 Renormierung

Zusätzlich braucht man die Renormierung:

- Eine Normierung der Parameter ist, auch ohne Divergenzen, in einer wechselwirkenden Theorie immer nötig.

Beispiel: Man betrachte einen Festkörper. Das “Elektron” (Quasiteilchen!) hat dort eine effektive Masse m^* , verschieden von der Masse m_0 in \mathcal{H} !

Wenn der Parameter m_0 der Theorie nicht auf andere Weise außerhalb des Festkörpers (und damit außerhalb der betrachteten Theorie) meßbar wäre, müßte man ihn (und die anderen Parameter) so setzen, daß die Vorhersage der Theorie mit dem gemessenen m^* (und allen anderen Meßgrößen) übereinstimmt!

- Hier muß man also die “nackten” Parameter der Theorie (bei ϕ^4 : m_0 , λ_0 und die Normierung Z_0 der Wellenfunktion) (in jeder Ordnung der Störungstheorie neu) so renormieren, daß die Theorie die physikalisch gemessenen Werte von Observablen liefert. Dies kann man etwa tun, indem man bei festem Regularisierungsparameter die nackten Parameter als Funktion von geeignet gewählten physikalischen Meßgrößen ausdrückt, die m und λ entsprechen, sowie eine Normierungsbedingung wählt.
- Bei Variation des Regularisierungsparameters muß man entsprechend auch m_0 , λ_0 , Z_0 so variieren, daß diese physikalischen Observablen den korrekten Wert behalten. Im Limes $\Lambda \rightarrow \infty$ können dabei auch m_0 , λ_0 , Z_0 divergieren (und das tun sie in vier Dimensionen in der Regel auch!).
- Die Theorie heißt renormierbar, falls es möglich ist, bei Variation von Λ nur endlich viele Parameter zu adjustieren, in beliebiger Ordnung der Störungstheorie. Die Renormierbarkeit hängt von der Dimension des Systems und von der Dimension der Kopplungskonstanten ab.
- Die ϕ^4 -Theorie ist in $D \leq 4$ Dimensionen renormierbar, (bei $D < 4$ “superrenormierbar”), nicht aber bei $D > 4$, da dann der Divergenzgrad der Feynmandiagramme mit der Ordnung der Störungstheorie zunimmt.

6.4.4 Trivialität

Es kann allerdings geschehen, daß die Theorie nur bei verschwindender Wechselwirkung $\lambda = 0$ renormierbar ist, de facto also “trivial” ist. Es hat sich in den letzten Jahren mit Hilfe einer Kombination von störungstheoretischen und nichtstörungstheoretischen Rechnungen (Gittereichtheorie) herausgestellt, daß dies bei einer Reihe von wichtigen Theorien tatsächlich so ist (!):

- Bei der ϕ^4 -Theorie (also gerade beim Schulbeispiel der Lehrbücher!) aufgrund einer Singularität, die auch schon in der 1-Loop-Näherung auftritt (“Landau-Singularität”)

- Bei der QED aufgrund einer gleichartigen Singularität, aber erst bei Integration bis zu irrelevant hohen Energieskalen. Dies ist nicht wichtig, weil die QED nur ein Teil der vereinheitlichten elektroschwachen Wechselwirkung ist. Allerdings kann dasselbe Problem auch dort auftreten.
- Bei der elektroschwachen Wechselwirkung (Glashow-Salam-Weinberg-Theorie), wenn die Masse des dort postulierten Higgs-Teilchens über etwa 1 TeV liegt. Daher muß bis etwa 1 TeV entweder dieses Teilchen gefunden werden, oder die elektroschwache Theorie muß zusammenbrechen, d.h. experimentelle Hinweise auf eine umfassendere Theorie müssen sichtbar werden.
- Nicht betroffen ist die QCD, die Theorie der starken Wechselwirkung. Sie zeigt das Phänomen der “asymptotischen Freiheit”: bei großen Impulsen wird hier die (geeignet definierte) effektive Wechselwirkung immer kleiner, d.h. die Quarks werden bei hohen Energien zu nahezu freien Teilchen, und obige Landau-Singularität tritt nicht auf.

6.5 Quantisierung des freien Dirac-Feldes

Felder: Wir behandeln nun ψ_α und $\bar{\psi}_\alpha$ als unabhängige Felder.

Als **Lagrangedichte** für das Dirac-Feld kann man z.B. wählen

$$\mathcal{L} = \bar{\psi}(x) (i\vec{\partial} - m) \psi(x) \quad (\text{oder alternativ z.B. } \mathcal{L} = -\frac{i}{2} \bar{\psi} (\overleftarrow{\partial} - \overrightarrow{\partial} - m) \psi)$$

Die Alternativen unterscheiden sich durch totale Ableitungen.

Es gilt $\mathcal{L} = 0$ für Lösungen ψ oder $\bar{\psi}$ der DG.

Konjugierte Impulse:

$$\pi_\alpha = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}_\alpha} = i \psi_\alpha^\dagger \quad , \quad \bar{\pi}_\alpha = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\bar{\psi}}_\alpha} = 0 \quad (!)$$

Der konjugierte Impuls $\bar{\pi}_\alpha$ verschwindet also ! Man kann deswegen bei der 2. Quantisierung *nicht* den Kommutator $[\bar{\psi}_\alpha(x), \bar{\pi}_\alpha(x')]$ gleich $\delta(x - x')$ setzen, da dieser Ausdruck identisch verschwindet.

Hamilton-Dichte:

$$\mathcal{H} = \sum_\alpha \pi_\alpha \dot{\psi}_\alpha - \mathcal{L} = \bar{\psi} (-i \gamma^j \partial_j + m) \psi$$

Für Lösungen der DG ist die Hamiltondichte also $\mathcal{H} = \bar{\psi} (i \gamma^0 \partial_0) \psi$.

2. Quantisierung: Wir führen zunächst eine Impulsraumdarstellung ein (analog zum komplexen Klein-Gordon-Feld).¹

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \int \frac{d^3k}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sqrt{\frac{m}{\omega_k}} \sum_{r=1,2} (b_r(k) u_r(k) e^{-ikx} + d_r^\dagger(k) v_r(k) e^{ikx}) \\ &= \psi^+(x) + \psi^-(x) \quad , \end{aligned}$$

wobei u und v die Lösungen der freien Dirac-Gleichung aus Kapitel 5.7.2 sind. Dieses Feld ist wieder so konstruiert, daß es positive Energie hat. b und d sind zunächst

¹Im Buch von Schwabl wird hier eine Umdefinition der v_α vorgenommen

Koeffizienten, später werden sie Erzeuger/Vernichter. Die zweite Zeile gibt wieder eine Zerlegung in Anteile positiver und negativer Frequenz an, die für die Definition von Propagatoren benötigt werden. Die entsprechende Gleichung für $\bar{\psi}$ lautet

$$\bar{\psi}(x) = \int \frac{d^3k}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sqrt{\frac{m}{\omega_{\vec{k}}}} \sum_{r=1,2} (b_r^\dagger(k) \bar{u}_r(k) e^{+ikx} + d_r(k) \bar{v}_r(k) e^{-ikx})$$

mit weiteren Koeffizienten $b_r^\dagger(k)$ und $d_r(k)$.

In dieser Darstellung erhält man für die Hamiltonfunktion $H = \int d^3x \mathcal{H}$

$$H = \int d^3k \omega_{\vec{k}} \sum_r (b_r^\dagger(k) b_r(k) - d_r(k) d_r^\dagger(k))$$

- Wenn b, d jeweils *bosonische* Vertauschungsrelationen hätten, dann wäre die Energie nicht nach unten beschränkt.
- Lösung: fermionische Vertauschungsrelationen:

$$\boxed{\{\psi_\alpha(\vec{x}, t), \pi_{\alpha'}(\vec{x}', t)\} = \delta_{\alpha\alpha'} \delta^3(\vec{x} - \vec{x}')} \Leftrightarrow \boxed{\begin{aligned} \{b_r(k), b_{r'}^\dagger(k')\} &= \delta_{rr'} \delta^3(\vec{k} - \vec{k}') \\ \{d_r(k), d_{r'}^\dagger(k')\} &= \delta_{rr'} \delta^3(\vec{k} - \vec{k}') \end{aligned}}$$

- Dann gilt für der 2. Term in H :

$$-d_r(k) d_r^\dagger(k) = d_r^\dagger(k) d_r(k) - \delta_{rr'} \delta^3(\vec{k} - \vec{k}')$$

und die Hamiltonfunktion (Operator) wird positiv, mit zwei Teilchenzahloperatoren (s.u.).

- Bei Einführung von *Normalordnung* verschwindet zusätzlich der konstante Anteil der Hamiltondichte.

Strom und Ladung: \mathcal{L} ist invariant unter der globalen Phasentransformation

$$\psi_\alpha \mapsto e^{i\varphi} \psi_\alpha, \quad \bar{\psi}_\alpha \mapsto e^{-i\varphi} \bar{\psi}_\alpha$$

Mit dem Noetherschen Theorem ergibt sich ein erhaltener Strom

$$\partial_\mu j^\mu = 0, \quad j^\mu = : \bar{\psi} \gamma^\mu \psi :$$

und daraus die erhaltene Ladung

$$Q = \int d^3x j^0 = \int d^3x : \psi^\dagger \psi : = \int d^3k \sum_r (b_r^\dagger(k) b_r(k) - d_r^\dagger(k) d_r(k))$$

Nach Ankopplung an das elektromagnetische Feld (s.u.) werden sich diese Größen (mal q) als elektrischer Strom und elektrische Ladung herausstellen.

Interpretation:

$b_{1,2}^\dagger(k)$ erzeugt ein Teilchen der Ladung q mit Spin \uparrow, \downarrow

$d_{1,2}^\dagger(k)$ erzeugt ein Antiteilchen der Ladung $-q$ mit Spin \downarrow, \uparrow

Beide per Konstruktion mit positiver Energie, und beide mit Impuls $+k^\mu$

Propagator: Den Feynman-Propagator des Dirac-Feldes definiert man völlig analog zum Fall des Klein-Gordon-Feldes, (wobei bei Vertauschung der Argumente des Zeitordnungsoperators für Fermionen ein Minuszeichen auftaucht).

$$\begin{aligned} S_F(x) &= -i \langle 0 | \mathbf{T} \bar{\psi}(x) \psi(0) | 0 \rangle \\ &= \dots = (i\cancel{\partial} + m) \Delta_F(x) \\ &= \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} e^{-ipx} \frac{\cancel{p} + m}{p^2 - m^2 + i0^+} \end{aligned}$$

Er beschreibt sowohl die Propagation eines Teilchens als auch eines Antiteilchens.

6.6 Quantisierung des Strahlungsfeldes

Die Quantisierung des Strahlungsfeldes ist, u.a. wegen der Eichinvarianz, recht kompliziert. Wir geben hier eine sehr gestraffte Darstellung.

Eichung: Wir wählen die Coulomb-Eichung $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ (nicht lorentzinvariant!) In dieser Eichung sind die letztlich resultierenden physikalischen Freiheitsgrade, nämlich die beiden transversalen Photonen, direkt sichtbar.

Alternativ kann man mit der Gupta-Bleuler-Methode (siehe z.B. Schwabl, Anhang E) auch kovariant in der *Lorentz-Eichung* $\partial_\mu A^\mu = 0$ arbeiten. Die Eichung muß dann als Bedingung an die Matrixelemente physikalischer Zustände gestellt werden, nicht direkt an die Operatoren des elektromagnetischen Feldes. Die zunächst zusätzlich aufgetretenen skalaren und ein longitudinalen Photonen tragen dann nur noch zur Coulomb-Wechselwirkung bei.

Lagrangedichte: Eine mögliche Lagrangedichte für die klassische Maxwelltheorie ist

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} - j_{\mu}A^{\mu}$$

Daraus folgen als Euler-Lagrange-Gleichungen die inhomogenen Maxwellgleichungen

$$\partial_{\mu}F^{\mu\nu} = j^{\nu}$$

mit $(j^{\nu}) = (\rho, \vec{j})$ und der Teilchenstromdichte \vec{j} .

Kanonischer Impuls: Der zu A_{μ} kanonisch konjugierte Impuls ist

$$\Pi^{\mu} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{A}_{\mu}} = -F^{\mu 0}$$

Daraus folgt, daß $\Pi^i = E^i$, aber der zu A_0 konjugierte Impuls verschwindet: $\Pi^0 = 0!$

N.B.: Zur Lorentz-Eichung gehört die Lagrangedichte

$$\mathcal{L}_L = -\frac{1}{2}(\partial_{\nu}A_{\mu})(\partial^{\nu}A^{\mu}) - j_{\mu}A^{\mu},$$

die sich von obigem \mathcal{L} um eine totale Ableitung und um $-\frac{1}{2}(\partial_{\lambda}A^{\lambda})^2$ unterscheidet. Die Bewegungsgleichung lautet jetzt $\square A^{\mu} = j^{\mu}$, was in der Lorentz-Eichung mit den Maxwellgleichungen identisch ist. Der kanonische Impuls ist $\Pi_L^{\mu} = -\dot{A}^{\mu}$ und verschwindet nicht. Dadurch treten aber in der 2. Quantisierung zunächst zu viele Freiheitsgrade auf.

Freies Feld in Coulomb-Eichung: Wir behandeln das freie elektromagnetische Feld in Coulomb-Eichung. Mit $\nabla\vec{A} = 0$ und $j^{\mu} = 0$ folgt $\Delta A^0 = 0$, dessen im Unendlichen verschwindende Lösung $A^0 = 0$ ist. Es gibt daher in Coulomb-Eichung kein "skalares Photon" A^0 . Mit den Euler-Lagrange-Gleichungen folgt

$$A^0 = 0, \vec{E} = -\dot{\vec{A}} \Rightarrow \Delta A^{\mu} = 0$$

Aus der Lagrangedichte wird

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} = \frac{1}{2}(\vec{E}^2 - \vec{B}^2)$$

und daraus folgt die Hamilton-Dichte

$$\mathcal{H} = \Pi^j \dot{A}_j - \mathcal{L} = \frac{1}{2}(E^2 + B^2)$$

(Dies kann man auch als Summe von harmonischen Oszillatoren darstellen, ähnlich zur Klein-Gordon-Gleichung, und auf diese Weise die 2. Quantisierung einführen.)

Impulsraumdarstellung: Wir gehen statt dessen wie in den früheren Kapiteln vor und führen zunächst eine Impulsraumdarstellung so ein, daß $A^0 = 0$ und $\square A^j = \vec{\nabla} \vec{A} = 0$ automatisch gilt:

$$A^\mu(x) = \int \frac{d^3k}{\sqrt{(2\pi)^3} 2\omega_{\vec{k}}} \sum_{\lambda=1}^2 \left(\epsilon_{\vec{k},\lambda}^\mu a_{k\lambda} e^{-ikx} + \epsilon_{\vec{k},\lambda}^\mu a_{k\lambda}^\dagger e^{ikx} \right)$$

mit $\omega_{\vec{k}} = |\vec{k}|$ und mit den beiden Polarisationsvektoren $\epsilon_{\vec{k}}$, für die gilt

$$\underbrace{\vec{k} \vec{\epsilon}_{\vec{k}\lambda}}_{\text{transversal}} = 0 \quad , \quad \epsilon_{\vec{k}\lambda} \epsilon_{\vec{k}\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'}$$

Die Polarisationsvektoren müssen wegen $\vec{\nabla} \vec{A} = 0$ senkrecht auf der Ausbreitungsrichtung stehen und sind orthonormal. In der Coulomb-Eichung gibt es daher nur *zwei* Polarisationsrichtungen. Aus den 4 Freiheitsgraden von A^μ sind also durch die Eichung und die Bewegungsgleichungen (aus denen auch die Masselosigkeit des Photons folgt) lediglich zwei physikalische Freiheitsgrade verblieben.

Im Impulsraum lautet die Hamiltondichte jetzt

$$H = \int d^3k \sum_{\lambda} \frac{\omega_{\vec{k}}}{2} (a_{\vec{k}\lambda}^\dagger a_{\vec{k}\lambda} + a_{\vec{k}\lambda} a_{\vec{k}\lambda}^\dagger)$$

2. Quantisierung: Man könnte versucht sein, kanonische Vertauschungsrelationen für das elektrische und das magnetische Feld einzuführen. Dies ist inkorrekt, unter anderem weil das magnetische Feld \vec{B} *nichtlokale* Auswirkungen hat: Beim Aharonov-Bohm Effekt wird das Elektron vom einem Magnetfeld beeinflusst, das am Ort des Elektrons Null ist ! Dagegen ist die Wechselwirkung mit dem Feld A^μ , über die man den Aharonov-Bohm-Effekt berechnet, völlig lokal (s.a. Pfadintegrale).

Wir führen daher gleichzeitige Vertauschungsrelationen für das Eichfeld A^μ ein. Aus dem Planckschen Strahlungsgesetz wissen wir, daß Photonen Bosonen sind. Die entsprechend zu postulierenden Vertauschungsrelationen lauten

$$\boxed{[a_{k\lambda}, a_{k'\lambda'}^\dagger] = \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\vec{k} - \vec{k}')} \quad (1)$$

(Bei Lorentz-Eichung ergeben sich zusätzliche Komplikationen mit den Polarisationen).

Der Hamiltonian wird nunmehr zu

$$H = \int d^3k \sum_{\lambda} \omega_{\vec{k}} \left(a_{k\lambda}^\dagger a_{k\lambda} + \underbrace{\frac{1}{2}} \right)$$

entfällt nach Normalordnung

Als Impulsoperator ergibt sich mit Normalordnung

$$\vec{P} = : \int d^3x \vec{E} \times \vec{B} : = \int d^3k \sum_{\lambda} \vec{k} \underbrace{a_{\vec{k}\lambda}^{\dagger} a_{\vec{k}\lambda}}_{\hat{n}_{\vec{k}\lambda}}$$

Vertauschungsrelationen im Ortsraum: Wir berechnen $[A^i, \pi^j] \equiv [A^i, E^j] = -[A^i, \dot{A}^j]$ durch Einsetzen.

Wir benutzen, daß die Vektoren $\frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}$, $\vec{e}_{k,1}$, $\vec{e}_{k,2}$ ein orthonormales Dreibein bilden. Deswegen gilt die Vollständigkeitsrelation (analog $\sum_{\rho} \langle i|\rho\rangle \langle \rho|j\rangle = \delta_{ij}$)

$$\Rightarrow \frac{k^i}{|\vec{k}|} \frac{k^j}{|\vec{k}|} + \sum_{\lambda} \epsilon_{\vec{k}\lambda}^i \epsilon_{\vec{k}\lambda}^j = \delta^{ij} \Rightarrow \boxed{\sum_{\lambda} \epsilon_{\vec{k}\lambda}^i \epsilon_{\vec{k}\lambda}^j = \delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\vec{k}^2}}$$

Es ergibt sich:

$$[A^i(\vec{x}, t), E^j(\vec{y}, t)] = i \underbrace{\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}(\vec{x}-\vec{y})}}_{\text{dies wäre } \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{y})} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\vec{k}^2} \right)$$

d. h. zusätzlich zur bisherigen kanonischen Quantisierung taucht der Projektor $(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\vec{k}^2})$ auf transversale Zustände auf.

Tieferer Grund ist die Eichfreiheit in der ED.

Elektromagnetische Felder als kohärente Zustände: Die Operatoren des transversalen elektrischen Felds und des Magnetfelds ergeben sich als Linearkombinationen von Erzeugern und Vernichtern

$$\vec{E}_{\perp} = \sum \dots (a_{\vec{k}} - a_{\vec{k}}^{\dagger}) \quad , \quad \vec{B} = \sum \dots (a_{\vec{k}} + a_{\vec{k}}^{\dagger})$$

Sie vertauschen nicht, sondern sehen formal ähnlich aus wie Orts- und Impulsoperatoren des harmonischen Oszillators.

Man kann zeigen, daß die **Eigenzustände von \vec{E}_{\perp} und \vec{B} kohärente Zustände** sind, mit unendlicher Unschärfe der Photonenzahl.

Propagator: Den Feynman-Propagator definiert man wieder wie zuvor

$$D_F^{\mu\nu}(x) = -i \langle 0 | \mathbf{T} A^\mu(x) A^\nu(0) | 0 \rangle$$

Bei Coulomb-Eichung und in der Störungstheorie führt dies schließlich zu dem kovarianten Propagator

$$D_F^{\mu\nu}(x) = -g^{\mu\nu} \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \frac{e^{-ikx}}{k^2 + i0^+}$$

Derselbe Propagator ergibt sich auch bei Lorentz-Eichung. Im allgemeinen ist die Form des Propagators von der Eichung abhängig.

6.7 Bemerkungen zur Quantenelektrodynamik

Die Lagrange-Dichte der Quantenelektrodynamik erhält man durch Addition der Lagrangedichten des freien Photons und des Elektrons (Dirac-Feld), mit kovarianter Ableitung D_μ des elektromagnetischen Feldes.

$$\mathcal{L} = \bar{\psi} (i \not{D} - m) \psi - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}$$

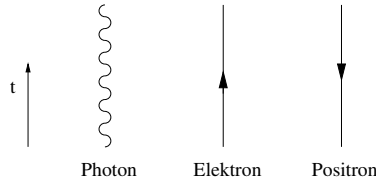
Diese Lagrangedichte (oder eine äquivalente Form) ergibt sich schon als allgemeinsten Ausdruck, der Lorentz-invariant, invariant unter lokalen Eichtransformationen, und zusätzlich höchstens quadratisch in den Feldern A und ψ und ihren Ableitungen ist ! Insbesondere folgt aus der Eichinvarianz, daß das Photon masselos sein muß (weil $m^2 A_\mu A^\mu$ nicht eichinvariant ist), und daß \mathcal{L} die kovariante Ableitung $D_\mu = \partial_\mu + iqA_\mu$ enthalten muß. Durch Einsetzen von D_μ erhält man

$$\mathcal{L} = \bar{\psi} (i \not{\partial} - m) \psi + j^\mu A_\mu - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}$$

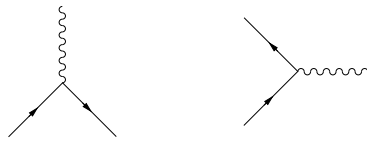
mit $j^\mu = q \bar{\psi} \gamma^\mu \psi$. Aus der lokalen Eichinvarianz folgt also die Kopplung $j_\mu A^\mu$ zwischen dem Materiefeld ψ und dem elektromagnetischen Feld A^μ !

Störungstheorie: Zur Behandlung der QED benutzt man üblicherweise die Störungstheorie. Die relevante Kopplung ist die Feinstrukturkonstante $\alpha = \frac{1}{137, \dots} \sim e^2$. Die

Störungstheorie ergibt sich formal aus dem erzeugenden Funktional $\log Z$ (s.u.). Physikalische Prozesse werden wieder über die *freien* Propagatoren des Materiefeldes und des Eichfeldes ausgedrückt, die man graphisch z.B. so darstellen kann



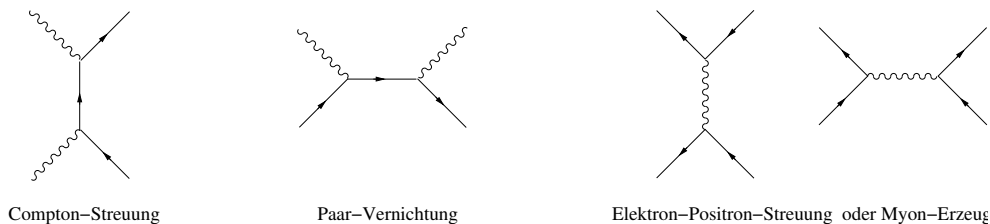
Die Pfeile zeigen hier in die Richtung des Ladungsflusses. Sie sind daher am Wechselwirkungsvertix kontinuierlich. Die Wechselwirkung erscheint graphisch als



mit der Stärke $-iq\gamma^\mu$. Im Impulsraum gilt wieder an jedem Vertix Impulserhaltung. Mit den entstehenden Feynmandiagrammen kann man so z.B. Prozesse wie

- Compton-Streuung $e^- + \gamma \rightarrow e^- + \gamma$,
- Elektron-Positron Paar-Vernichtung $e^+ + e^- \rightarrow \gamma + \gamma$
und entsprechend Paar-Erzeugung,
- Elektron-Positron-Streuung $e^+ + e^- \rightarrow e^+ + e^-$,
- Erzeugung z.B. von Myonen $e^+ + e^- \rightarrow \mu^+ + \mu^-$

beschreiben und berechnen. Im folgenden Bild sind nur einige Beispiele für dazu beitragende Diagramme in niedrigster Ordnung der Störungstheorie wiedergegeben.



Regularisierung und Renormierung: Der Propagator des vollen wechselwirkenden Elektrons ist natürlich nicht gleich dem der freien Dirac-Theorie. Man kann ihn störungstheoretisch als

schreiben, wobei in dem schraffierten Bereich alle Wechselwirkungsprozesse beliebiger Ordnung zu summieren sind, und links die einfachsten beitragenden Diagramme wiedergegeben sind. Man berechnet so die “Selbstenergie” des Elektrons. Ebenso ist der Propagator des wechselwirkenden Photons nicht gleich dem der freien Maxwell-Theorie, sondern als

symbolisierbar, wobei das mittlere Diagramm die “Vakuumpolarisation” beschreibt.

Analog ist auch der wechselwirkende Vertex der vollen Theorie betroffen. Insgesamt erhält man durch Berechnung dieser Diagramme, mit einer Regularisierungsprozedur zur Vermeidung von Divergenzen, und mit Festlegung der Parameter der Theorie anhand physikalischer Prozesse, schließlich die Renormierung von Masse, Ladung, und Wellenfunktion. Es gibt hierzu viele verschiedene Renormierungsverfahren, die leider alle mit einigem Aufwand verbunden sind. In der Störungstheorie läßt sich auch die Renormierbarkeit der QED zeigen, wobei wesentlich die Eichinvarianz eingeht. Siehe auch Kap. 6.4. Mehr dazu in der eigenen Vorlesung über Quantenfeldtheorie (Quantenelektrodynamik).

Nichtstörungstheoretische Methoden: Einen ganz anderen Zugang bieten nichtstörungstheoretische Methoden, wie z.B. die Gittereichtheorie. Während für praktische Rechnungen in der QED die Störungstheorie ausreicht, braucht man

- (1) für einen mathematisch rigorosen Zugang die Gitterregularisierung. wobei die axiomatische Formulierung der QED noch aussteht.
- (2) für stark wechselwirkende Theorien wie die Quantenchromodynamik (QCD) (und auch für die elektroschwache Theorie bei hohen Energien) nichtstörungstheoretische Rechnungen. Zum Beispiel kann das sogenannte “Confinement” der Quarks in der Gittereichtheorie relativ leicht gezeigt werden, während es störungstheoretisch völlig unzugänglich ist.

Kapitel 7

Pfadintegrale und Erzeugende Funktionale

- Der Pfadintegralformalismus bietet eine alternative Quantisierungsmethode. Sie führt von der Kenntnis der klassischen Lagrangefunktion direkt zur 1. und 2. Quantisierung, sowohl relativistisch als auch nichtrelativistisch.
- Entwickelt von Feynman in seiner Doktorarbeit 1942 (nichtrelativistisch) und später. Erste Ideen von Dirac, ähnliche Überlegungen auch von Schwinger.
- Konzeptionell ist dieser Formalismus klarer als die kanonische 2. Quantisierung, auch in Systemen mit Nebenbedingungen (z.B. Eichtheorien). Auch bei nichtabelschen Theorien treten kaum Komplikationen auf, während diese Theorien in kanonischer Quantisierung kaum mehr handhabbar sind.
- Die Wahl unterschiedlicher Basissysteme erlaubt eine Quantisierung sowohl mit klassisch aussehenden Feldern (kohärente Zustände) als auch mit verschiedenen Varianten von Operatoren und Zuständen wie in der kanonischen Quantisierung. Mit kohärenten Zuständen erhält man eine formal eine klassische Zustandssumme wie in der statistischen Mechanik.
- Das Pfadintegral ist Grundlage sowohl der systematischen Störungstheorie über das erzeugende Funktional $Z(J)$ (Zustandssumme), als auch für nichtstörungstheoretische Methoden (Gittereichtheorie).

- Der Formalismus der erzeugenden Funktionale für Greensche Funktionen ist derselbe wie in der klassischen statistischen Physik. Dort übernimmt man zum Studium kritischer Phänomene auch die Renormierungstheorie aus der Quantenfeldtheorie.
- Pfadintegralformulierungen sind auch die Grundlage für Quanten-Monte-Carlo-Rechnungen, sowohl in der nichtrelativistischen als auch der relativistischen Physik.
- *Schwierigkeiten:* Pfadintegrale werden im Limes kontinuierlicher reeller Zeit problematisch, dagegen ist in imaginärer Zeit alles wohldefiniert.

Ergebnisse für physikalische Größen (z.B. Greensfunktionen) kann man, da sie analytische Funktionen sind, mit der sogenannten Wick-Rotation ($it \mapsto t$) auf reelle Zeiten übertragen.

Bei numerischen Resultaten, welche nur endlich viele Daten und noch dazu statistische Fehler aufweisen, ist dies besonders schwierig. Das Ergebnis bei reeller Zeit ist dann extrem unterdeterminiert ist. Hier benutzt man die Bayessche Statistik, um Wahrscheinlichkeitsaussagen zu machen (“Maximum Entropy”-Techniken).

- Wir werden im folgenden Probleme mit Grenzübergängen (insbesondere in der Zeit) ignorieren, und im Zweifelsfalle Raum und Zeit als diskret betrachten (trotz gegenteiliger Notation!)
- Literatur: Die meisten neueren Bücher über Quantenfeldtheorie, zum Beispiel
 - Negele-Orland, *Quantum Many Particle Systems* (nichtrelativistisch)
 - Le Bellac, *Quantum and Statistical Field Theory* (Gemeinsame Darstellung, vom Ising-Modell bis zur QCD !)
 - Ramond, *Field Theory, A Modern Primer* (Reine Pfadintegraldarstellung)
 - Kaku, *Quantum Field Theory* (Mehr zur Teilchenphysik orientiert)
 - Feynman-Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*
 - Roepstorff, *Path Integral Approach to Quantum Physics*

7.1 Feynmansches Einteilchen-Pfadintegral

Postulate: Man kann die Quantisierung über Pfadintegrale *allgemein* mit Hilfe von zwei Postulaten durchführen, die im Wesentlichen das Doppelspaltexperiment beschreiben, welches sich also als Essenz der Quantenmechanik herausstellt.

1. Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Teilchen von a nach b gelangt, ist das Betragsquadrat einer Übergangsamplitude $G(a, b)$:

$$p(a, b) = |G(a, b)|^2$$

2. Die Übergangsamplitude ist durch die Summe über alle Pfade $a \rightarrow b$ des Phasenfaktors $e^{\frac{i}{\hbar}S}$ gegeben, wobei S die klassische Wirkung des Systems ist.

$$G(a, b) = k \sum_{\text{Pfade } a \rightarrow b} e^{\frac{i}{\hbar}S}$$

Die Konstante k folgt aus der Bedingung

$$G(a, c) = \sum_b G(a, b) G(b, c)$$

Mit diesen Postulaten kann man z.B. die **Schrödingergleichung** aus der klassischen Lagrangefunktion $\frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x)$ **herleiten** ! (Siehe Vorlesung *Pfadintegrale*). Hier werden wir der Kürze halber den umgekehrten Weg beschreiten und das Pfadintegral aus der Schrödingergleichung herleiten.

Für ein quantenmechanisches System mit Hamilton-Operator \hat{H} untersuchen wir den Propagator (= Greensche Funktion = Wahrscheinlichkeitsamplitude)

$$G((\vec{x}, 0) \rightarrow (\vec{y}, t)) = \mathbf{T} \langle y | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} | x \rangle$$

- Wir zerlegen das Zeitintervall $[0, t]$ in M Teile, $\Delta t = \frac{t}{M}$, und schieben $M-1$ vollständige Systeme $\mathbb{1} = \sum_{z_i} |z_i\rangle \langle z_i|$ ein, mit $z_0 = x$, $z_M = y$

$$\begin{aligned} G((\vec{x}, 0) \rightarrow (\vec{y}, t)) &= \mathbf{T} \langle y | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t} \dots e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t} | x \rangle \\ &= \int dz_1 \dots dz_{M-1} \langle y | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t} | z_{M-1} \rangle \langle z_{M-1} | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t} | z_{M-2} \rangle \dots \langle z_1 | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t} | x \rangle \end{aligned}$$

- Diesen Ausdruck kann man schon als “Pfadintegral in Operatorform” interpretieren, wobei oft andere Zwischenzustände gewählt werden (s. Kap. 7.2).

- Als Beispiel benutzen wir den nichtrelativistischen Hamiltonoperator

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

- Mit der Baker-Hausdorff-Formel $e^{A+B} = e^A e^B (1 + O([A, B]))$ erhalten wir das Matrixelement

$$\langle z_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t (\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(x))} | z_j \rangle \stackrel{\hat{V} \text{ diag.}}{=} e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t V(z_j)} \langle z_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \frac{\hat{p}^2}{2m}} | z_j \rangle + O((\Delta\tau)^2)$$

Struktur der Rechnung:

$$\langle z | e^{c\hat{p}^2} | z' \rangle = \int dk dk' \langle z | k \rangle \langle k | e^{c\hbar^2 k^2} | k' \rangle \langle k' | z' \rangle$$

(\hat{k} diagonal)

$$= \int dk \frac{1}{2\pi} e^{ik(z-z')} e^{c\hbar^2 k^2}$$

(Quadrat. ergänzen \Rightarrow Gauß-Integral)

$$\sim \exp\left(\frac{1}{4c\hbar^2}(z-z')^2\right)$$

$$\Rightarrow \langle z_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \hat{H}} | z_j \rangle = \sqrt{\frac{-im}{2\pi\hbar\Delta t}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \Delta t \left(\frac{m(z_{j+1}-z_j)^2}{2(\Delta t)^2} - V(z_j)\right)\right]$$

Insgesamt:

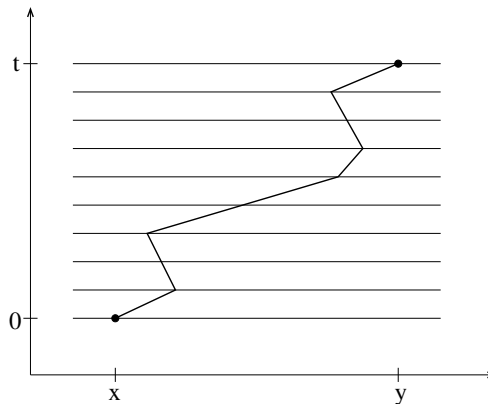
$$G((x, 0) \rightarrow (y, t)) = \left(\frac{-im}{2\pi\hbar\Delta t}\right)^{\frac{M}{2}} \int dz_1 \cdots dz_{M-1} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \Delta t \sum_{j=0}^{M-1} \left(\frac{m(z_{j+1}-z_j)^2}{2(\Delta t)^2} - V(z_j)\right)\right] + O((\Delta\tau)^2)$$

Der Zeitkontinuumslimes ist als Grenzfalle $M \rightarrow \infty$ definiert (und kann mathematische Probleme bereiten). In diesem Grenzfalle benutzt man die folgende symbolische Schreibweise:

Pfadintegral:

$$\begin{aligned}
 G((x, 0) \rightarrow (y, t)) &= \int \mathcal{D}z \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \underbrace{\left\{ \frac{m}{2} \dot{z}(t')^2 - V(z(t')) \right\}}_{\text{Lagrangefunktion } L} \right] \\
 &= \int \mathcal{D}z \exp \left[\frac{i}{\hbar} S \right] \\
 \text{mit } \mathcal{D}z &:= \lim_{M \rightarrow \infty} \left(\frac{-im}{2\pi\hbar\Delta t} \right)^{\frac{M}{2}} \prod_{j=1}^{M-1} dz_j \\
 &\text{und Nebenbedingung } z(0) = x, \quad z(t) = y.
 \end{aligned}$$

- Dieses Pfadintegral enthält keine Operatoren mehr!
- Interpretation: Der Propagator ergibt sich als *Summe über alle Wege* $x \rightarrow y$, gewichtet mit $\exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right)$.



Im Pfadintegral gibt es also keine eindeutige Trajektorie eines Teilchens; es tragen *alle* Wege bei. Die Interferenz im Doppelspaltexperiment ergibt sich aus der Interferenz der Phasenfaktoren $\exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right)$.

- Im **Grenzfall** $\hbar \rightarrow 0$ dominiert die stationäre Lösung mit $\delta S = 0$, d. h. man erhält die Lösung der Euler-Lagrange-Gleichung, also die **klassische Bewegungsgleichung** für $x \rightarrow y$! Man erhält also die klassische Physik unmittelbar als Grenzfall der Quantenmechanik !
- **Imaginäre Zeit:** Die Konvergenz des Pfadintegrals im Zeitkontinuum kann problematisch sein (im Fall der Einteilchen-Quantenmechanik insbesondere beim Coulomb-Potential, das erst seit einigen Jahren beherrscht wird). Wenn man dagegen zu imaginärer Zeit $\tau = -it$ übergeht, wird aus dem Phasenfaktor ein konvergenzerzeugender

*Dämpfungs*faktor $\exp(-\frac{\tau}{\hbar} S)$. Daher werden die meisten Pfadintegralrechnungen in imaginärer Zeit durchgeführt. Bei einer relativistischen Theorie geht man also vom Minkowski-Raum zum vierdimensionalen *euklidischen Raum* über, mit (s.o.) klassischen Variablen statt Operatoren.

7.2 Vielteilchen-Pfadintegral in Operator-Darstellung

Man kommt zur Vielteilchenphysik, indem man Freiheitsgrade an jedem Ort \vec{x} erlaubt, also ein Feld wie $\phi(\vec{x})$. Aus einer gegebenen klassischen Lagrangefunktion der Felder ϕ erhält man dann eine *Quantenfeldtheorie*, die relativistisch oder nichtrelativistisch sein kann.

Wir gehen hier wieder umgekehrt vor, und beginnen mit einer Operator-Formulierung, für die wir dann ein Pfadintegral herleiten.

Als Beispiel mag ein Heisenberg-Modell dienen, das eine Kette von Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen beschreibt:

$$\hat{H} = \sum_i \hat{S}_i \hat{S}_{i+1} =: \sum_i \hat{H}_i$$

Der Raum in unserem Beispiel ist also diskret.

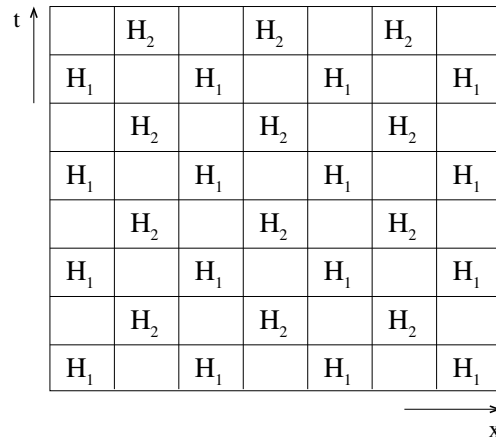
- Genauso wie bei der Einteilchen-Greensfunktion im vorigen Abschnitt zerlegt man zur Bestimmung des Propagators die Zeit t in M Intervalle $\Delta t = \frac{t}{M}$, und wertet Matrixelemente von $e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \hat{H}}$ aus. Wir bleiben zunächst bei endlichem $\Delta \tau$.
- Man wählt geeignete Zwischenzustände; in unserem Beispiel eignen sich S^z -Zustände, die nun an jedem Punkt des diskreten Raum-Zeit-Gitters auftauchen. Wir summieren im Pfadintegral also über die Variablen $S^z(x, t) = \pm \frac{1}{2}$.
- Da der Hamilton-Operator aus nichtvertauschenden Teilen \hat{H}_i besteht, nutzt man meist auch die Trotter-Formel

$$e^{\epsilon(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\epsilon\hat{A}} e^{\epsilon\hat{B}} + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

In unserem Beispiel ist es günstig, die Zerlegung $\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_o$ mit

$$\hat{H}_e = \sum_{i \text{ gerade}} \hat{H}_i, \quad \hat{H}_o = \sum_{i \text{ ungerade}} \hat{H}_i$$

durchzuführen. Die Operatoren innerhalb von \hat{H}_e bzw. \hat{H}_o vertauschen miteinander. Man erhält so die Trotter-Suzuki-Darstellung (meist für die Zustandssumme, siehe Kap. 7.5) mit der geometrischen Struktur eines Schachbrettgitters.



- Im Pfadintegral treten jetzt nur Matrixelemente von einzelnen Operatoren $\Delta\tau \hat{S}_i \hat{S}_{i+1}$ bei den in der Abbildung markierten Plaketten des Raum-Zeit-Gitters auf. Diese Matrixelemente lassen sich leicht berechnen. Das Ergebnis ist eine Summe über die klassischen Variablen $S^z(x, t) = \pm\frac{1}{2}$ mit dem Produkt der Matrixelemente als Gewicht, also formal eine *klassische Zustandssumme*.
- Es hat sich in den letzten Jahren herausgestellt, daß für Systeme mit *diskreter Darstellung*, wie etwa das Heisenberg-Modell mit $S^z = \pm\frac{1}{2}$, der *Zeitkontinuumslimes* unproblematisch durchgeführt werden kann. Dabei resultiert ein Integral über *Verteilungen von Ereignissen* (Wirkungen des Hamiltonoperators), die in der Zeit Poissonverteilt sind, also mit konstanter Wahrscheinlichkeitsdichte in der Zeit auftreten, so wie z.B. radioaktiver Zerfall.
- Vielteilchen-Pfadintegrale der beschriebenen Art sind in regem Gebrauch in der nichtrelativistischen Vielteilchenphysik; s.a. andere Vorlesungen (vdL, HGE).

7.3 Vielteilchen-Pfadintegral im Ortsraum

Den Vielteilchenfall kann man auch völlig analog zum Einteilchen-Fall in Kap. 7.1 behandeln, z.B. für den N-Teilchen Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \sum_i^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{V}(x_i - x_j)$$

Dabei muß man Zwischenzustände aus dem Fockraum einschieben, also total symmetrische bzw. total antisymmetrische Zustände. Man erhält ein Pfadintegral wie in Kap. 7.1, mit einer zusätzlichen Summe über die Teilchen im Exponenten.

Das Vielteilchensystem wird also letztlich wieder mit Hilfe einer klassischen Wirkung S beschrieben, ohne explizite Operatoren.

7.4 Vielteilchen-Pfadintegral mit kohärenten Zuständen

Alternativ kann man vom Vielteilchenformalismus mit Erzeugern und Vernichtern ausgehen (wie schon in Kap. 7.2), nunmehr aber geeignete *kohärente Zwischenzustände* einschieben. Dann erhält man ebenfalls ein Pfadintegral mit klassischen Funktionen.

In diesem Kapitel wird der Formalismus für Bosonen vorgestellt. Bei Fermionen kann man mit Hilfe von antikommutierenden sogenannte “Grassmann-Variablen” denselben Formalismus (modulo einiger Vorzeichen) benutzen (siehe Übungen). Dieser Formalismus beschreibt sowohl relativistische als auch nichtrelativistische Physik, mit unterschiedlichen Lagrangedichten.

- Kohärente Zustände: (s. Übungen zu QM I; jetzt für ein System von N Bosonen)

$$\begin{aligned} |\vec{z}\rangle &:= e^{\vec{z} \cdot \vec{a}^\dagger} |0\rangle, & \vec{z} &: \text{Vektor von } N \text{ komplexen Zahlen} \\ &= \prod_i e^{z_i a_i^\dagger} |0\rangle \end{aligned}$$

Einige Eigenschaften: (siehe QM I-Übungen)

$$a_i |\vec{z}\rangle = z_i |\vec{z}\rangle \quad ; \quad \langle \vec{z} | \vec{z}' \rangle = e^{\vec{z}^* \cdot \vec{z}'}$$

$$\int d^2\vec{z} e^{-\vec{z}^* \cdot \vec{z}} |\vec{z}\rangle \langle \vec{z}| = \sum_{\{n\}} |n\rangle \langle n| = \mathbb{1}$$

$$\Rightarrow \boxed{\text{tr } \hat{O} = \int d^2\vec{z} e^{-\vec{z}^* \cdot \vec{z}} \langle \vec{z}| \hat{O} |\vec{z}\rangle}$$

Für normalgeordnete Operatoren (alle Erzeuger links von allen Vernichtern), also

$$\hat{O}(\vec{a}^\dagger, \vec{a}) = \sum_{n,m} O_{nm} (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} \dots a_1^{m_1} a_2^{m_2} \dots$$

gilt wegen $a_i |\vec{z}\rangle = z_i |\vec{z}\rangle$:

$$\boxed{\langle \vec{z}| \underbrace{O(\vec{a}^\dagger, \vec{a})}_{\text{Operator}} |\vec{z}'\rangle = \underbrace{O(\vec{z}^*, \vec{z}')}_{\text{Zahl!}} e^{\vec{z}^* \cdot \vec{z}'}}$$

Innerhalb von Matrixelementen mit kohärenten Zuständen kann man also den *Operator* $\hat{O}(\vec{a}^\dagger, \vec{a})$, der ein Funktional der Operatoren \vec{a}^\dagger und \vec{a} ist, durch dasselbe Funktional der *Zahlen* \vec{z}^* und \vec{z}' ersetzen !

- Wir betrachten nun einen Propagator, teilen die Zeit t auf und schieben $M-1$ mal $\mathbb{1}$ ein:

$$\begin{aligned} G &:= \langle \vec{z}_{\text{final}} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} | \vec{z}_{\text{initial}} \rangle \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \left[\prod_{j=1}^{M-1} d\vec{z}_{(j)} e^{-\vec{z}_{(j)}^* \cdot \vec{z}_{(j)}} \langle \vec{z}_{(j+1)} | e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \hat{H}} | \vec{z}_{(j)} \rangle \right] \langle \vec{z}_{(1)} | e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \hat{H}} | \vec{z}_{(0)} \rangle \end{aligned}$$

mit $\vec{z}_{(M)} = \vec{z}_{\text{final}}$, $\vec{z}_{(0)} = \vec{z}_{\text{initial}}$.

- Man kann zeigen, daß die Einführung der Normalordnung möglich ist:

$$e^{-\epsilon \hat{O}} =: e^{-\epsilon \hat{O}} : + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

Bei $M \rightarrow \infty$ kann man deswegen zur Normalordnung übergehen, und in den Matrixelementen des Pfadintegrals verschwindet die Operatornatur von \hat{H}

$$\langle \vec{z}_{(j+1)} | e^{-\epsilon \hat{H}(\vec{a}, \vec{a}^\dagger)} | \vec{z}_{(j)} \rangle = e^{-\epsilon \hat{H}(\vec{z}_{(j+1)}^*, \vec{z}_{(j)})} e^{\vec{z}_{(j+1)}^* \cdot \vec{z}_{(j)}} + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

Damit ergibt sich der Pfadintegral-Propagator zu

$$\boxed{G = e^{\vec{z}_f^* \cdot \vec{z}_f} \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{j=1}^{M-1} d^2\vec{z}_{(j)} e^{-\sum_{j=0}^{M-1} \Delta t \left\{ \vec{z}_{(j+1)}^* \frac{(\vec{z}_{(j+1)} - \vec{z}_{(j)})}{\Delta t} + \frac{i}{\hbar} H(\vec{z}_{(j+1)}^*, \vec{z}_{(j)}) \right\}}}$$

Symbolisch schreibt man dies oft wieder als Integral im Zeitkontinuum

$$\begin{aligned}
 G &= e^{\vec{z}_f^* \cdot \vec{z}_i} \int \mathcal{D}\vec{z} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \underbrace{\{ \dot{\vec{z}}^*(t') \vec{z}(t') - H(\vec{z}^*(t'), \vec{z}(t')) \}}_{\text{Lagrangefunktion } L} \right] \\
 &= e^{\vec{z}_f^* \cdot \vec{z}_i} \int \mathcal{D}\vec{z} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S \right]
 \end{aligned}$$

mit $\vec{z}(0) = z_{\text{initial}}$, $\vec{z}(t) = \vec{z}_{\text{final}}$. Die Schreibweise im Zeitkontinuum kann allerdings irreführend sein, da die *Reihenfolge* der Integrationsvariablen $z(t)$ relevant ist. Insbesondere wirken die Argumente $\vec{z}^*(t')$ und $\vec{z}(t')$ des Hamiltonians nicht zur selben Zeit. Zusätzlich sind die Integrationsvariablen \vec{z}_τ *nicht* stetig in τ .

Wir sehen, daß wieder die *Wirkung* S auftaucht.

Der Term $e^{\vec{z}_f^* \cdot \vec{z}_i}$, der von der Normierung von $\langle \vec{z}_f | \vec{z}_i \rangle$ kommt, verschwindet bei der Zustandssumme.

Ausblick: Wenn der Hamiltonoperator in Erzeugern und Vernichtern ein *bilinear* Ausdruck ist, dann wird das obige Integral zu einem *Gaußschen* Integral. Es ist deswegen lösbar und ergibt $\frac{1}{\det(A)}$, wobei A die sehr große Matrix mit Raum- und Zeit-Indizes ist, welche im Exponenten die Variablen $z_i(t)$ verknüpft. Diese Determinante läßt sich bei der Berechnung der Zustandssumme (s.u.) letztlich noch weiter vereinfachen zu einem Integral über eine nur *räumliche* Matrix, in der das Produkt der räumlichen Untermatrizen von A für alle Zeiten τ auftritt.

Für Fermionen kann man über einen Kunstgriff, die Einführung von antivertauschenden sogenannten *Graßmann-Variablen* das Pfadintegral formal gleich konstruieren. Man erhält dann als ‘‘Gaußsches Integral’’ das Ergebnis $\det(A)$, statt $1/\det(A)$! Näheres in den Übungen und in der Vorlesung über Pfadintegrale.

7.5 Zustandssummen und erzeugende Funktionale

Über formale Ableitungen von Zustandssummen und daraus definierter erzeugender Funktionale kann man thermodynamische Größen und alle Greenschen Funktionen in einem einheitlichen Formalismus beschreiben, der sowohl zur Störungstheorie als auch zu nichtstörungstheoretischen Formulierungen wie der Gittereichttheorie führt. Dieser Abschnitt enthält dazu eine kurze Einführung.

7.5.1 Klassische Statistische Physik

Die Zustandssumme eines klassischen Systems mit inverser Temperatur $\beta = \frac{1}{k_b T}$ ist

$$Z = \sum_{\text{Zustände } i} e^{-\beta E_i}$$

Erwartungswerte sind durch Wichtung mit dem Boltzmanngewicht gegeben

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_i A_i e^{-\beta E_i}$$

- Thermodynamische Größen erhält man über Ableitungen von $\log Z$, z.B. die innere Energie

$$U = \langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_i E_i e^{-\beta E_i} = - \frac{\partial}{\partial \beta} \log Z$$

- Erwartungswerte und Korrelationsfunktionen interner Variabler ergeben sich durch Ableitung von erzeugenden Funktionalen, die man durch Verallgemeinerung der Zustandssumme erhält. Wenn das betrachtete System z.B. wie das Ising-Modell klassische Spins S_x als Variable enthält, definiert man

$$Z[h] := \sum_i e^{-\beta E_i + \sum_x h_x S_x}$$

Das erzeugende Funktional $Z[h]$ enthält *externe Felder* h_x , die (wie hier) physikalisch realisierbar, oder auch rein formal sein können.

Dann ist der Erwartungswert des Spins am Platz x

$$\langle S_x \rangle = \left. \frac{\partial}{\partial h_x} \log Z[h] \right|_{\text{alle } h=0}$$

(Hier betrachtet man in der Regel zuerst den thermodynamischen Limes, und läßt erst dann h gegen Null gehen.)

Die (“verbundene”) Spin-Spin Korrelationsfunktion ergibt sich als zweifache Ableitung

$$\langle S_x S_y \rangle - \langle S_x \rangle \langle S_y \rangle = \left. \frac{\partial^2}{\partial h_x \partial h_y} \log Z[h] \right|_{h=0}$$

N.B.: Diese Korrelationsfunktion fällt in der Regel exponentiell wie $\exp(-\frac{|x-y|}{\xi})$ ab, mit der *Korrelationslänge* ξ . Bei einem Phasenübergang divergiert ξ ; es entstehen dann Korrelationen auf allen Längenskalen, so daß das System auf allen (großen) Längenskalen *selbstähnlich* wird und eine fraktale Cluster-Struktur erhält.

Mehr zur klassischen statistischen Physik, zu Phasenübergängen, kritischen Phänomenen und der Renormierungsgruppe findet man in der dazu angebotenen Vorlesung im Wintersemester.

7.5.2 Quantenmechanik

Die Zustandssumme $Z = \text{tr} e^{-\beta \hat{H}}$ kann man mittels der Beziehung $\text{tr} \hat{O} = \int d^2 \vec{z} e^{-\vec{z}^* \cdot \vec{z}} \langle z | \hat{O} | \vec{z} \rangle$ für kohärente Zustände und mit der oben abgeleiteten Formel für den Propagator $G = \langle \vec{z}_{\text{final}} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} | \vec{z}_{\text{initial}} \rangle$ als ein Pfadintegral in der imaginären Zeit $\tau = -it$ schreiben. Wegen $\dot{z}(t) = \frac{d}{dt} z(t) = -i \frac{d}{d\tau} z(\tau)$ ändert dabei der Zeitableitungsterm im Exponenten sein Vorzeichen.

$$\begin{aligned} Z &= \text{tr} e^{-\beta \hat{H}} \\ &= \int \mathcal{D} \vec{z} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta \hbar} d\tau \left\{ \hbar \vec{z}^*(\tau) \dot{\vec{z}}(\tau) + H(\vec{z}^*(\tau), \vec{z}(\tau)) \right\} \right] \end{aligned}$$

Alle physikalischen Observablen sind nun als thermodynamische Ableitungen von $\log Z$ oder als Korrelationsfunktionen (Greensche Funktionen) über die Ableitung des erzeugenden Funktionals $\log Z[\eta^*, \eta]$ zugänglich, mit

$$Z[\eta^*, \eta] = \text{tr} e^{-\beta \hat{H} + \vec{\eta}^* \cdot \vec{z} + \vec{z}^* \cdot \vec{\eta}}$$

wobei nun $\vec{\eta}^*, \vec{\eta}$ fiktive Felder sind, nach denen formal abgeleitet werden kann.

Das Pfadintegral ist per Konstruktion *zeitgeordnet*. Man erhält auf diese Art also die zeitgeordneten Greenschen Funktionen in imaginärer Zeit. Mittels analytischer Fortsetzung (Wick-Rotation) kann man wieder zu reeller Zeit gelangen.

In der *Störungstheorie* gruppiert man die Terme im Exponenten, die nur linear oder quadratisch in den Feldern sind, als Gaussche Integrale, welche die freien Propagatoren ergeben.

Man entwickelt $\log Z[\eta^*, \eta]$ entweder in Potenzen auftretender Kopplungen oder in Potenzen von \hbar . Letzteres führt auf eine Entwicklung in der Ordnung von Schleifen (Loops) in Feynman-Graphen.

Das “Connected Cluster Theorem” (oder “Linked Cluster Theorem”) besagt, daß $\log Z[\eta^*, \eta]$ die Summe aller *verbundenen* Feynman-Graphen ist. Bei der Entwicklung von $\log Z$ treten also (im Unterschied zur Entwicklung von Z selbst) nur diese verbundenen Graphen auf.

7.5.3 Gittereichtheorien

Hier werden als Regularisierung Raum und Zeit diskret gewählt, mit einem Gitterabstand a . Daher sind alle Integrale wohldefiniert. Die Zustandssumme wird wieder als Integral über kohärente Zustände ausgedrückt. Man wählt die Lagrangedichte so, daß bei $a \rightarrow 0$ in einer formalen Potenzreihenentwicklung die korrekte Kontinuums-Lagrangedichte resultiert.

Dies führt dazu, daß Materiefelder an den Gitterpunkten des Raum-Zeit-Gitters sitzen, Eichfelder dagegen als

$$U(x, \mu) = e^{-iaqA_\mu(x)}$$

auf den *Gitterkanten* (x, μ) . In der QED ist $A_\mu(x)$ reell, daher U eine komplexe Zahl, also ein Element der Gruppe $U(1)$. Man erhält eine $U(1)$ -Eichtheorie. Aus $F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}$ wird ein Produkt der Eichfelder U um die elementare Plakette $\mu\nu$ des Gitters. Die kovariante Ableitung $\bar{\psi}(x) D_\mu \psi(x)$ wird zu $\bar{\psi}(x) (U(x, \mu) - 1) \psi(x + \mu)$. Dieser Ausdruck ist, wie die gesamte Lagrangedichte, eichinvariant.

Derselbe Formalismus gilt für verschiedene Quantenfeldtheorien. Bei der QCD etwa sind sowohl die Materiefelder als auch die Eichfelder gleichzeitig Elemente der “Farb”-Eichgruppe $SU(3)$.

Eine ernste Schwierigkeit ergibt sich bei masselosen Fermionen: der Propagator auf dem Gitter verhält sich wie $\frac{1}{\sin k_\mu}$ für jede Gitterrichtung μ und hat daher im Impulsraum $k_\mu \in [0, 2\pi)$ *zwei* Pole für jede Gitterrichtung, bei 0 und π , beschreibt also zwei “Teilchen”. Dieses “Fermion-Doubling” muß man mühsam umgehen.

Von eigentlichem Interesse ist das physikalische Verhalten im Kontinuumslimes $a \rightarrow 0$.

Man muß dabei wieder die nackten Kopplungen im Lagrangian so wählen, daß physikalische Größen (z.B. Längen) in physikalischen Einheiten konstant bleiben (Renormierung). Insbesondere bedeutet dies, daß Korrelationslängen in Einheiten von a divergieren müssen. Man erhält Kontinuumsphysik also an einem Phasenübergang des diskreten Systems, und damit eine direkte Verbindung zur statistischen Physik, nunmehr in 4 Dimensionen. Dabei erlaubt die Gitterdarstellung die nichtperturbative Auswertung von Z .