

# **Theoretische Physik VI: Quantenmechanik II**

Dirk H. Rischke

Sommersemester 2012



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Relativistische Wellengleichungen</b>	<b>1</b>
1.1	Die Klein-Gordon-Gleichung . . . . .	2
1.1.1	Heuristische Herleitung . . . . .	2
1.1.2	Lösungen der freien Klein-Gordon-Gleichung . . . . .	4
1.1.3	Die Lagrange-Dichte der Klein-Gordon-Gleichung . . . . .	5
1.1.4	Die Klein-Gordon-Gleichung in externen Feldern . . . . .	6
1.1.5	Stromerhaltung in der Klein-Gordon-Gleichung . . . . .	8
1.1.6	Das Verhalten unter Lorentz-Transformationen . . . . .	9
1.2	Die Dirac-Gleichung . . . . .	9
1.2.1	Heuristische Herleitung . . . . .	9
1.2.2	Kovariante Form der Dirac-Gleichung . . . . .	13
1.2.3	Die Lagrange-Dichte der Dirac-Gleichung . . . . .	16
1.2.4	Stromerhaltung in der Dirac-Gleichung . . . . .	17
1.2.5	Lösungen der freien Dirac-Gleichung I – relativistische Energie- Impuls-Beziehung . . . . .	17
1.2.6	Spin und Helizität . . . . .	19
1.2.7	Lösungen der freien Dirac-Gleichung II – Spinoren zu positiver und negativer Energie . . . . .	23
1.2.8	Diracsche Löchertheorie . . . . .	27
1.2.9	Die Dirac-Gleichung in externen Feldern . . . . .	29
1.2.10	Ladungskonjugation . . . . .	29
1.2.11	Nichtrelativistischer Grenzfall – Pauli-Gleichung . . . . .	32
1.2.12	Die Spin-Bahn-Kopplung . . . . .	34
1.2.13	Gesamtdrehimpuls . . . . .	35
1.2.14	Parität . . . . .	37
1.2.15	Das relativistische Wasserstoffatom I – Vorbemerkungen . . . . .	38
1.2.16	Die generalisierten Kugelflächenfunktionen . . . . .	39
1.2.17	Das relativistische Wasserstoffatom II – Lösung der Radialgleichungen	45
1.3	Die Proca-Gleichung . . . . .	56
<b>2</b>	<b>Symmetrien</b>	<b>57</b>
2.1	Symmetrien in der Quantenmechanik . . . . .	57
2.1.1	Raum-Translationen . . . . .	57
2.1.2	Zeit-Translationen . . . . .	60
2.1.3	Drehungen . . . . .	61
2.2	Einführung in die Gruppentheorie . . . . .	62
2.2.1	Allgemeines über Gruppen . . . . .	62

2.2.2	Darstellung von Gruppen . . . . .	64
2.2.3	Lie-Gruppen . . . . .	67
2.2.4	Einfache und halbeinfache Lie-Gruppen . . . . .	77
2.2.5	Casimir-Operatoren, Multipletts, Schurs Lemma . . . . .	79
2.3	Addition von Drehimpulsen . . . . .	86
2.3.1	Konstruktion von Eigenzuständen zum Gesamtdrehimpuls . . . . .	86
2.3.2	Multipletts zum Gesamtdrehimpuls . . . . .	89
2.3.3	Berechnung der Clebsch-Gordan-Koeffizienten . . . . .	91
2.4	Die Gruppe <b>SU(3)</b> . . . . .	94
2.4.1	Generatoren . . . . .	94
2.4.2	Strukturkonstanten . . . . .	96
2.4.3	Unteralgebren und Untergruppen . . . . .	97
2.4.4	Multipletts . . . . .	99
2.4.5	Konstruktion der Multipletts durch Kopplung von fundamentalen Darstellungen (Ausreduzierung) . . . . .	110
2.5	Unitäre Symmetrien der Starken Wechselwirkung . . . . .	113
2.5.1	<b>U(1)</b> -Symmetrie der Quantenelektrodynamik . . . . .	113
2.5.2	<b>SU(3)</b> -Farbsymmetrie der Quantenchromodynamik . . . . .	115
2.5.3	<b>SU(N<sub>f</sub>)</b> -Flavor-Symmetrie . . . . .	119
2.5.4	Isospin-Symmetrie . . . . .	121
2.5.5	Seltsamkeit und <b>SU(3)</b> -Flavor-Symmetrie . . . . .	124
2.5.6	Charm und <b>SU(4)</b> -Flavor-Symmetrie . . . . .	132
<b>3</b>	<b>Pfadintegrale</b> . . . . .	<b>137</b>
3.1	Dynamik klassischer Teilchen . . . . .	137
3.1.1	Das Hamiltonsche Prinzip . . . . .	137
3.1.2	Das modifizierte Hamiltonsche Prinzip . . . . .	138
3.2	Dynamik quantenmechanischer Teilchen . . . . .	139
3.3	Pfadintegralformulierung im Phasenraum . . . . .	140
3.4	Pfadintegralformulierung im Ortsraum . . . . .	143
3.5	Zusammenhang zwischen Übergangsamplitude und Greens-Funktion . . . . .	144
3.6	Propagator der freien Schrödinger-Gleichung . . . . .	147
3.7	Semiklassische Näherung . . . . .	154
3.8	Propagator für den eindimensionalen harmonischen Oszillator . . . . .	159

# 1 Relativistische Wellengleichungen

17.4.2012

Zum Anfang des 20. Jahrhunderts revolutionierten zwei physikalische Theorien unser Verständnis der Natur auf grundlegende Weise: die **Spezielle Relativitätstheorie** und die **Quantenmechanik**. Letztere wurde allerdings in einer rein **nichtrelativistischen** Form entwickelt (vgl. Vorlesung “Quantenmechanik I”). Schon bald begannen sich daher die Physiker die Frage zu stellen, ob man die Quantenmechanik nicht auch in eine Form bringen kann, die den Anforderungen der Speziellen Relativitätstheorie genügt. Dies führt zu den sog. **Relativistischen Wellengleichungen**.

Ein Beispiel für solche Gleichungen haben wir schon in der Vorlesung “Elektrodynamik” (s. dort Gl. (1.76)) kennengelernt: die **Maxwell-Gleichungen** lassen sich ohne weiteres in **relativistisch kovarianter Form** schreiben,

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = \mu_0 j^\nu, \quad (1.1)$$

wobei  $\partial_\mu = (\partial/\partial(ct), \vec{\nabla})^T$  der 4-Gradient,  $F^{\mu\nu}$  der Feldstärketensor und  $j^\nu = (c\rho, \vec{j})^T$  der 4-Ladungsstrom ist;  $\rho$  ist die Ladungsdichte,  $\vec{j}$  der Ladungsstrom,  $\mu_0$  die Permeabilitätskonstante und  $c$  die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum. “Relativistisch kovariant” bedeutet hier, dass sich beide Seiten von Gl. (1.1) wie 4-Vektoren transformieren.

Drücken wir den Feldstärketensor durch das 4-Potential  $A^\mu = (\varphi/c, \vec{A})^T$  aus (s. Gl. (1.36) der Vorlesung “Elektrodynamik”, wobei  $\varphi$  das skalare Potential und  $\vec{A}$  das Vektorpotential sind),

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu, \quad (1.2)$$

so können wir die Maxwell-Gleichungen über ein **Variationsprinzip**, d.h. mit Hilfe der **Euler-Lagrange-Gleichungen** (vgl. Gl. (1.73) der Vorlesung “Elektrodynamik”),

$$0 = \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}_{\text{ED}}}{\partial(\partial_\mu A_\nu)} - \frac{\partial \mathcal{L}_{\text{ED}}}{\partial A_\nu}, \quad (1.3)$$

aus der **Lagrange-Dichte der Elektrodynamik** (vgl. Gl. (1.70) der Vorlesung “Elektrodynamik”),

$$\mathcal{L}_{\text{ED}} = -\frac{1}{4\mu_0} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - j_\mu A^\mu, \quad (1.4)$$

herleiten.

Die Maxwell-Gleichungen stellen allerdings eine **klassische** und keine quantenmechanische Beschreibung elektromagnetischer Wellen dar. Die **Schrödinger-Gleichung** in der Quantenmechanik dagegen ist eine (nichtrelativistische) Wellengleichung für **quantenmechanische Teilchen**. Wir werden zwei relativistische Verallgemeinerungen diskutieren, die **Klein-Gordon-Gleichung** und die **Dirac-Gleichung**. Beides sind relativistische Wellengleichungen, aber erstere transformiert sich wie ein **Skalar** unter Lorentz-Transformationen, d.h. sie ist **Lorentz-invariant**, während letztere sich wie ein **Spinor** transformiert (das genaue Transformationsgesetz für Spinoren werden wir erst in der

Vorlesung “Quantenfeldtheorie” genauer erläutern). Physikalisch bedeutet dies, dass die Klein-Gordon-Gleichung **skalare Teilchen**, d.h. **Bosonen mit Spin null** beschreibt, während die Dirac-Gleichung für **Fermionen mit Spin 1/2** gilt. Eine **relativistische Beschreibung des Elektrons im Wasserstoffatoms** muss daher auf der Dirac-Gleichung beruhen. Zum Abschluss des Kapitels besprechen wir auch noch eine Wellengleichung für **massive Bosonen mit Spin 1**, die sog. **Proca-Gleichung**. Wie die Maxwell-Gleichungen der Elektrodynamik lassen sich auch all diese relativistischen Wellengleichungen aus entsprechenden Lagrange-Dichten mittels der Euler-Lagrange-Gleichungen herleiten.

## 1.1 Die Klein-Gordon-Gleichung

### 1.1.1 Heuristische Herleitung

Die Schrödinger-Gleichung für wechselwirkungsfreie Teilchen lautet

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \vec{r}) = \hat{H}_0 \psi(t, \vec{r}) , \quad (1.5)$$

wobei der freie Hamilton-Operator

$$\hat{H}_0 \equiv \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad (1.6)$$

ist, mit dem 3-Impuls-Operator

$$\hat{p} = -i\hbar \vec{\nabla} . \quad (1.7)$$

Wir versuchen nun, aus der Schrödinger-Gleichung (1.5) eine Wellengleichung mit **wohl-definiertem Transformationsverhalten unter Lorentz-Transformationen** zu machen. Dazu bemerken wir zunächst, dass der 3-Impuls-Operator auf der rechten Seite in **quadratischer** Form auftritt, wohingegen der Energie-Operator

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (1.8)$$

auf der linken Seite nur in **linear** Form auftaucht.

In der Speziellen Relativitätstheorie werden aber 3-Impuls  $\vec{p}$  und Energie  $E$  zum 4-Impuls zusammengefasst, vgl. Vorlesung “Analytische Mechanik und Spezielle Relativitätstheorie”, Gln. (5.52) und (5.62),

$$p^\mu = \left( \frac{E}{c}, \vec{p} \right)^T , \quad (1.9)$$

der sich wie ein 4-Vektor transformiert. Das 4-Betragsquadrat

$$p^\mu p_\mu = \frac{E^2}{c^2} - \vec{p}^2 = m^2 c^2 , \quad (1.10)$$

vgl. Gl. (5.53) der Vorlesung “Analytische Mechanik und Spezielle Relativitätstheorie”, ist **Lorentz-invariant**. Für die möglichen Werte der relativistischen kinetischen Energie erhalten wir aus Gl. (1.10)

$$E_\pm = \pm E_{\vec{p}} , \quad E_{\vec{p}} \equiv c\sqrt{p^2 + m^2 c^2} , \quad (1.11)$$

die sog. **relativistische Energie-Impuls-Beziehung**, vgl. Gl. (5.63) der Vorlesung “Analytische Mechanik und Spezielle Relativitätstheorie”. Man beachte, dass neben Lösungen mit positiver Energie  $E_+ = E_{\vec{p}} > 0$  auch solche mit negativer Energie  $E_- = -E_{\vec{p}} < 0$  auftreten können. Dies ist nicht nur mathematisch erlaubt, wir werden sehen, dass solche negativen Energie-Lösungen auch eine **physikalische Interpretation** haben: sie deuten auf die Existenz von **Antiteilchen** hin, d.h. Teilchen, die die gleiche Masse wie ihre “gewöhnlichen” Teilchenpartner besitzen, aber sich in allen Ladungsquantenzahlen durch ein Vorzeichen von diesen unterscheiden. Ein Beispiel ist das **Positron**  $e^+$ , das Antiteilchen des Elektrons  $e^-$ . Es besitzt die gleiche Masse wie das Elektron,  $m_{e^+} \equiv m_{e^-} \simeq 511 \text{ keV}/c^2$ , ist aber im Gegensatz zum letzteren **positiv** elektrisch geladen. Wir werden sehen, dass **jede** relativistische Formulierung von quantenmechanischen Wellengleichungen neben Lösungen, die Teilchen entsprechen, stets auch solche hat, die Antiteilchen entsprechen.

Mit Hilfe des Energie-Operators (1.8) und des 3-Impuls-Operator (1.7) definieren wir nun in vollkommener Analogie zum 4-Impuls (1.9) den **4-Impuls-Operator**

$$\hat{p}^\mu \equiv \left( \frac{\hat{E}}{c}, \hat{\vec{p}} \right)^T = \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial(ct)}, -i\hbar \vec{\nabla} \right)^T \equiv i\hbar \partial^\mu, \quad (1.12)$$

wobei wir die Definition der kontravarianten partiellen Ableitung benutzt haben,

$$\begin{aligned} \partial^\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x_\mu} &= \left( \frac{\partial}{\partial x_0}, \frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3} \right)^T \\ &\equiv \left( \frac{\partial}{\partial x^0}, -\frac{\partial}{\partial x^1}, -\frac{\partial}{\partial x^2}, -\frac{\partial}{\partial x^3} \right)^T \equiv \left( \frac{\partial}{\partial(ct)}, -\vec{\nabla} \right)^T, \end{aligned}$$

vgl. Gleichung nach Gl. (5.43) der Vorlesung “Analytische Mechanik und Spezielle Relativitätstheorie”. Die Schrödinger-Gleichung, welche **linear** in  $\hat{E}$ , aber **quadratisch** in  $\hat{\vec{p}}$  ist, **kann** sich also **nicht** in Lorentz-kovarianter Weise transformieren. Dazu müsste sie entweder

- (i) **linear** im 4-Impuls  $\hat{p}^\mu$  sein, d.h. linear in  $\hat{E}$  **und** linear in  $\hat{\vec{p}}$ , oder
- (ii) **quadratisch** im 4-Impuls  $\hat{p}^\mu$  sein, d.h. quadratisch in  $\hat{E}$  **und** quadratisch in  $\hat{\vec{p}}$ .

Wir versuchen zunächst (weil dies einfacher ist), eine Gleichung gemäß Forderung (ii) aufzustellen. Das Quadrat des 4-Impuls-Operators (1.12) ist

$$\hat{p}^\mu \hat{p}_\mu = (i\hbar)^2 \partial^\mu \partial_\mu = -\hbar^2 \square, \quad (1.13)$$

wobei

$$\square \equiv \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \quad (1.14)$$

der **d'Alembert-** oder **Quabla-Operator** ist, vgl. Gl. (5.45) der Vorlesung “Analytische Mechanik und Spezielle Relativitätstheorie”. Wir suchen nun Lösungen der **Eigenwert-Gleichung**

$$\hat{p}^\mu \hat{p}_\mu \phi(X) = m^2 c^2 \phi(X) \quad (1.15)$$

für den Operator (1.13), d.h. die **Eigenfunktionen**  $\phi(X)$  und **Eigenwerte**  $p^\mu p_\mu \equiv m^2 c^2$  zum Operator  $\hat{p}^\mu \hat{p}_\mu$ . Hier haben wir benutzt, dass die Eigenwerte des hermiteschen Operators  $\hat{p}^\mu \hat{p}_\mu$  genau seinen Erwartungswerten  $p^\mu p_\mu \equiv m^2 c^2$  entsprechen. Dies ist analog zur Schrödinger-Gleichung (1.5), wo die Eigenwerte des Hamilton-Operators (1.6) den Erwartungswerten  $\vec{p}^2/(2m)$ , also in diesem Fall den nichtrelativistischen kinetischen Energien entsprechen.

Etwas umgestellt lautet Gl. (1.15)

$$-(\hat{p}^\mu \hat{p}_\mu - m^2 c^2) \phi(X) = (\hbar^2 \square + m^2 c^2) \phi(X) = 0. \quad (1.16)$$

Dies ist die sog. **Klein-Gordon-Gleichung** im wechselwirkungsfreien Fall, oder kurz, die freie Klein-Gordon-Gleichung. Da lediglich Betragsquadrate von 4-Vektoren oder skalare Größen wie  $m$  und  $c$  auftreten, transformiert sie sich wie ein **Lorentz-Skalar**, ist also **Lorentz-invariant** (Voraussetzung ist, dass sich auch  $\phi(X)$  wie ein Lorentz-Skalar transformiert; wir untersuchen das Transformationsverhalten genauer in Abschnitt 1.1.6). Diese Gleichung wurde von Oskar Klein und Walter Gordon als relativistische Verallgemeinerung der Schrödinger-Gleichung aufgestellt. Sie liefert, wie wir im folgenden gleich sehen werden, zwar die korrekte relativistische Energie-Impuls-Beziehung (1.11), aber in Anwendung auf das Elektron im Wasserstoffatom nicht die korrekten Bindungszustände (was wir hier nicht beweisen). Der Grund ist, dass der Spin des Elektrons nicht berücksichtigt wird. Die Klein-Gordon-Gleichung spielt dennoch in der Feldtheorie und der Elementarteilchenphysik eine wichtige Rolle, denn sie beschreibt, aufgrund ihres **Lorentz-skalaren** Charakters, **Teilchen mit Spin null**, also **Bosonen** wie z.B. das Pion, das Kaon etc.

19.4.2011

### 1.1.2 Lösungen der freien Klein-Gordon-Gleichung

Es ist nicht schwer, die Lösungen der freien Klein-Gordon-Gleichung (1.16) zu finden. Wir machen den Ebene-Wellen-Ansatz

$$\phi(X) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} p^\mu x_\mu\right) = \exp\left[\frac{i}{\hbar} (p^0 x^0 - \vec{p} \cdot \vec{r})\right] = \exp\left[\frac{i}{\hbar} (E t - \vec{p} \cdot \vec{r})\right], \quad (1.17)$$

wobei wir  $p^0 = E/c$  und  $x^0 = c t$  benutzt haben. Eingesetzt in die Klein-Gordon-Gleichung (1.16) ergibt sich

$$(-\hat{p}^\mu \hat{p}_\mu + m^2 c^2) \phi(X) = (\hbar^2 \square + m^2 c^2) \phi(X) = (-p^\mu p_\mu + m^2 c^2) \phi(X) = 0, \quad (1.18)$$

was durch

$$p^\mu p_\mu = p_0^2 - \vec{p}^2 = m^2 c^2 \quad (1.19)$$

gelöst wird. Offenbar ist  $p^\mu p_\mu$  gerade der Eigenwert des Betragsquadrats  $\hat{p}^\mu \hat{p}_\mu$  des Impuls-Operators und die ebene Welle (1.17) die dazugehörige Eigenfunktion. Für die Energie  $E = c p^0$  ergeben sich die beiden Lösungen

$$E_\pm = c p_\pm^0 = \pm c \sqrt{\vec{p}^2 + m^2 c^2} = \pm \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} \equiv \pm E_{\vec{p}}. \quad (1.20)$$



Dies ist gerade die relativistische Energie-Impuls-Beziehung (1.11). Da die Klein-Gordon-Gleichung eine lineare (partielle) Differentialgleichung (zweiter Ordnung) ist, und zu gegebenem 3-Impuls  $\vec{p}$  zwei Lösungen mit im Vorzeichen unterschiedlicher Energie  $E_{\pm}$  existieren, ist die allgemeine Lösung der Klein-Gordon-Gleichung zu **gegebenem 3-Impuls**  $\vec{p}$  die Überlagerung zweier ebener Wellen,

$$\phi_{\vec{p}}(X) = a_+ \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (E_{\vec{p}} t - \vec{p} \cdot \vec{r}) \right] + a_- \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (E_{\vec{p}} t + \vec{p} \cdot \vec{r}) \right] . \quad (1.21)$$

Die allgemeine Lösung der freien Klein-Gordon-Gleichung (1.16) ist dann eine Superposition von ebenen Wellen zu **verschiedenen** Werten des 3-Impulses,

$$\phi(X) = \int \frac{d^3\vec{p}}{2(2\pi\hbar)^3 E_{\vec{p}}} \left\{ a_+(\vec{p}) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (E_{\vec{p}} t - \vec{p} \cdot \vec{r}) \right] + a_-(\vec{p}) \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (E_{\vec{p}} t + \vec{p} \cdot \vec{r}) \right] \right\} , \quad (1.22)$$

wobei die (i.a. komplexwertigen) Amplituden  $a_{\pm}(\vec{p})$  vom 3-Impuls abhängen. Der Faktor  $1/[2(2\pi\hbar)^3 E_{\vec{p}}]$  unter dem Integral ist reine Konvention, man hätte ihn auch in den Amplituden absorbieren können. Für **reellwertige** Lösungen  $\phi(X) = \phi^*(X)$  erhalten wir eine Gleichung, die  $a_+(\vec{p})$  mit  $a_-(\vec{p})$  in Beziehung setzt. Wir berechnen

$$\begin{aligned} \phi^*(X) &= \int \frac{d^3\vec{p}}{2(2\pi\hbar)^3 E_{\vec{p}}} \left\{ a_+^*(\vec{p}) \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (E_{\vec{p}} t - \vec{p} \cdot \vec{r}) \right] + a_-^*(\vec{p}) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (E_{\vec{p}} t + \vec{p} \cdot \vec{r}) \right] \right\} \\ &= \int \frac{d^3\vec{p}}{2(2\pi\hbar)^3 E_{\vec{p}}} \left\{ a_+^*(-\vec{p}) \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (E_{\vec{p}} t + \vec{p} \cdot \vec{r}) \right] \right. \\ &\quad \left. + a_-^*(-\vec{p}) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (E_{\vec{p}} t - \vec{p} \cdot \vec{r}) \right] \right\} , \end{aligned} \quad (1.23)$$

wobei wir im letzten Schritt die Substitution  $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$  vorgenommen haben (unter der  $E_{\vec{p}}$  invariant bleibt). Da dies nach Voraussetzung identisch mit  $\phi(X)$  sein soll und andererseits die ebenen Wellen (1.17) ein orthogonales Funktionensystem darstellen, müssen die Koeffizienten der ebenen Wellen in Gl. (1.22) und (1.23) identisch sein. Dies führt auf die Bedingungen

$$a_+(\vec{p}) = a_-^*(-\vec{p}) , \quad a_-(\vec{p}) = a_+^*(-\vec{p}) . \quad (1.24)$$

Die Amplituden für reellwertige Lösungen der Klein-Gordon-Gleichung sind also nicht unabhängig voneinander. Es genügt, beispielsweise nur  $a_+(\vec{p}) \equiv a(\vec{p})$  zu betrachten und die allgemeine (reellwertige) Lösung (1.22) lautet

$$\phi(X) = \int \frac{d^3\vec{p}}{2(2\pi\hbar)^3 E_{\vec{p}}} \left\{ a(\vec{p}) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (E_{\vec{p}} t - \vec{p} \cdot \vec{r}) \right] + a^*(-\vec{p}) \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (E_{\vec{p}} t + \vec{p} \cdot \vec{r}) \right] \right\} . \quad (1.25)$$

### 1.1.3 Die Lagrange-Dichte der Klein-Gordon-Gleichung

Wie im Fall der Maxwell-Gleichungen der Elektrodynamik existiert auch für die Klein-Gordon-Gleichung eine Lagrange-Dichte  $\mathcal{L}_{\text{KG}}$ , aus der man die Klein-Gordon-Gleichung

(1.16) über die Euler-Lagrange-Gleichung

$$0 = \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}_{KG}}{\partial(\partial_\mu \phi)} - \frac{\partial \mathcal{L}_{KG}}{\partial \phi} \quad (1.26)$$

herleiten kann. Diese lautet

$$\mathcal{L}_{KG} = \frac{(\hbar c)^2}{2} \left( \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \phi^2 \right). \quad (1.27)$$

Der Faktor  $(\hbar c)^2/2$  ist dabei wieder reine Konvention (er sorgt dafür, dass die Lagrange-Dichte die korrekte Einheit Energiedichte besitzt). Man überzeugt sich leicht (ggfs. unter Zuhilfenahme der Identität  $\partial_\mu \phi \partial^\mu \phi = g^{\mu\nu} \partial_\mu \phi \partial_\nu \phi$ ), dass

$$\frac{\partial \mathcal{L}_{KG}}{\partial(\partial_\mu \phi)} = (\hbar c)^2 \partial^\mu \phi,$$

sowie dass

$$\frac{\partial \mathcal{L}_{KG}}{\partial \phi} = -m^2 c^4 \phi.$$

Eingesetzt in Gl. (1.26) ergibt sich (nach Division durch  $c^2$ ) die Klein-Gordon-Gleichung (1.16).

### 1.1.4 Die Klein-Gordon-Gleichung in externen Feldern

Um zu erkennen, ob die Klein-Gordon-Gleichung die korrekte relativistische Verallgemeinerung der Schrödinger-Gleichung für das Elektron sein könnte, muss man diese Gleichung unter Einkopplung externer elektromagnetischer Felder lösen und das Energiespektrum berechnen. Bei wasserstoffähnlichen Atomen (ohne zusätzliche äußere elektrische oder magnetische Felder) ist das in Frage kommende elektromagnetische Feld einfach das Coulomb-Potential des Atomkerns (mit Kernladungszahl  $Z$ ),

$$V(r) = -\hbar c \frac{Z\alpha}{r}, \quad (1.28)$$

wobei

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \simeq \frac{1}{137.036} \quad (1.29)$$

die **Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante** ist.

Die Einkopplung elektromagnetischer Felder in die Schrödinger-Gleichung hatten wir bereits in Abschnitt 6.1.1 der Vorlesung "Quantenmechanik I" besprochen. Der Impuls-Operator ist dabei für ein Teilchen der Ladung  $\mathfrak{q}$  durch den **kanonischen Impuls-Operator**

$$\hat{\vec{p}} \longrightarrow \hat{\vec{p}} - \mathfrak{q} \vec{A}(t, \vec{r}) \quad (1.30)$$

zu ersetzen, wobei  $\vec{A}(t, \vec{r})$  das 3-Vektorpotential ist. Die potentielle Energie  $V(t, \vec{r}) \equiv \mathfrak{q}\varphi(t, \vec{r})$  des Teilchens im elektromagnetischen Feld wurde zum freien Hamilton-Operator  $\hat{H}_0$  dazuaddiert, so dass sich letztendlich die Schrödinger-Gleichung in der Form

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \vec{r}) = \left\{ \frac{1}{2m} \left[ \hat{\vec{p}} - \mathfrak{q} \vec{A}(t, \vec{r}) \right]^2 + \mathfrak{q}\varphi(t, \vec{r}) \right\} \psi(t, \vec{r}) \quad (1.31)$$

ergab, vgl. Gl. (6.1) der Vorlesung ‘‘Quantenmechanik I’’. Schreiben wir den Term mit dem skalaren Potential  $\varphi(t, \vec{r})$  auf die linke Seite und ersetzen dort den Energie-Operator (1.8), so lautet Gl. (1.31)

$$c \left[ \frac{\hat{E}}{c} - \frac{\mathbf{q} \varphi(t, \vec{r})}{c} \right] \psi(t, \vec{r}) = \frac{1}{2m} \left[ \hat{\vec{p}} - \mathbf{q} \vec{A}(t, \vec{r}) \right]^2 \psi(t, \vec{r}) . \quad (1.32)$$

Während der 3-Impuls-Operator in Kombination mit dem 3-Vektorpotential erscheint, taucht der Energie-Operator zusammen mit dem skalaren Potential auf. Verwenden wir die Definition des 4-Potentials  $A^\mu(X)$ , so läßt sich offenbar der 4-Impuls-Operator (1.12) auf folgende Weise zum **kanonischen 4-Impuls-Operator** erweitern:

$$\hat{p}^\mu \longrightarrow \hat{p}^\mu - \mathbf{q} A^\mu \equiv \left( \frac{\hat{E} - \mathbf{q} \varphi}{c}, \hat{p} - \mathbf{q} \vec{A} \right)^T . \quad (1.33)$$

Aus der Raum-Zeitdarstellung (1.12) des 4-Impuls-Operators resultiert die gebräuchliche Schreibweise

$$\hat{p}^\mu - \mathbf{q} A^\mu = i\hbar \partial^\mu - \mathbf{q} A^\mu \equiv i\hbar D^\mu , \quad (1.34)$$

wobei

$$D^\mu \equiv \partial^\mu + i \frac{\mathbf{q}}{\hbar} A^\mu \quad (1.35)$$

die sog. **kovariante Ableitung** bezeichnet (‘‘kovariant’’ hat hier ausnahmsweise nichts mit der Stellung der Lorentz-Indizes zu tun).

Mit der Verallgemeinerung des 4-Impuls-Operators zum kanonischen 4-Impuls-Operator (1.33) kann man sofort die Klein-Gordon-Gleichung in einem **externen elektromagnetischen Feld** formulieren,

$$- \{ [\hat{p}^\mu - \mathbf{q} A^\mu(X)] [\hat{p}_\mu - \mathbf{q} A_\mu(X)] - m^2 c^2 \} \phi(X) = (\hbar^2 D^\mu D_\mu + m^2 c^2) \phi(X) = 0 . \quad (1.36)$$

Man kann diese homogene, lineare, partielle Differentialgleichung 2. Ordnung nun z.B. für ein elektronähnliches Teilchen mit  $m = m_{e^-}$  und  $\mathbf{q} = -e$  im Coulomb-Potential (1.28) eines wasserstoffähnlichen Atomkerns lösen, also für

$$\varphi(X) = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r} , \quad \vec{A}(X) \equiv 0 .$$

Dies geht ganz analog zur Lösung der Schrödinger-Gleichung in der Vorlesung ‘‘Quantenmechanik I’’ (wir stellen dies als Übungsaufgabe). Man findet aber z.B. für  $Z = 1$ , also das Wasserstoffatom, für die Bindungsenergie des Grundzustands einen Wert, der nicht mit dem experimentellen Befund  $E_0 = -E_R \simeq -13.6 \text{ eV}$  übereinstimmt. Die Klein-Gordon-Gleichung ist also nicht die korrekte relativistische Verallgemeinerung der Schrödinger-Gleichung für das Elektron.

### 1.1.5 Stromerhaltung in der Klein-Gordon-Gleichung

Abgesehen vom Versagen bei der Berechnung des Grundzustands des Elektrons im Wasserstoffatom hat die Klein-Gordon-Gleichung aber noch ein weiteres, ernsthaftes Problem, wenn man versucht, eine **Wahrscheinlichkeitsdichte** für die Wellenfunktion herzuleiten. Wir gehen dazu ganz analog wie im Fall der Schrödinger-Gleichung vor, vgl. Abschnitt 2.2.2 der Vorlesung “Quantenmechanik I”. Wir multiplizieren die Klein-Gordon-Gleichung (1.16) von links mit  $\phi^*(X)$  und subtrahieren davon den entsprechenden komplex konjugierten Ausdruck

$$\phi^* (\hat{p}^\mu \hat{p}_\mu - m^2 c^2) \phi - \phi (\hat{p}^\mu \hat{p}_\mu - m^2 c^2) \phi^* = 0, \quad (1.37)$$

wobei wir die Hermitizität des 4-Impuls-Operators  $(\hat{p}^\mu)^\dagger \equiv \hat{p}^\mu$  benutzt haben. Man beachte an dieser Stelle allerdings, dass Gl. (1.37) für reelle Lösungen  $\phi(X) \in \mathbb{R}$  stets trivial erfüllt ist. Die beiden Terme  $\sim m^2 c^2$  heben sich nun gegenseitig weg und mit der Definition (1.12) des 4-Impuls-Operators erhalten wir

$$0 = \phi^* \square \phi - \phi \square \phi^* = \partial_\mu (\phi^* \partial^\mu \phi - \phi \partial^\mu \phi^*) \equiv \partial_\mu j^\mu, \quad (1.38)$$

wobei wir die 4-Stromdichte

$$j^\mu \equiv \phi^* \partial^\mu \phi - \phi \partial^\mu \phi^* \quad (1.39)$$

definiert haben. Gleichung (1.38) hat die Form einer **Kontinuitätsgleichung**. Wenn wir die räumlichen Komponenten der 4-Stromdichte (1.39),

$$\vec{j} = \phi \vec{\nabla} \phi^* - \phi^* \vec{\nabla} \phi \quad (1.40)$$

mit der Definition der **Wahrscheinlichkeitsstromdichte** für die Schrödinger-Gleichung,

$$\vec{j}_{\text{SG}} = i \frac{\hbar}{2m} (\psi \vec{\nabla} \psi^* - \psi^* \vec{\nabla} \psi), \quad (1.41)$$

s. Gl. (2.23) der Vorlesung “Quantenmechanik I”, vergleichen, so liegt es nahe, die in Gl. (1.40) definierte Größe (zumindest bis auf einen konstanten Faktor) mit der **Wahrscheinlichkeitsstromdichte der Klein-Gordon-Gleichung** zu identifizieren. Dann müsste aber die zeitliche Komponente des 4-Stroms (1.39) bis auf einen Faktor  $c$  (und einen konstanten Faktor) die zugehörige **Wahrscheinlichkeitsdichte** sein,

$$\rho \equiv \frac{j^0}{c} = \frac{1}{c} (\phi^* \partial_0 \phi - \phi \partial_0 \phi^*) = \frac{1}{c^2} \left( \phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} - \phi \frac{\partial \phi^*}{\partial t} \right). \quad (1.42)$$

Die zur Kontinuitätsgleichung (1.38) gehörende Erhaltungsgröße wäre das räumliche Integral über  $\rho$ ,

$$W(t) \equiv \int_V d^3 \vec{r} \rho(t, \vec{r}) \equiv \text{const.} \quad (1.43)$$

Das Problem ist aber, dass der Ausdruck (1.42) für die “Wahrscheinlichkeitsdichte” **nicht** notwendigerweise **positiv definit** ist. Eine Wahrscheinlichkeit nimmt aber stets positiv (semi-) definite Werte zwischen 0 und 1 an. Die Interpretation von  $\rho$  als “Wahrscheinlichkeitsdichte” ist damit nicht haltbar. Der fehlende konstante Faktor in den Glgen. (1.40)

und (1.42) ändert daran nichts, denn wenn man ihn negativ wählen würde, so gilt das gleiche Argument, weil  $\rho$  auch nicht notwendigerweise negativ definit ist; das Vorzeichen ist einfach unbestimmt und hängt an jedem Raum-Zeitpunkt  $X$  von der Form der Lösung  $\phi(X)$  ab. Man beachte, dass der entsprechende Ausdruck für die Schrödinger-Gleichung  $\rho_{\text{SG}} \equiv \psi^* \psi \equiv |\psi|^2 \geq 0$  dieses Problem nicht hat.

Dieses Versagen der Wahrscheinlichkeitsinterpretation hat dazu geführt, die Klein-Gordon-Gleichung als relativistische Wellengleichung für das Elektron zu verwerfen. Erst viel später hat man realisiert, dass sie dennoch das Verhalten physikalischer Teilchen, allerdings von Bosonen mit Spin null, korrekt zu beschreiben vermag. Das Problem mit der "negativen Wahrscheinlichkeitsdichte" behebt man ganz einfach dadurch, dass man für den konstanten Faktor, mit dem  $\rho$  und  $\vec{j}$  multipliziert werden können, die **Ladung  $q$**  des Teilchens wählt. Dann ist  $\rho$  einfach die **Ladungsdichte** und  $\vec{j}$  die **Ladungsstromdichte**. Diese können, aufgrund der von einer relativistischen Theorie vorhergesagten Existenz von Antiteilchen (die umgekehrte Ladung wie die Teilchen tragen) durchaus positive oder negative Werte annehmen.

### 1.1.6 Das Verhalten unter Lorentz-Transformationen

Weil das 4-Betragsquadrat eines beliebigen 4-Vektors invariant unter Lorentz-Transformationen ist, also insbesondere,

$$\hat{p}'^\mu \hat{p}'_\mu \equiv \hat{p}^\mu \hat{p}_\mu, \quad \hat{p}'^\mu \equiv \Lambda^\mu{}_\nu \hat{p}^\nu, \quad (1.44)$$

und weil  $m^2 c^2$  ein Lorentz-Skalar ist, ist das Verhalten der Klein-Gordon-Gleichung (1.16) unter Lorentz-Transformationen **ausschließlich** durch das Transformationsverhalten der Wellenfunktion  $\phi(X)$  gegeben. Hier ergeben sich im Prinzip unterschiedliche Möglichkeiten. Die **einfachste** davon ist, dass sich  $\phi(X)$  wie ein **Lorentz-Skalar** transformiert,

$$\phi(X) \longrightarrow \phi'(X') \equiv \phi(X), \quad X' = \Lambda X, \quad x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu. \quad (1.45)$$

Dies bedeutet, dass die Lorentz-transformierte Wellenfunktion  $\phi'(X')$  am Lorentz-transformierten Raum-Zeit-Punkt  $X' \equiv (x'^\mu)$  den gleichen Wert annimmt wie die ursprüngliche Wellenfunktion  $\phi(X)$  am ursprünglichen Raum-Zeit-Punkt  $X \equiv (x^\mu)$ .

Lorentz-skalare Wellenfunktionen  $\phi(X)$  beschreiben skalare Teilchen, d.h. Bosonen mit Spin null. Es stellt sich heraus, dass das Lorentz-Transformationsverhalten der Wellenfunktion eng mit dem Spin des betreffenden Teilchens verknüpft ist. So transformiert sich die im nächsten Abschnitt behandelte Dirac-Gleichung wie ein Spinor, d.h. sie beschreibt Fermionen mit Spin 1/2. Sie stellt damit auch die korrekte relativistische Verallgemeinerung der Schrödinger-Gleichung für das Elektron dar.

## 1.2 Die Dirac-Gleichung

24.4.2012

### 1.2.1 Heuristische Herleitung

Wir verfolgen nun den anderen in Abschnitt 1.1.1 angesprochenen Ansatz, nämlich die freie Schrödinger-Gleichung (1.5) sowohl im Energie-Operator wie auch im Impuls-Operator zu **linearisieren**. Wir führen dabei wieder den Energie-Operator (1.8) auf der linken

Seite ein und schreiben den Hamilton-Operator auf der rechten Seite der Schrödinger-Gleichung zunächst als **Linearkombination** der Komponenten des 3-Impulses,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \vec{r}) \equiv \hat{E} \psi(t, \vec{r}) = \left( \sum_{i=1}^3 c \hat{\alpha}^i \hat{p}^i + \hat{\beta} mc^2 \right) \psi(t, \vec{r}) \equiv \hat{H}_{0D} \psi(t, \vec{r}) , \quad (1.46)$$

mit dem sog. **Diracschen Hamilton-Operator**

$$\hat{H}_{0D} = \sum_{i=1}^3 c \hat{\alpha}^i \hat{p}^i + \hat{\beta} mc^2 . \quad (1.47)$$

Gleichung (1.46) bezeichnet man als **Dirac-Gleichung**. Die dimensionslosen, konstanten (d.h. von der Raum-Zeit-Koordinate  $X$  unabhängigen) **Entwicklungskoeffizienten**  $\hat{\alpha}^i$ ,  $\hat{\beta}$  sind noch zu bestimmen. Wir haben einen Term  $\sim mc^2$  hinzugefügt, weil ohne diesen Term, oder für die Wahl  $\hat{\beta} = 0$ , die Masse des Teilchens gar nicht mehr in der Dirac-Gleichung (1.46) auftreten würde. Dies ergibt aber keinen Sinn, weil die relativistischen Energien (1.11) freier Teilchen durchaus von der Masse abhängen und wir erwarten, dass ein (einfacher) Zusammenhang zwischen diesen Energien und den Eigenwerten von  $\hat{H}_{0D}$  besteht.

Wir bestimmen nun die Entwicklungskoeffizienten  $\hat{\alpha}^i$ ,  $\hat{\beta}$  aus der **Forderung**, dass die relativistische Energie-Impuls-Beziehung (1.11) gelte. Dies bedeutet für **Eigenfunktionen**  $\psi(X)$  des Energie-Operators die Gültigkeit der Gleichung

$$\frac{\hat{E}^2}{c^2} \psi(X) \equiv \frac{E^2}{c^2} \psi(X) = (\vec{p}^2 + m^2 c^2) \psi(X) . \quad (1.48)$$

Andererseits gilt aber mit Gl. (1.46)

$$\begin{aligned} \frac{\hat{E}^2}{c^2} \psi(X) &= \frac{1}{c^2} \hat{H}_{0D}^2 \psi(X) \\ &= \left( \sum_{i=1}^3 \hat{\alpha}^i \hat{p}^i + \hat{\beta} mc \right) \left( \sum_{j=1}^3 \hat{\alpha}^j \hat{p}^j + \hat{\beta} mc \right) \psi(X) \\ &= \left[ \sum_{i,j=1}^3 \hat{\alpha}^i \hat{\alpha}^j \hat{p}^i \hat{p}^j + mc \sum_{i=1}^3 (\hat{\alpha}^i \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}^i) \hat{p}^i + m^2 c^2 \hat{\beta}^2 \right] \psi(X) \\ &= \left[ \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 (\hat{\alpha}^i \hat{\alpha}^j + \hat{\alpha}^j \hat{\alpha}^i) \hat{p}^i \hat{p}^j + mc \sum_{i=1}^3 (\hat{\alpha}^i \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}^i) \hat{p}^i + m^2 c^2 \hat{\beta}^2 \right] \psi(X) , \end{aligned} \quad (1.49)$$

wobei wir sorgfältig auf die Reihenfolge der Faktoren geachtet und im letzten Schritt das Produkt  $\hat{\alpha}^i \hat{\alpha}^j$  in den Indizes  $i$  und  $j$  symmetrisiert haben (dies ist möglich, da es mit einem in  $i$  und  $j$  symmetrischen Faktor  $\hat{p}^i \hat{p}^j$  multipliziert wird und über alle Werte von  $i$  und  $j$  summiert wird). Weil Energie- und Impuls-Operator miteinander vertauschen,

$$\left[ \hat{E}, \hat{p}^i \right] = 0 , \quad i = 1, 2, 3 \quad (1.50)$$

(Ableitungen nach Zeit und Ort sind voneinander unabhängig), können wir ein System von gemeinsamen Eigenfunktionen finden. Wir nehmen also an, dass  $\psi(X)$  auch Eigenfunktion zu  $\hat{p}$  ist. Dann können wir die Impuls-Operatoren auf der rechten Seite in Gl. (1.49) durch ihre Eigenwerte ersetzen,

$$\frac{\hat{E}^2}{c^2} \psi(X) = \left[ \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 (\hat{\alpha}^i \hat{\alpha}^j + \hat{\alpha}^j \hat{\alpha}^i) p^i p^j + mc \sum_{i=1}^3 (\hat{\alpha}^i \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}^i) p^i + m^2 c^2 \hat{\beta}^2 \right] \psi(X). \quad (1.51)$$

Koeffizientenvergleich mit Gl. (1.48) ergibt, dass

$$\hat{\alpha}^i \hat{\alpha}^j + \hat{\alpha}^j \hat{\alpha}^i \equiv \{\hat{\alpha}^i, \hat{\alpha}^j\} = 2\delta^{ij}, \quad (1.52)$$

$$\hat{\alpha}^i \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}^i \equiv \{\hat{\alpha}^i, \hat{\beta}\} = 0, \quad (1.53)$$

$$\hat{\beta}^2 = 1. \quad (1.54)$$

Hierbei haben wir die Definition des **Antikommutators**

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \quad (1.55)$$

benutzt. Es ist klar, dass die Entwicklungskoeffizienten  $\hat{\alpha}^i, \hat{\beta}$  keine gewöhnlichen Zahlen sein können, weil zumindest Gl. (1.53) für solche keine nicht-trivialen Lösungen besitzt. Die Entwicklungskoeffizienten haben aber eine Darstellung als **Matrizen**. Man beachte, dass man sich dann die rechten Seiten von Glgen. (1.52) – (1.54) mit einer Einheitsmatrix  $\mathbb{1}$  multipliziert denken muss. Wir wollen die Matrizen  $\hat{\alpha}^i, \hat{\beta}$  im folgenden bestimmen. Zunächst aber notieren wir folgende **Eigenschaften**:

(i) **Behauptung:** Die Matrizen  $\hat{\alpha}^i, \hat{\beta}$  sind **hermitesch**,

$$\hat{\alpha}^{i\dagger} = \hat{\alpha}^i, \quad \hat{\beta}^\dagger = \hat{\beta}. \quad (1.56)$$

**Beweis:** Der Operator auf der linken Seite der Dirac-Gleichung (1.46),  $\hat{E} \equiv i\hbar \partial/\partial t$  ist hermitesch, also muss auch der Diracsche Hamilton-Operator (1.47) hermitesch sein,

$$\hat{H}_{0D}^\dagger = \sum_{i=1}^3 c \hat{p}^{i\dagger} \hat{\alpha}^{i\dagger} + \hat{\beta}^\dagger mc^2 \equiv \hat{H}_{0D} = \sum_{i=1}^3 c \hat{\alpha}^i \hat{p}^i + \hat{\beta} mc^2. \quad (1.57)$$

Da der Impuls-Operator hermitesch ist,  $\hat{p}^{i\dagger} \equiv \hat{p}^i$ , folgt die Behauptung durch Koeffizientenvergleich.

**Korollar:** Die Eigenwerte von  $\hat{\alpha}^i, \hat{\beta}$  sind **reell**.

(ii) **Behauptung:** Die Eigenwerte von  $\hat{\alpha}^i, \hat{\beta}$  nehmen die Werte  $\pm 1$  an.

**Beweis:** Aufgrund von Gl. (1.52) gilt

$$(\hat{\alpha}^i)^2 = \mathbb{1}. \quad (1.58)$$

Außerdem gilt wegen Gl. (1.54) auch

$$\hat{\beta}^2 = \mathbb{1}. \quad (1.59)$$

## 1 Relativistische Wellengleichungen

Weil  $\hat{\alpha}^i$  und  $\hat{\beta}$  hermitesch sind, lassen sie sich durch **unitäre** Transformationen diagonalisieren, also mit  $\hat{U}_{\alpha^i}^\dagger = \hat{U}_{\alpha^i}^{-1}$ ,  $\hat{U}_\beta^\dagger = \hat{U}_\beta^{-1}$

$$\hat{U}_{\alpha^i}^{-1} \hat{\alpha}^i \hat{U}_{\alpha^i} = \text{diag}(\alpha_1^i, \dots, \alpha_N^i), \quad i = 1, 2, 3, \quad (1.60)$$

$$\hat{U}_\beta^{-1} \hat{\beta} \hat{U}_\beta = \text{diag}(\beta_1, \dots, \beta_N), \quad (1.61)$$

wobei  $\alpha_n^i$ ,  $n = 1, \dots, N$  die Eigenwerte von  $\hat{\alpha}^i$  und  $\beta_n$ ,  $n = 1, \dots, N$  die Eigenwerte von  $\hat{\beta}$  sind. Es gilt aufgrund von Gl. (1.58)

$$\mathbb{1} = \hat{U}_{\alpha^i}^{-1} \mathbb{1} \hat{U}_{\alpha^i} = \hat{U}_{\alpha^i}^{-1} (\hat{\alpha}^i)^2 \hat{U}_{\alpha^i} = \hat{U}_{\alpha^i}^{-1} \hat{\alpha}^i \hat{U}_{\alpha^i} \hat{U}_{\alpha^i}^{-1} \hat{\alpha}^i \hat{U}_{\alpha^i} = \text{diag}[(\alpha_1^i)^2, \dots, (\alpha_N^i)^2]. \quad (1.62)$$

Da die Eigenwerte  $\alpha_n^i$  reell sein müssen, sind nur die Werte

$$\alpha_n^i = \pm 1, \quad n = 1, \dots, N, \quad (1.63)$$

erlaubt. Ganz analog beweist man

$$\beta_n = \pm 1, \quad n = 1, \dots, N, \text{ q.e.d.} \quad (1.64)$$

(iii) Die Matrizen  $\hat{\alpha}^i$ ,  $\hat{\beta}$  sind **spurfrei**,

$$\text{Tr} \hat{\alpha}^i = \text{Tr} \hat{\beta} = 0. \quad (1.65)$$

**Beweis:** Zunächst gilt aufgrund von Glgen. (1.53) und (1.54)

$$\hat{\alpha}^i \hat{\beta} = -\hat{\beta} \hat{\alpha}^i \iff \hat{\alpha}^i \hat{\beta}^2 = \hat{\alpha}^i \mathbb{1} = \hat{\alpha}^i = -\hat{\beta} \hat{\alpha}^i \hat{\beta}.$$

Wir bilden die Spur dieser Gleichung,

$$\text{Tr} \hat{\alpha}^i = -\text{Tr}(\hat{\beta} \hat{\alpha}^i \hat{\beta}) = -\text{Tr}(\hat{\alpha}^i \hat{\beta}^2) = -\text{Tr}(\hat{\alpha}^i \mathbb{1}) = -\text{Tr} \hat{\alpha}^i \equiv 0,$$

wobei wir die zyklische Vertauschbarkeit von Matrizen unter der Spur und nochmals Gl. (1.54) benutzt haben. Entsprechend berechnen wir mit den Glgen. (1.53) und (1.58)

$$\hat{\alpha}^i \hat{\beta} = -\hat{\beta} \hat{\alpha}^i \iff (\hat{\alpha}^i)^2 \hat{\beta} = \mathbb{1} \hat{\beta} = \hat{\beta} = -\hat{\alpha}^i \hat{\beta} \hat{\alpha}^i,$$

und nach Spurbildung,

$$\text{Tr} \hat{\beta} = -\text{Tr}(\hat{\alpha}^i \hat{\beta} \hat{\alpha}^i) = -\text{Tr}[\hat{\beta} (\hat{\alpha}^i)^2] = -\text{Tr}(\hat{\beta} \mathbb{1}) = -\text{Tr} \hat{\beta} \equiv 0.$$

(iv) Die Dimension der Matrizen  $\hat{\alpha}^i$ ,  $\hat{\beta}$  ist **geradzahlig**,  $N = 2, 4, 6, \dots$

**Beweis:** Es gilt aufgrund der Glgen. (1.60) und (1.65)

$$0 = \text{Tr} \hat{\alpha}^i = \text{Tr}(\hat{\alpha}^i \hat{U}_{\alpha^i} \hat{U}_{\alpha^i}^{-1}) = \text{Tr}(\hat{U}_{\alpha^i}^{-1} \hat{\alpha}^i \hat{U}_{\alpha^i}) = \sum_{n=1}^N \alpha_n^i.$$

Da aber  $\alpha_n^i = \pm 1$ , muss die Anzahl der Eigenwerte  $-1$  gleich der der Eigenwerte  $+1$  sein, sonst kann die Spur nicht verschwinden. Also muss  $N$  geradzahlig sein, q.e.d.



(v) **Behauptung:** Die Dimension der Matrizen  $\hat{\alpha}^i$ ,  $\hat{\beta}$  ist  $N \geq 4$ .

**Beweis:** Für  $N = 2$  gibt es nur **drei** linear unabhängige antikommutierende Matrizen, nämlich die **Pauli-Matrizen**

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.66)$$

Wir benötigen aber **vier** linear unabhängige Matrizen, die drei  $\hat{\alpha}^i$ ,  $i = 1, 2, 3$ , sowie  $\hat{\beta}$ . Also muss  $N$  mindestens 4 (oder größer) sein, q.e.d.

**Korollar:** Es besteht keine Notwendigkeit, die Betrachtung komplizierter als nötig zu machen ("Occam's Razor"). Wir beschränken uns daher auf den Fall  $N = 4$ .

(vi) **Behauptung:** Eine mögliche Darstellung der Matrizen  $\hat{\alpha}^i$ ,  $\hat{\beta}$  ist

$$\hat{\alpha}^i = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_i \\ \hat{\sigma}_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\beta} = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix}, \quad (1.67)$$

wobei  $\mathbb{1}_2$  die  $(2 \times 2)$ -Einheitsmatrix ist. Diese Darstellung nennt man auch **Dirac-Darstellung** der Matrizen  $\hat{\alpha}^i$ ,  $\hat{\beta}$ .

**Beweis:** Man muss überprüfen, dass diese Matrizen die Glgen. (1.52) – (1.54), sowie die Eigenschaften (i) – (v) erfüllen. Wir lassen dies als Übungsaufgabe (zum Beweis verwendet man die Antikommutationsrelation  $\{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\} = 2\delta_{ij}\mathbb{1}_2$  für die Pauli-Matrizen, vgl. Gl. (6.27) der Vorlesung "Quantenmechanik I").

## 1.2.2 Kovariante Form der Dirac-Gleichung

Die Dirac-Gleichung in der Form (1.46) transformiert sich nicht offensichtlich in Lorentzkovarianter Weise. Dem kann man aber abhelfen, indem man beide Seiten mit  $\hat{\beta}/c$  multipliziert,

$$i\hbar \hat{\beta} \partial_0 \psi(X) = \left( \sum_{i=1}^3 \hat{\beta} \hat{\alpha}^i \hat{p}^i + mc \right) \psi(X),$$

wobei wir Gl. (1.54) benutzt haben. Wir bringen nun alle Terme auf eine Seite und benutzen die Definition (1.8) des Energie-Operators,  $\hat{E}/c = i\hbar \partial_0$ ,

$$\left( \hat{\beta} \frac{\hat{E}}{c} - \sum_{i=1}^3 \hat{\beta} \hat{\alpha}^i \hat{p}^i - mc \right) \psi(X) = 0. \quad (1.68)$$

Wir definieren nun die sog. **Diracschen Gamma-Matrizen** oder kurz "**Dirac-Matrizen**"

$$\gamma^0 \equiv \hat{\beta}, \quad \gamma^i \equiv \hat{\beta} \hat{\alpha}^i, \quad i = 1, 2, 3, \quad (1.69)$$

und fassen diese zu einem matrixwertigen 4-Vektor zusammen,

$$\gamma^\mu = (\gamma^0, \gamma^1, \gamma^2, \gamma^3)^T \equiv (\gamma^0, \vec{\gamma})^T = (\hat{\beta}, \hat{\beta} \hat{\alpha}^1, \hat{\beta} \hat{\alpha}^2, \hat{\beta} \hat{\alpha}^3)^T \equiv (\hat{\beta}, \hat{\beta} \hat{\vec{\alpha}})^T. \quad (1.70)$$

**Eigenschaften:**

(i) **Behauptung:**  $\gamma^0$  ist **hermitesch**,  $\gamma^i$  ist **antihermitesch**.

**Beweis:** Es gilt aufgrund der Hermitizität von  $\hat{\beta}$

$$\gamma^0 = \hat{\beta} = \hat{\beta}^\dagger = (\gamma^0)^\dagger \quad (1.71)$$

und aufgrund von Gl. (1.53) und der Hermitizität von  $\hat{\alpha}^i$ ,  $\hat{\beta}$

$$\gamma^i = \hat{\beta}\hat{\alpha}^i = -\hat{\alpha}^i\hat{\beta} = -(\hat{\alpha}^i)^\dagger\hat{\beta}^\dagger = -(\hat{\beta}\hat{\alpha}^i)^\dagger = -(\gamma^i)^\dagger, \quad \text{q.e.d.} \quad (1.72)$$

(ii) **Behauptung:** Es gilt die **Antikommutationsrelation**

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} \mathbb{1}, \quad (1.73)$$

mit dem metrischen Tensor in der Konvention  $g^{\mu\nu} = \text{diag}(+, -, -, -)$ .

**Beweis:** Am besten beweist man dies getrennt für die Fälle  $(\mu\nu) = (00)$ ,  $(\mu\nu) = (0i)$  und  $(\mu\nu) = (ij)$ ,  $i = 1, 2, 3$ :

$$\begin{aligned} \{\gamma^0, \gamma^0\} &= \{\hat{\beta}, \hat{\beta}\} = 2\hat{\beta}^2 = 2\mathbb{1} \equiv 2g^{00} \mathbb{1}, \\ \{\gamma^0, \gamma^i\} &= \{\hat{\beta}, \hat{\beta}\hat{\alpha}^i\} = \hat{\beta}^2\hat{\alpha}^i + \hat{\beta}\hat{\alpha}^i\hat{\beta} = \hat{\alpha}^i - \hat{\beta}^2\hat{\alpha}^i = \hat{\alpha}^i - \hat{\alpha}^i = 0 \equiv 2g^{0i} \mathbb{1}, \\ \{\gamma^i, \gamma^j\} &= \hat{\beta}\hat{\alpha}^i\hat{\beta}\hat{\alpha}^j + \hat{\beta}\hat{\alpha}^j\hat{\beta}\hat{\alpha}^i = -\hat{\alpha}^i\hat{\beta}^2\hat{\alpha}^j - \hat{\alpha}^j\hat{\beta}^2\hat{\alpha}^i = -\{\hat{\alpha}^i, \hat{\alpha}^j\} \equiv 2g^{ij} \mathbb{1}, \end{aligned}$$

wobei wir die Glgen. (1.52) – (1.54) benutzt haben, q.e.d.

Man beachte, dass auf beiden Seiten der Gl. (1.73) das Index-Paar  $(\mu\nu)$  auftritt. Es handelt sich also um eine Gleichung, die sich wie ein Lorentz-Tensor vom Rang 2 transformiert. Gleichzeitig steht auf der linken Seite das Produkt zweier Diracscher Gamma-Matrizen und auf der rechten eine  $(4 \times 4)$ -Einheitsmatrix. Gleichung (1.73) ist also gleichzeitig eine  $(4 \times 4)$ -Matrix im Raum der Dirac-Matrizen. Man darf die beiden Räume, also den Minkowski-Raum (d.h. die vierdimensionale Raum-Zeit) und den Raum der 4-Spinoren, auf die die Gamma-Matrizen angewendet werden, nicht verwechseln. Während für den Minkowski-Raum die Komponentenschreibweise verwendet wurde, wurde für den Spinor-Raum die Matrixschreibweise gewählt. Man hätte auch hier die Matrix-Indizes explizit angeben können, aber das hätte die Übersichtlichkeit von Gl. (1.73) erheblich beeinträchtigt:

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\}_{\alpha\beta} \equiv \sum_{\delta=1}^4 (\gamma^\mu_{\alpha\delta}\gamma^\nu_{\delta\beta} + \gamma^\nu_{\alpha\delta}\gamma^\mu_{\delta\beta}) = 2g^{\mu\nu} \delta_{\alpha\beta}.$$

(iii) In der **Dirac-Darstellung** (1.67) für die Matrizen  $\hat{\alpha}^i$ ,  $\hat{\beta}$  gilt

$$\gamma^0 \equiv \hat{\beta} = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix}, \quad \gamma^i \equiv \hat{\beta}\hat{\alpha}^i = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_i \\ \hat{\sigma}_i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_i \\ -\hat{\sigma}_i & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.74)$$

Mit den Dirac-Matrizen (1.69) und der Definition (1.12) des 4-Impuls-Operators schreibt sich die Dirac-Gleichung (1.68) kompakt als

$$(\gamma^\mu \hat{p}_\mu - mc) \psi(X) = (i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu - mc) \psi(X) = 0. \quad (1.75)$$

Für das 4-Skalarprodukt eines 4-Vektors  $a^\mu$  mit dem 4-Vektor  $\gamma^\mu$  der Dirac-Matrizen hat R.P. Feynman eine kompakte Notation eingeführt, den sog. **Feynman-Slash**

$$\not{a} \equiv \gamma^\mu a_\mu. \quad (1.76)$$

Damit schreibt sich die Dirac-Gleichung (1.75) noch kompakter als

$$(\not{\not{p}} - mc) \psi(X) = (i\hbar \not{\not{\partial}} - mc) \psi(X) = 0. \quad (1.77)$$

Weil  $\gamma^\mu$  eine  $(4 \times 4)$ -Matrix ist, muss  $\psi(X)$  die Gestalt eines 4-Vektors haben,

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \quad (1.78)$$

Man beachte aber, dass sich  $\psi(X)$  **nicht** wie ein Lorentz-Vektor transformiert (was man schon daran erkennt, dass  $\psi(X)$  keinen Lorentz-Index trägt). Zur Unterscheidung von “echten” Lorentz-4-Vektoren bezeichnet man  $\psi(X)$  als **4-Spinor**. Diese haben ein **anderes Transformationsverhalten** als Lorentz-Vektoren. Wir wollen dies hier nicht weiter vertiefen und verweisen auf die Vorlesung “Quantenfeldtheorie”. Weil  $\not{\not{p}} = \gamma^\mu \hat{p}_\mu$  und  $mc$  sich wie **Lorentz-Skalare** transformieren, und weil  $\gamma^\mu \psi(X)$  als Produkt einer  $(4 \times 4)$ -Matrix und eines 4-Spinors wiederum ein 4-Spinor ist, halten wir aber fest, dass sich die Dirac-Gleichung wie ein **4-Spinor** transformiert.

Mit 4-Spinoren rechnet es sich zunächst so wie mit 4-Vektoren. Der **hermitesch konjugierte** (komplex konjugierte und transponierte) 4-Spinor lautet

$$\psi^\dagger = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*). \quad (1.79)$$

Den sog. **adjungierten Spinor** (oder “Dirac-adjungierten” Spinor) definiert man als

$$\bar{\psi} \equiv \psi^\dagger \gamma^0. \quad (1.80)$$

Man beachte, dass das Produkt

$$\psi^\dagger \psi = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \sum_{\alpha=1}^4 \psi_\alpha^* \psi_\alpha = \sum_{\alpha=1}^4 |\psi_\alpha|^2 \quad (1.81)$$

eine (reelle) **Zahl** ist. Sie ist aber **kein** Lorentz-Skalar. Aus dem Verhalten von 4-Spinoren unter Lorentz-Transformationen stellt sich heraus (worauf wir hier aber nicht näher eingehen), dass die Kombination

$$\bar{\psi} \psi = \psi^\dagger \gamma^0 \psi \quad (1.82)$$

ein **Lorentz-Skalar** ist, während sich

$$\bar{\psi}\gamma^\mu\psi \quad (1.83)$$

wie ein **Lorentz-Vektor** transformiert. Damit transformiert sich

$$\psi^\dagger\psi \equiv \psi^\dagger\mathbb{1}\psi \equiv \psi^\dagger(\gamma^0)^2\psi = \bar{\psi}\gamma^0\psi \quad (1.84)$$

wie die 0-Komponente eines 4-Vektors. Zur physikalischen Interpretation verweisen wir auf Abschnitt 1.2.4.

26.4.2012

### 1.2.3 Die Lagrange-Dichte der Dirac-Gleichung

Wie auch die Klein-Gordon-Gleichung läßt sich die Dirac-Gleichung über die Euler-Lagrange-Gleichungen aus einer Lagrange-Dichte ableiten. Die **Dirac-Lagrange-Dichte** lautet

$$\mathcal{L}_D = \bar{\psi}(\not{p}c - mc^2)\psi \equiv \bar{\psi}(i\hbar c\not{\partial} - mc^2)\psi. \quad (1.85)$$

Da  $\psi$  i.a. ein komplexwertiger 4-Spinor ist, sind Real- und Imaginärteil unabhängige Freiheitsgrade. Alternativ kann man  $\psi$  und  $\bar{\psi}$  als unabhängige Felder betrachten. Die zugehörigen Euler-Lagrange-Gleichungen lauten

$$\begin{aligned} 0 &= \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}_D}{\partial(\partial_\mu \bar{\psi})} - \frac{\partial \mathcal{L}_D}{\partial \bar{\psi}}, \\ 0 &= \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}_D}{\partial(\partial_\mu \psi)} - \frac{\partial \mathcal{L}_D}{\partial \psi}. \end{aligned} \quad (1.86)$$

Da in der Dirac-Lagrange-Dichte (1.85) lediglich  $\bar{\psi}$ , aber nicht seine Ableitung auftritt, lautet die erste Euler-Lagrange-Gleichung (1.86) einfach

$$0 = (\not{p}c - mc^2)\psi. \quad (1.87)$$

Dies ist bereits (nach Division durch  $c$ ) die Dirac-Gleichung (1.77) in kovarianter Form. Die zweite Euler-Lagrange-Gleichung (1.86) ist etwas komplizierter, da sowohl  $\psi$  als auch seine Ableitungen  $\partial_\mu\psi$  in der Dirac-Lagrange-Dichte (1.85) auftreten:

$$0 = \partial_\mu (i\hbar c \overleftarrow{\partial} \bar{\psi} \gamma^\mu) + \bar{\psi} mc^2 = \bar{\psi} \left( i\hbar c \overleftarrow{\partial} + mc^2 \right) = \bar{\psi} \left( \overleftarrow{\not{p}} + mc \right) c. \quad (1.88)$$

Dies ist (nach Division durch  $c$ ) die Dirac-Gleichung für den adjungierten Spinor  $\bar{\psi}$ , wobei der linksgerichtete Pfeil über der partiellen Ableitung andeuten soll, dass diese nach links, auf den adjungierten Spinor  $\bar{\psi}$  wirkt. Wir können diese Gleichung auch direkt aus der Dirac-Gleichung (1.77) ableiten, indem wir hermitesch konjugieren und von rechts mit  $\gamma^0$  multiplizieren,

$$0 = \psi^\dagger \left[ -i\hbar \overleftarrow{\partial}_\mu (\gamma^\mu)^\dagger - mc \right] \gamma^0 = -\psi^\dagger \gamma^0 \left[ i\hbar \overleftarrow{\partial}_\mu \gamma^0 (\gamma^\mu)^\dagger \gamma^0 + mc \right]. \quad (1.89)$$

Die Behauptung ergibt sich nun aus  $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0$  und der Identität

$$\gamma^0 (\gamma^\mu)^\dagger \gamma^0 \equiv \gamma^\mu, \quad (1.90)$$

die wir wie folgt beweisen. Zunächst gilt diese Identität wegen der Hermitizität von  $\gamma^0$  und  $(\gamma^0)^2 \equiv \mathbb{1}$  für den Fall  $\mu = 0$ . Für  $\mu = i$  benutzen wir die Antihermitizität von  $\gamma^i$  und die Antikommutationsrelation (1.73),

$$\gamma^0 (\gamma^i)^\dagger \gamma^0 = -\gamma^0 \gamma^i \gamma^0 = +\gamma^i (\gamma^0)^2 \equiv \gamma^i, \quad \text{q.e.d.}$$

### 1.2.4 Stromerhaltung in der Dirac-Gleichung

Wie für die Schrödinger-Gleichung oder die Klein-Gordon-Gleichung gibt es auch für die Dirac-Gleichung einen erhaltenen Strom. Wir multiplizieren Gl. (1.87) von links mit  $\bar{\psi}$  und Gl. (1.88) von rechts mit  $\psi$  und addieren beide Gleichungen. Dabei hebt sich der Massenterm gegenseitig weg und wir erhalten

$$0 = i\hbar c \bar{\psi} \left( \overleftarrow{\partial} + \overleftarrow{\partial} \right) \psi \equiv i\hbar c \partial_\mu (\bar{\psi} \gamma^\mu \psi), \quad (1.91)$$

wobei wir die nach rechts wirkende partielle Ableitungen mit einem Pfeil nach rechts gekennzeichnet haben. Beide Ableitungen lassen sich mit der Produktregel zusammenfassen. Nach Division durch  $i\hbar$  hat Gl. (1.91) die Form einer Kontinuitätsgleichung,

$$0 = \partial_\mu j^\mu, \quad (1.92)$$

mit der **4-Stromdichte**

$$j^\mu \equiv c \bar{\psi} \gamma^\mu \psi. \quad (1.93)$$

Diese 4-Stromdichte hat alle Eigenschaften, die an eine **Wahrscheinlichkeitsstromdichte** gestellt werden. So ist die 0-Komponente (dividiert durch  $c$ ) eine positiv semi-definite (reelle) Zahl

$$\rho \equiv \frac{j^0}{c} = \bar{\psi} \gamma^0 \psi = \psi^\dagger (\gamma^0)^2 \psi = \psi^\dagger \psi \equiv \sum_{\alpha=1}^4 |\psi_\alpha|^2 \geq 0, \quad (1.94)$$

vgl. Gl. (1.81). Sie hat die Bedeutung einer **Wahrscheinlichkeitsdichte** und entspricht der Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho_{\text{SG}} \equiv |\psi|^2$  der Schrödinger-Gleichung, nur sind hier die Betragsquadrate **aller** Komponenten des 4-Spinors aufzusummieren. Die zugehörige **Wahrscheinlichkeitsstromdichte** ist

$$\vec{j} = c \bar{\psi} \vec{\gamma} \psi = c \psi^\dagger \gamma^0 \vec{\gamma} \psi = c \psi^\dagger \hat{\alpha} \psi. \quad (1.95)$$

### 1.2.5 Lösungen der freien Dirac-Gleichung I – relativistische Energie-Impuls-Beziehung

Zur Lösung der wechselwirkungsfreien, oder kurz, “freien” Dirac-Gleichung (1.77) machen wir den Lösungsansatz

$$\psi(X) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p^\mu x_\mu\right) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix}. \quad (1.96)$$

## 1 Relativistische Wellengleichungen

Dies ist naheliegend, da die Dirac-Gleichung linear im 4-Impuls-Operator ist und der Lösungsansatz (1.96) proportional zu einer Eigenfunktion zu diesem Operator mit Eigenwert  $p^\mu$  ist. Dadurch wird die Dirac-Gleichung, die eine homogene, lineare, partielle Differentialgleichung erster Ordnung ist, in eine algebraische Gleichung konvertiert,

$$0 = (\not{p} - mc) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix}, \quad (1.97)$$

wobei wir die Exponentialfunktion weggelassen haben, da sie nicht verschwinden kann. Wenn wir die Matrix-Struktur in Gl. (1.97) explizit in der Dirac-Darstellung (1.67) der Dirac-Matrizen ausschreiben, stellen wir fest, dass es sich um ein homogenes lineares Gleichungssystem zur Bestimmung der Unbekannten  $a_1, a_2, a_3, a_4$  handelt,

$$\begin{aligned} 0 &= \begin{pmatrix} (p^0 - mc)\mathbb{1}_2 & -\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p} \\ \hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p} & (-p^0 - mc)\mathbb{1}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} p^0 - mc & 0 & -p^3 & -p^1 + ip^2 \\ 0 & p^0 - mc & -p^1 - ip^2 & p^3 \\ p^3 & p^1 - ip^2 & -p^0 - mc & 0 \\ p^1 + ip^2 & -p^3 & 0 & -p^0 - mc \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (1.98)$$

wobei  $\hat{\vec{\sigma}} = (\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3)^T$ . Nichttriviale Lösungen erfordern das Verschwinden der Koeffizientendeterminante,

$$\begin{aligned} 0 &= \det_{4 \times 4}(\not{p} - mc) = \det_{4 \times 4} \begin{pmatrix} (p^0 - mc)\mathbb{1}_2 & -\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p} \\ \hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p} & (-p^0 - mc)\mathbb{1}_2 \end{pmatrix} \\ &= \det_{4 \times 4} \begin{pmatrix} p^0 - mc & 0 & -p^3 & -p^1 + ip^2 \\ 0 & p^0 - mc & -p^1 - ip^2 & p^3 \\ p^3 & p^1 - ip^2 & -p^0 - mc & 0 \\ p^1 + ip^2 & -p^3 & 0 & -p^0 - mc \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.99)$$

Man könnte die Determinante dieser  $(4 \times 4)$ -Matrix nun explizit mit Hilfe des Determinantenentwicklungssatzes ausrechnen. Einfacher ist jedoch die Anwendung folgenden Satzes (den Beweis überlassen wir als Übungsaufgabe):

**Satz:** Seien  $A, B, C, D$  ( $N \times N$ )-Matrizen und  $D$  sei invertierbar, dann gilt

$$\det_{2N \times 2N} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \det_{N \times N} (AD - BD^{-1}CD). \quad (1.100)$$

**Bemerkung:** Für  $N = 1$  entspricht dies genau der Sarrus-Regel (für  $(2 \times 2)$ -Matrizen). Falls  $p^0 \neq -mc$ , so ist die der Untermatrix  $D$  entsprechende Matrix  $(-p^0 - mc)\mathbb{1}_2$  in Gl.

(1.99) invertierbar. Dann ergibt die Anwendung des Satzes (1.100) (unter Beachtung der Tatsache, dass hier  $D \sim \mathbb{1}_2$  und damit mit  $C$  vertauscht)

$$0 = \det_{4 \times 4} \begin{pmatrix} (p^0 - mc) \mathbb{1}_2 & -\hat{\sigma} \cdot \vec{p} \\ \hat{\sigma} \cdot \vec{p} & (-p^0 - mc) \mathbb{1}_2 \end{pmatrix} = \det_{2 \times 2} \left\{ [-(p^0)^2 + m^2 c^2] \mathbb{1}_2 - (\hat{\sigma} \cdot \vec{p})^2 \right\}. \quad (1.101)$$

Nun ist

$$(\hat{\sigma} \cdot \vec{p})^2 = \sum_{i,j=1}^3 \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j p^i p^j = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\} p^i p^j = \vec{p}^2 \mathbb{1}_2. \quad (1.102)$$

Also ist

$$0 = \det_{2 \times 2} \left\{ [-(p^0)^2 + \vec{p}^2 + m^2 c^2] \mathbb{1}_2 \right\} = [-(p^0)^2 + \vec{p}^2 + m^2 c^2]^2. \quad (1.103)$$

Diese Gleichung hat **vier** Lösungen für  $p^0$ , die jeweils **doppelt entartet** sind,

$$p_{\pm}^0 = \pm \frac{E_{\vec{p}}}{c} = \pm \sqrt{\vec{p}^2 + m^2 c^2} \quad \text{2-fach entartet.} \quad (1.104)$$

Dies ist genau die **relativistische Energie-Impuls-Beziehung** (1.11)! Also erfüllen auch die Lösungen der freien Dirac-Gleichung diese Beziehung. Die zweifach entartete Lösung  $p_+^0 = E_{\vec{p}}/c$  beschreibt **Teilchen**, die zweifach entartete Lösung  $p_-^0 = -E_{\vec{p}}/c$  dagegen **Antiteilchen**, für Elektronen entsprechen diese Lösungen also den Positronen. Die Existenz von Antiteilchen wurde von P.A.M. Dirac aufgrund der Existenz der Lösungen zu negativer Energie vorhergesagt. Solche Lösungen existieren zwar auch für die Klein-Gordon-Gleichung, aber sie wurden aufgrund der genannten Probleme mit dieser Gleichung zunächst nicht ernst genommen.

Warum treten aber Teilchen- und Antiteilchenlösungen in zweifacher Entartung auf? Der Grund ist, dass die Dirac-Gleichung **Fermionen mit Spin 1/2** beschreibt. Die ersten beiden und die letzten beiden Komponenten des 4-Spinors bilden jeweils einen 2-Spinor, einen für Lösungen positiver Energie (Teilchen mit Spin 1/2) bzw. einen für Lösungen negativer Energie (Antiteilchen mit Spin 1/2). Wir bemerken, dass die Verallgemeinerung der Schrödinger-Gleichung auf 2-Spinor-Struktur im Falle der Kopplung an ein magnetisches Feld notwendig geworden war, um den Zeeman-Effekt zu erklären. Die Spinor-Struktur der Dirac-Gleichung dagegen ist eine natürliche Konsequenz der Kovarianz dieser Gleichung. Sie existiert auch im feldfreien Fall, also ohne Kopplung an äußere Felder.

### 1.2.6 Spin und Helizität

Am einfachsten erkennt man die Zuordnung der 4-Spinor-Komponenten zu Teilchen bzw. Antiteilchen im **Ruhesystem**,  $\vec{p} = 0$ . Dann ist

$$0 = \begin{pmatrix} p^0 - mc & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p^0 - mc & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -p^0 - mc & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -p^0 - mc \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix}. \quad (1.105)$$

Das Verschwinden der Koeffizientendeterminante ergibt die Lösungen  $p_{\pm}^0 = \pm mc$  (jeweils doppelt entartet). Setzen wir diese Lösungen in das Gleichungssystem (1.105) ein, können wir die Komponenten  $a_{\alpha}, \alpha = 1, \dots, 4$ , bestimmen. Für  $p_+^0 = +mc$  bleiben die Komponenten  $a_1$  und  $a_2$  allerdings unbestimmt, während  $a_3 = a_4 = 0$  sein muss. Für  $p_-^0 = -mc$  dagegen bleiben  $a_3$  und  $a_4$  unbestimmt, während  $a_1 = a_2 = 0$  sein muss. Die Wahlfreiheit der Komponenten  $a_1, a_2$  im ersten bzw.  $a_3, a_4$  im zweiten Fall erlaubt folgenden Ansatz für die jeweils zu den Lösungen  $p_{\pm}^0$  gehörenden Spinoren:

$$\hat{a}_+^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{a}_+^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{a}_-^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{a}_-^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1.106)$$

Diese Spinoren bilden offensichtlich eine Basis des vierdimensionalen Spinor-Raums. Ein beliebiger Spinor kann also in der Form

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} = \sum_{\alpha=1}^2 \left( a_{\alpha} \hat{a}_+^{(\alpha)} + a_{\alpha+2} \hat{a}_-^{(\alpha)} \right) \quad (1.107)$$

geschrieben werden. Der Raum der Lösungen zu **positiver Energie**  $cp_+^0 = mc^2$  beinhaltet aber ausschließlich 4-Spinoren, bei denen die **beiden oberen** Komponenten  $a_1, a_2$  von null verschieden sind und die **beiden unteren** verschwinden,  $a_3 = a_4 = 0$ . Umgekehrt enthält der Raum der Lösungen zu **negativer Energie**  $cp_-^0 = -mc^2$  Spinoren, bei denen lediglich die **beiden unteren** Komponenten  $a_3, a_4$  von null verschieden sind, während die **beiden oberen** verschwinden,  $a_1 = a_2 = 0$ .

Wie sind die Spinoren (1.106) physikalisch zu interpretieren? Dazu führen wir den **Spin-Operator** für durch die Dirac-Gleichung beschriebene Teilchen,

$$\hat{S} \equiv \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \hat{\sigma} & 0 \\ 0 & \hat{\sigma} \end{pmatrix} \quad (1.108)$$

ein. Offenbar gilt für das Quadrat dieses Operators

$$\hat{S}^2 = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} \hat{\sigma}^2 & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}^2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 3 \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & 3 \mathbb{1}_2 \end{pmatrix} = \hbar^2 \frac{3}{4} \mathbb{1} \equiv \hbar^2 \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) \mathbb{1}. \quad (1.109)$$

Aus der Tatsache, dass für das Quadrat von Drehimpuls-Operatoren die Relation  $\hat{L}^2 = \hbar^2 \ell(\ell + 1)$  gilt, lesen wir ab, dass es sich bei Objekten, die durch die Dirac-Gleichung beschrieben werden, in der Tat um Teilchen mit Spin  $S = 1/2$  handelt.

### 1.5.2012

Wir "messen" nun die  $z$ -Komponente des Spins für die Spinoren aus Gl (1.106),

$$\hat{S}_3 \hat{a}_{\pm}^{(1,2)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \hat{a}_{\pm}^{(1,2)}. \quad (1.110)$$



Setzen wir die Spinoren  $\hat{a}_{\pm}^{(1,2)}$  in diese Gleichung ein, so erkennen wir, dass es sich bei  $\hat{a}_{\pm}^{(1)}$  um Spinoren mit Spinkomponente  $S_3 = +\hbar/2$ , also **Spin up**,  $\uparrow$ , und bei  $\hat{a}_{\pm}^{(2)}$  um Spinoren mit Spinkomponente  $S_3 = -\hbar/2$ , also **Spin down**,  $\downarrow$ , handelt. Wir können daher suggestiv schreiben

$$\hat{a}_{\pm}^{(1)} \equiv \hat{a}_{\pm}^{\uparrow}, \quad \hat{a}_{\pm}^{(2)} \equiv \hat{a}_{\pm}^{\downarrow}. \quad (1.111)$$

Diese Zuordnung gilt im Ruhesystem,  $\vec{p} = 0$ . In Systemen, in denen sich das Teilchen mit  $\vec{p} \neq 0$  bewegt, ist die Situation komplizierter. Die Klassifizierung von Teilchen und Antiteilchen mit Spin up oder down funktioniert deshalb im Ruhesystem, weil dort der Dirac-Hamilton-Operator  $\hat{H}_{0D} \equiv mc^2\gamma^0$  bzw. der Dirac-Operator  $p^0\gamma^0 - mc$  mit  $\hat{S}_3$  vertauscht. Offensichtlich müssen wir dazu lediglich die Vertauschbarkeit mit  $\gamma^0$  prüfen,

$$[\gamma^0, \hat{S}_3] = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_3 & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_3 \end{pmatrix} - \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_3 & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix} \equiv 0. \quad (1.112)$$

Darum kann man Energie-Eigenzuständen auch eindeutig eine Spinorientierung zuordnen. Für bewegte Systeme gilt das nicht mehr, weil  $\hat{S}_3$  nicht mehr mit  $\hat{H}_{0D} = c\hat{\alpha} \cdot \vec{p} + mc^2\hat{\beta} \equiv c\gamma^0 (\vec{\gamma} \cdot \vec{p} + mc)$ , bzw. mit dem Dirac-Operator  $\not{p} - mc$  vertauscht. Dies liegt daran, dass  $\hat{S}_3$  zwar mit  $\gamma^0$ , aber i.a. nicht mehr mit  $\vec{\gamma}$  vertauscht, wie man sich mit Hilfe der Vertauschungsrelationen

$$[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2i \epsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k \quad (1.113)$$

(vgl. Vorlesung "Quantenmechanik I", Gl. (6.28)) für die Pauli-Matrizen leicht klarmacht,

$$\begin{aligned} [\gamma^i, \hat{S}_3] &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_i \\ -\hat{\sigma}_i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_3 & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_3 \end{pmatrix} - \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_3 & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_i \\ -\hat{\sigma}_i & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & [\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_3] \\ [\hat{\sigma}_3, \hat{\sigma}_i] & 0 \end{pmatrix} = i\hbar \epsilon_{3ij} \begin{pmatrix} 0 & -\hat{\sigma}_j \\ \hat{\sigma}_j & 0 \end{pmatrix} \neq 0, \quad \text{falls } i \neq 3. \end{aligned}$$

Eine eindeutige Spin-Zuordnung ist im bewegten Fall nur dann möglich, wenn der Impuls auch in Richtung der Spin-Quantisierungsachse zeigt,  $\vec{p} \equiv (0, 0, p)$ . I.a. ist dies nicht der Fall.

Es gibt aber einen Operator, der auch für beliebige  $\vec{p}$  mit  $\hat{H}_{0D}$  bzw. mit  $\not{p} - mc$  vertauscht und der eine Zuordnung einer Größe erlaubt, die den Spin charakterisiert. Es handelt sich um den sog. **Helizitätsoperator**

$$\hat{S}_{\vec{p}} \equiv \hat{S} \cdot \frac{\vec{p}}{p}. \quad (1.114)$$

Offenbar handelt es sich dabei um die Komponente des Spins **parallel** zur Richtung des 3-Impulses. Man spricht von **positiver Helizität**, wenn der Spin **parallel** zu  $\vec{p}$ , und von **negativer Helizität**, wenn der Spin **antiparallel** zu  $\vec{p}$  ausgerichtet ist.

Um zu sehen, dass  $\hat{S}_{\vec{p}}$  in der Tat mit  $\hat{H}_{0D}$  bzw.  $\not{p} - mc$  vertauscht, schreiben wir den Spin-Operator zunächst geeignet um. Dazu benutzen wir die Matrix

$$\gamma_5 \equiv i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3. \quad (1.115)$$

## 1 Relativistische Wellengleichungen

In der Dirac-Darstellung (1.74) für die Diracschen Gamma-Matrizen gilt

$$\begin{aligned}
 \gamma_5 &= i \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_1 \\ -\hat{\sigma}_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_2 \\ -\hat{\sigma}_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_3 \\ -\hat{\sigma}_3 & 0 \end{pmatrix} \\
 &= i \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_1 \\ \hat{\sigma}_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_3 & 0 \\ 0 & -\hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_3 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 0 & -i\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_3 \\ -i\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_3 & 0 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1}_2 \\ \mathbb{1}_2 & 0 \end{pmatrix}, \tag{1.116}
 \end{aligned}$$

wobei wir

$$-i\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_3 = -i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}^2 \equiv \mathbb{1}_2$$

benutzt haben. Es gilt

$$\gamma_5^2 = \mathbb{1} \quad \text{und} \quad \{\gamma_5, \gamma^\mu\} = 0 \quad \forall \mu = 0, 1, 2, 3. \tag{1.117}$$

Die erste Eigenschaft ist offensichtlich, die zweite beweist man leicht, indem man bemerkt, dass aufgrund von Gl. (1.73)  $\gamma^\mu$  mit  $\gamma^\nu$ ,  $\nu \neq \mu$ , antivertauscht (was pro Antivertauschung ein Minus-Zeichen generiert), aber natürlich vertauscht, falls  $\nu = \mu$ . Da  $\gamma_5$  aufgrund seiner Definition für jedes  $\gamma^\mu$  genau eine Gamma-Matrix enthält, die mit  $\gamma^\mu$  vertauscht, aber immer eine ungerade Anzahl von Gamma-Matrizen, die mit  $\gamma^\mu$  antivertauschen, folgt  $\gamma_5\gamma^\mu = -\gamma^\mu\gamma_5$ , was genau der Antivertauschungsrelation (1.117) entspricht.

Wir schreiben den Spin-Operator (1.108) nun als

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \hat{\vec{\sigma}} & 0 \\ 0 & \hat{\vec{\sigma}} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1}_2 \\ \mathbb{1}_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \hat{\vec{\sigma}} \\ \hat{\vec{\sigma}} & 0 \end{pmatrix} \equiv \frac{\hbar}{2} \gamma_5 \hat{\vec{\alpha}} \equiv \frac{\hbar}{2} \gamma_5 \gamma^0 \vec{\gamma} \tag{1.118}$$

und daher

$$\hat{S}_{\vec{p}} \equiv \frac{\hbar}{2p} \gamma_5 \gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \vec{p}. \tag{1.119}$$

Es gilt

$$[\gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \vec{p}, \gamma_5 \gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \vec{p}] = \gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \vec{p} \gamma_5 \gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \vec{p} - \gamma_5 \gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \vec{p} \gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \vec{p} = \vec{\gamma} \cdot \vec{p} \gamma_5 \vec{\gamma} \cdot \vec{p} + \gamma_5 (\vec{\gamma} \cdot \vec{p})^2 = 0, \tag{1.120}$$

da  $\gamma^0$  sowohl mit  $\gamma^i$  als auch mit  $\gamma_5$  antivertauscht, und  $\gamma_5$  mit  $\gamma^i$  antivertauscht. Da außerdem auch

$$[\gamma^0, \gamma_5 \gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \vec{p}] = 0, \tag{1.121}$$

vertauscht auch der Helizitätsoperator  $\hat{S}_{\vec{p}}$  mit dem Dirac-Hamilton-Operator  $\hat{H}_{0D} = c\gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \vec{p} + mc\gamma^0$ , zumindest wenn dieser auf Eigenfunktionen zum Impuls angewendet wird (so dass  $\hat{\vec{p}} \equiv \vec{p}$ ),

$$[\hat{H}_{0D}, \hat{S}_{\vec{p}}] = 0. \tag{1.122}$$

Ganz ähnlich beweist man auch, dass (zumindest in Anwendung auf Eigenfunktionen zum Impuls)

$$[\hat{\not{p}} - mc, \hat{S}_{\vec{p}}] = 0. \tag{1.123}$$

Wir können also Eigenfunktionen zu  $\hat{H}_{0D}$  bzw.  $\hat{\not{p}} - mc$  finden, die gleichzeitig Eigenfunktionen zum Helizitätsoperator  $\hat{S}_{\vec{p}}$  sind, also wohldefinierte Helizität (positiv oder negativ) besitzen.

### 1.2.7 Lösungen der freien Dirac-Gleichung II – Spinoren zu positiver und negativer Energie

Wir wollen nun eine Basis von Spinoren ähnlich der in Gl. (1.106) für den Fall  $\vec{p} \neq 0$  konstruieren. Aufgrund der zweifachen Entartung der Lösungen  $p_{\pm}^0 = \pm E_{\vec{p}}/c$  werden wir wiederum jeweils zwei Spinoren für Lösungen positiver Energie  $cp_{+}^0 = E_{\vec{p}}$  und zwei für Lösungen negativer Energie  $cp_{-}^0 = -E_{\vec{p}}$  finden. Für Lösungen positiver Energie setzen wir  $p_{+}^0 = E_{\vec{p}}/c$  in Gl. (1.98) ein und bestimmen die Unbekannten  $a_{\alpha}$ ,  $\alpha = 1, \dots, 4$ ,

$$\begin{aligned}
 0 &= \begin{pmatrix} E_{\vec{p}}/c - mc & 0 & -p^3 & -p^1 + ip^2 \\ 0 & E_{\vec{p}}/c - mc & -p^1 - ip^2 & p^3 \\ p^3 & p^1 - ip^2 & -E_{\vec{p}}/c - mc & 0 \\ p^1 + ip^2 & -p^3 & 0 & -E_{\vec{p}}/c - mc \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} (E_{\vec{p}}/c - mc)a_1 - p^3 a_3 - (p^1 - ip^2)a_4 \\ (E_{\vec{p}}/c - mc)a_2 - (p^1 + ip^2)a_3 + p^3 a_4 \\ p^3 a_1 + (p^1 - ip^2)a_2 - (E_{\vec{p}}/c + mc)a_3 \\ (p^1 + ip^2)a_1 - p^3 a_2 - (E_{\vec{p}}/c + mc)a_4 \end{pmatrix}. \quad (1.124)
 \end{aligned}$$

Durch Auflösen dieser vier Gleichungen nach den  $a_{\alpha}$ ,  $\alpha = 1, \dots, 4$ , erkennen wir, dass  $a_1, a_2$  unbestimmt bleiben, während

$$a_3 = c \frac{p^3 a_1 + (p^1 - ip^2)a_2}{E_{\vec{p}} + mc^2}, \quad a_4 = c \frac{(p^1 + ip^2)a_1 - p^3 a_2}{E_{\vec{p}} + mc^2}. \quad (1.125)$$

Zwei linear unabhängige Lösungen erhält man durch die Wahl  $a_1 = 1, a_2 = 0$  bzw.  $a_1 = 0, a_2 = 1$ ,

$$\hat{a}_{+}^{(1)} = \mathcal{N}_{+} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ c \frac{p^3}{E_{\vec{p}} + mc^2} \\ c \frac{p^1 + ip^2}{E_{\vec{p}} + mc^2} \end{pmatrix}, \quad \hat{a}_{+}^{(2)} = \mathcal{N}_{+} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ c \frac{p^1 - ip^2}{E_{\vec{p}} + mc^2} \\ -c \frac{p^3}{E_{\vec{p}} + mc^2} \end{pmatrix}, \quad (1.126)$$

wobei  $\mathcal{N}_{+}$  eine geeignet zu bestimmende Normierungskonstante ist. Eine übliche Wahl ist  $\mathcal{N}_{+} \equiv \sqrt{E_{\vec{p}} + mc^2}$ . Die beiden 4-Spinoren sind orthogonal (Beweis als Übungsaufgabe),

$$\hat{a}_{+}^{(\alpha)\dagger} \hat{a}_{+}^{(\beta)} = 2 E_{\vec{p}} \delta_{\alpha\beta}, \quad \alpha, \beta = 1, 2. \quad (1.127)$$

Mit den 2-Spinoren

$$\chi_{\uparrow} \equiv \chi_{+1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{\downarrow} \equiv \chi_{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (1.128)$$

lassen sich die beiden Lösungen sehr kompakt in der Form

$$u(\vec{p}, s) = \sqrt{E_{\vec{p}} + mc^2} \begin{pmatrix} \chi_s \\ c \frac{\hat{\sigma} \cdot \vec{p}}{E_{\vec{p}} + mc^2} \chi_s \end{pmatrix}, \quad s = \pm \frac{1}{2}, \quad (1.129)$$

## 1 Relativistische Wellengleichungen

schreiben. Dies ist der Dirac-Spinor zu **positiver Energie** und **Spin**  $s \pm 1/2$ . Man überzeugt sich durch explizites Nachrechnen, dass er die Dirac-Gleichung

$$(\not{p} - mc) u(\vec{p}, s) = 0 \quad (1.130)$$

für  $p^0 \equiv p_+^0 = +E_{\vec{p}}/c$  erfüllt. Mit  $(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p})^2 \equiv \vec{p}^2$  erhalten wir nämlich

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} (E_{\vec{p}}/c - mc) \mathbb{1}_2 & -\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p} \\ \hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p} & (-E_{\vec{p}}/c - mc) \mathbb{1}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 \chi_s \\ \frac{\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p}}{E_{\vec{p}}/c + mc} \chi_s \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{(E_{\vec{p}}/c)^2 - m^2 c^2}{E_{\vec{p}}/c + mc} - \frac{\vec{p}^2}{E_{\vec{p}}/c + mc} \\ \hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p} + \left(-\frac{E_{\vec{p}}}{c} - mc\right) \frac{\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p}}{E_{\vec{p}}/c + mc} \end{pmatrix} \chi_s \equiv 0. \end{aligned} \quad (1.131)$$

Ganz analog setzen wir  $p_-^0 = -E_{\vec{p}}/c$  in Gl. (1.98) ein, um die Lösungen negativer Energie zu bestimmen,

$$\begin{aligned} 0 &= \begin{pmatrix} -E_{\vec{p}}/c - mc & 0 & -p^3 & -p^1 + ip^2 \\ 0 & -E_{\vec{p}}/c - mc & -p^1 - ip^2 & p^3 \\ p^3 & p^1 - ip^2 & E_{\vec{p}}/c - mc & 0 \\ p^1 + ip^2 & -p^3 & 0 & E_{\vec{p}}/c - mc \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -(E_{\vec{p}}/c + mc)a_1 - p^3 a_3 - (p^1 - ip^2)a_4 \\ -(E_{\vec{p}}/c + mc)a_2 - (p^1 + ip^2)a_3 + p^3 a_4 \\ p^3 a_1 + (p^1 - ip^2)a_2 + (E_{\vec{p}}/c - mc)a_3 \\ (p^1 + ip^2)a_1 - p^3 a_2 + (E_{\vec{p}}/c - mc)a_4 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.132)$$

Nun bleiben  $a_3, a_4$  unbestimmt, während

$$a_1 = -c \frac{p^3 a_3 + (p^1 - ip^2)a_4}{E_{\vec{p}} + mc^2}, \quad a_2 = -c \frac{(p^1 + ip^2)a_3 - p^3 a_4}{E_{\vec{p}} + mc^2}, \quad (1.133)$$

Mit der Wahl  $a_3 = -1, a_4 = 0$  bzw.  $a_4 = 1, a_3 = 0$  erhält man die folgenden Spinoren,

$$\hat{a}_-^{(1)} = \mathcal{N}_- \begin{pmatrix} c \frac{p^3}{E_{\vec{p}} + mc^2} \\ c \frac{p^1 + ip^2}{E_{\vec{p}} + mc^2} \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{a}_-^{(2)} = \mathcal{N}_- \begin{pmatrix} -c \frac{p^1 - ip^2}{E_{\vec{p}} + mc^2} \\ c \frac{p^3}{E_{\vec{p}} + mc^2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (1.134)$$

wobei  $\mathcal{N}_-$  wiederum eine geeignet zu bestimmende Normierungskonstante ist. Eine übliche Wahl ist  $\mathcal{N}_- \equiv \mathcal{N}_+ = \sqrt{E_{\vec{p}} + mc^2}$ . Auch diese beiden Lösungen sind orthogonal (Beweis als Übungsaufgabe),

$$\hat{a}_-^{(\alpha)\dagger} \hat{a}_-^{(\beta)} = 2 E_{\vec{p}} \delta_{\alpha\beta}, \quad \alpha, \beta = 1, 2. \quad (1.135)$$

Mit den 2-Spinoren

$$\eta_{-s} \equiv -i \hat{\sigma}_2 \chi_s, \quad s = \pm \frac{1}{2}, \quad (1.136)$$

also explizit

$$\begin{aligned}\eta_{\downarrow} = \eta_{-1/2} &\equiv -i\hat{\sigma}_2 \chi_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ \eta_{\uparrow} = \eta_{+1/2} &\equiv -i\hat{\sigma}_2 \chi_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix},\end{aligned}$$

kann man diese Lösungen sehr kompakt in der Form

$$v(-\vec{p}, s) = \sqrt{E_{\vec{p}} + mc^2} \begin{pmatrix} c \frac{\hat{\vec{\sigma}} \cdot (-\vec{p})}{E_{\vec{p}} + mc^2} \eta_{-s} \\ \eta_{-s} \end{pmatrix}, \quad s = \pm \frac{1}{2}, \quad (1.137)$$

bzw.

$$v(\vec{p}, s) = \sqrt{E_{\vec{p}} + mc^2} \begin{pmatrix} c \frac{\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p}}{E_{\vec{p}} + mc^2} \eta_{-s} \\ \eta_{-s} \end{pmatrix}, \quad s = \pm \frac{1}{2}, \quad (1.138)$$

schreiben. Dies ist der Dirac-Spinor zu **negativer Energie** und **Spin**  $s = \pm 1/2$ . Man beachte, dass die Vorzeichenkonvention so gewählt ist, dass  $v(\vec{p}, s)$  ein **Antiteilchen** mit **Energie**  $cp_+^0 = +E_{\vec{p}}$ , **Impuls**  $+\vec{p}$  und **Spin**  $s$  beschreibt, welches sich wie eine Lösung **negativer Energie**  $cp_-^0 = -E_{\vec{p}}$  mit **Impuls**  $-\vec{p}$  und **Spin**  $-s$  verhält. In der Tat erfüllt  $v(-\vec{p}, s)$  die ursprüngliche Dirac-Gleichung für negative Energien  $cp_-^0 = -E_{\vec{p}}$ ,

$$(\not{p} - mc) v(-\vec{p}, s) = 0, \quad (1.139)$$

wie man sich durch explizites Nachrechnen überzeugt:

$$\begin{aligned}&\begin{pmatrix} (-E_{\vec{p}}/c - mc)\mathbb{1}_2 & -\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p} \\ \hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p} & (E_{\vec{p}}/c - mc)\mathbb{1}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p}}{E_{\vec{p}}/c + mc} \eta_{-s} \\ \mathbb{1}_2 \eta_{-s} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \left(\frac{E_{\vec{p}}}{c} + mc\right) \frac{\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p}}{E_{\vec{p}}/c + mc} - \hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p} \\ -\frac{\vec{p}^2}{E_{\vec{p}}/c + mc} + \frac{(E_{\vec{p}}/c)^2 - m^2 c^2}{E_{\vec{p}}/c + mc} \end{pmatrix} \eta_{-s} \equiv 0. \end{aligned} \quad (1.140)$$

Andererseits erfüllt  $v(\vec{p}, s)$  die **Antiteilchen-Dirac-Gleichung**

$$(\not{p} + mc) v(\vec{p}, s) = 0, \quad (1.141)$$

für **positive Energie**  $cp_+^0 = +E_{\vec{p}}$ ,

$$\begin{aligned}&\begin{pmatrix} (E_{\vec{p}}/c + mc)\mathbb{1}_2 & -\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p} \\ \hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p} & (-E_{\vec{p}}/c + mc)\mathbb{1}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p}}{E_{\vec{p}}/c + mc} \eta_{-s} \\ \mathbb{1}_2 \eta_{-s} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \left(\frac{E_{\vec{p}}}{c} + mc\right) \frac{\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p}}{E_{\vec{p}}/c + mc} - \hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{p} \\ \frac{\vec{p}^2}{E_{\vec{p}}/c + mc} - \frac{(E_{\vec{p}}/c)^2 - m^2 c^2}{E_{\vec{p}}/c + mc} \end{pmatrix} \eta_{-s} \equiv 0. \end{aligned} \quad (1.142)$$

Wir sind nun in der Lage, die **allgemeine Lösung der freien Dirac-Gleichung** anzugeben. Für **festes**  $\vec{p}$  und **festes**  $s$  haben wir eine Superposition von Lösungen zu positiver und negativer Energie, die wir mit Hilfe der entsprechenden Dirac-Spinoren schreiben,

$$\psi_{\vec{p},s}(X) = b_+ u(\vec{p}, s) \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (E_{\vec{p}} t - \vec{p} \cdot \vec{r}) \right] + d_- v(-\vec{p}, s) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (E_{\vec{p}} t + \vec{p} \cdot \vec{r}) \right] . \quad (1.143)$$

Für die allgemeine Lösung müssen wir über die Spin-Einstellmöglichkeiten  $s = \pm 1/2$  summieren und über alle Werte des Impulses  $\vec{p}$  integrieren.

$$\begin{aligned} \psi(X) = \sum_{s=\pm 1/2} \int \frac{d^3 \vec{p}}{2(2\pi\hbar)^3 E_{\vec{p}}} \left\{ b(\vec{p}, s) u(\vec{p}, s) \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (E_{\vec{p}} t - \vec{p} \cdot \vec{r}) \right] \right. \\ \left. + d^*(-\vec{p}, s) v(-\vec{p}, s) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (E_{\vec{p}} t + \vec{p} \cdot \vec{r}) \right] \right\} . \quad (1.144) \end{aligned}$$

Hier haben wir die Amplituden mit Impuls und Spin gekennzeichnet und eine Umbenennung vorgenommen,

$$b_+ \longrightarrow b(\vec{p}, s) , \quad d_- \longrightarrow d^*(-\vec{p}, s) .$$

Zum Schluss substituieren wir im zweiten Term noch  $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$ , um die übliche Form der allgemeinen Lösung zu erhalten,

$$\begin{aligned} \psi(X) = \sum_{s=\pm 1/2} \int \frac{d^3 \vec{p}}{2(2\pi\hbar)^3 E_{\vec{p}}} \left[ b(\vec{p}, s) u(\vec{p}, s) \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \vec{p}^\mu x_\mu \right) \right. \\ \left. + d^*(\vec{p}, s) v(\vec{p}, s) \exp \left( \frac{i}{\hbar} \vec{p}^\mu x_\mu \right) \right] , \quad (1.145) \end{aligned}$$

mit dem 4-Impulsvektor

$$\vec{p}^\mu = \left( \frac{E_{\vec{p}}}{c}, \vec{p} \right)^T , \quad (1.146)$$

der auf der durch die relativistische Energie-Impuls-Beziehung gegebenen **Massenschale** liegt,  $p^0 \equiv E_{\vec{p}}/c$ .

Die Teilchen- und Antiteilchen-Spinoren  $u(\vec{p}, s)$  und  $v(\vec{p}, s)$  erfüllen folgende Relationen (Beweis als Übungsaufgabe):

$$\begin{aligned} \bar{u}(\vec{p}, s) u(\vec{p}, r) &= -\bar{v}(\vec{p}, s) v(\vec{p}, r) = 2mc^2 \delta_{sr} , \\ \bar{u}(\vec{p}, s) v(\vec{p}, r) &= \bar{v}(\vec{p}, s) u(\vec{p}, r) = 0 , \\ u^\dagger(\vec{p}, s) u(\vec{p}, r) &= v^\dagger(\vec{p}, s) v(\vec{p}, r) = 2E_{\vec{p}} \delta_{sr} , \\ u^\dagger(-\vec{p}, s) v(\vec{p}, r) &= v^\dagger(-\vec{p}, s) u(\vec{p}, r) = 0 , \\ \sum_{s=\pm 1/2} u_\alpha(\vec{p}, s) \bar{u}_\beta(\vec{p}, s) &= (c \not{\vec{p}} + mc^2)_{\alpha\beta} , \\ \sum_{s=\pm 1/2} v_\alpha(\vec{p}, s) \bar{v}_\beta(\vec{p}, s) &= (c \not{\vec{p}} - mc^2)_{\alpha\beta} . \end{aligned} \quad (1.147)$$

Für verschwindenden Impuls,  $\vec{p} = 0$ , sind die Teilchen-Spinoren (1.129) bzw. die Antiteilchen-Spinoren (1.138) proportional zu den Spinoren (1.106), welche Eigenzustände zum Spin-Operator (1.108) sind. Für  $\vec{p} \neq 0$  sind die Teilchen- und Antiteilchen-Spinoren aber nicht mehr Eigenzustände zum Spin-Operator (es sei denn,  $\vec{p} = (0, 0, p)^T$ ). Sie sind auch nicht Eigenzustände zum Helizitätsoperator, aber man kann aus ihnen durch Linearkombinationen solche konstruieren. Z.B. liefert

$$\begin{aligned}
 U(\vec{p}, +1/2) &\equiv \frac{p + p^3}{2E_{\vec{p}}} u(\vec{p}, +1/2) + \frac{p^1 + ip^2}{2E_{\vec{p}}} u(\vec{p}, -1/2) \\
 &= \sqrt{\frac{E_{\vec{p}} + mc^2}{4E_{\vec{p}}^2}} \begin{pmatrix} p + p^3 \\ p^1 + ip^2 \\ \frac{cp}{E_{\vec{p}} + mc^2} (p + p^3) \\ \frac{cp}{E_{\vec{p}} + mc^2} (p^1 + ip^2) \end{pmatrix} \quad (1.148)
 \end{aligned}$$

einen Eigenzustand zum Helizitätsoperator (1.114) mit Eigenwert  $+\hbar/2$  (Beweis als Übungsaufgabe). Als Linearkombination von zwei Teilchen-Spinoren zum Eigenwert  $+E_{\vec{p}}$  des Dirac-Hamilton-Operators  $\hat{H}_{0D}$  sind sie natürlich auch Eigenzustände zu  $\hat{H}_{0D}$ .

### 1.2.8 Diracsche Löchertheorie

3.5.2012

Es gilt nun, auf ein schwerwiegendes Problem mit dem Energiespektrum der Dirac-Gleichung hinzuweisen. Wie wir gesehen hatten, gibt es neben den Zuständen positiver Energie in einer relativistischen Theorie auch Zustände negativer Energie, vgl. Abb. 1.1(a). Wir betrachten nun ein einzelnes Teilchen der Masse  $m$ , welches sich in Ruhe befindet,  $\vec{p} = 0$ . Dieses besetzt den Zustand niedrigster Energie für die Teilchenlösungen, also  $cp_+^0 \equiv E_{\vec{p}} \equiv E_0 = +mc^2$ . Nun gibt es aber im Prinzip nichts, was dieses Teilchen daran hindert, unter **Energieabgabe**  $\Delta E \geq 2mc^2 > 0$  in einen Zustand **negativer Energie**  $cp_-^0 \leq -mc^2$  überzugehen. Da dieser Vorgang Energie liefert, also nicht energetisch verboten ist, sollte er sogar spontan ablaufen. Das Teilchen kann von einem dieser negativen Energiezustände natürlich unter weiterer Energieabgabe in einen Zustand mit noch kleinerer Energie springen usw.. Dies bedeutet, dass das System eigentlich instabil ist. Natürlich wird dies nicht beobachtet, aber warum nicht?

Um diesen Widerspruch aufzulösen, postulierte Dirac die Existenz der sog. **Dirac-See**: das Vakuum bzw. der Grundzustand des Systems ist nicht etwa der, wo **kein** Zustand, also weder solche mit positiver noch solche mit negativer Energie, mit Teilchen besetzt ist, wie in Fig. Abb. 1.1(a), sondern der, wo **alle** Zustände negativer Energie mit Teilchen besetzt sind, vgl. Abb. 1.1(c). Da es sich um Fermionen handelt, richtet sich die Zahl der Teilchen pro Zustand nach der Zahl ihrer internen Freiheitsgrade, z.B. Spin, Isospin, Farbe etc.. Alle Teilchen in einem Energiezustand müssen sich paarweise in mindestens in dieser Quantenzahlen unterscheiden.

Wie löst dies unser Problem? Da nun alle negativen Energiezustände entsprechend ihrer Entartung besetzt sind, verbietet das **Pauli-Prinzip**, dass das Teilchen im Zustand  $E_0 = mc^2$ , gleich welche Quantenzahlen es trägt, in einen Zustand negativer Energie springen kann – der Grundzustand des Systems ist nun **stabil**. Das ‘‘Vakuum’’ unseres Systems

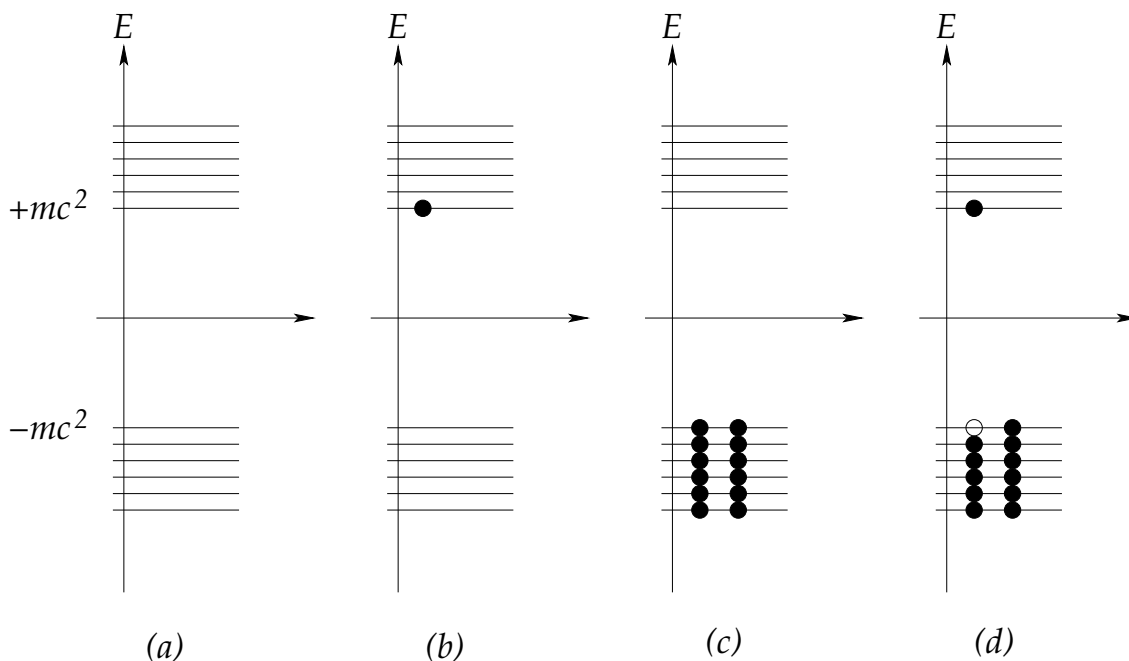


Abbildung 1.1: (a) Energiespektrum der Dirac-Gleichung. (b) Teilchen im Zustand  $E_0 = mc^2$ . (c) Dirac-See. (d) Paarerzeugung im Vakuum: ein Teilchen aus den besetzten negativen Energiezuständen wird in einen Zustand positiver Energie gehoben, zurück bleibt ein "Loch".

ist aber nicht wirklich leer, es enthält unendlich viele Teilchen, die zusammengenommen unendlich viel (negative) Energie tragen. Dies ist aber nicht weiter dramatisch: man mißt einfach alle Energien **relativ** zur (unendlichen) Energie des Vakuums. In der Quantenfeldtheorie werden wir lernen, dass es sich hierbei um einen Fall der sog. "Renormierung" handelt. Dabei geht es um ein systematisches Verfahren, wie man Unendlichkeiten in einer Theorie beseitigen und physikalisch sinnvolle Resultate erhalten kann.

Nun stelle man sich das Vakuum wie in Abb. 1.1(c) gezeigt vor und rege ein Teilchen aus den besetzten Zuständen negativer Energie in einen Zustand positiver Energie an. Offenbar ist dazu **mindestens** die Energie  $\Delta E = 2mc^2$  nötig, nämlich wenn ein Teilchen aus dem obersten Zustand negativer Energie,  $-E_0 = -mc^2$ , in den niedrigsten Zustand positiver Energie,  $E_0 = +mc^2$ , angeregt wird, vgl. Abb. 1.1(d). Dadurch entsteht aus dem Vakuum ein "Teilchen-Loch-Paar". Das "**Loch**" ist aber genau das **Antiteilchen**; man hat durch die Energiezufuhr  $\Delta E = 2mc^2$  ein **Teilchen-Antiteilchen-Paar** aus dem Vakuum erzeugt. Dies ist die sog. **spontane Paarerzeugung**. Die dafür benötigte Energie  $\Delta E = 2mc^2$  kann man z.B. durch Einstrahlen hinreichend starker elektromagnetischer Felder bereitstellen. Umgekehrt können Teilchen und Antiteilchen auch wieder spontan rekombinieren. Dann springt das Teilchen in das Loch in den negativen Energiezuständen. Dadurch wird eine Energie  $\Delta E = 2mc^2$  (z.B. in Form elektromagnetischer Strahlung) freigesetzt. Dies ist die **spontane Paarvernichtung**.

Selbstverständlich kann man auch Teilchen und Antiteilchen mit nichtverschwindendem



Impuls  $\vec{p} \neq 0$  erzeugen. Im Ruhesystem des Paares muss aber das Antiteilchen aufgrund der Impulserhaltung immer den umgekehrten Impuls wie das Teilchen tragen. Aufgrund der Spinerhaltung muss das Antiteilchen auch umgekehrten Spin wie das Teilchen tragen. Das ‐Loch‐, also das **Fehlen** eines Teilchens mit Impuls  $\vec{p}$  und Spin  $s$  in den **negativen Energiezuständen** (weil das entsprechende Teilchen nun in einen positiven Energiezustand gesprungen ist) wirkt sich wie die **Anwesenheit** eines Antiteilchens mit Impuls  $-\vec{p}$  und Spin  $-s$  aus.

In gewissem Sinne hat die Dirac-See Ähnlichkeit mit der Fermi-See in einem entarteten Fermi-Gas. Auch hier sind alle Zustände bis zur Fermi-Kante mit Fermionen entsprechend ihrer Entartung besetzt. Auch hier kann man Fermionen aus Zuständen unterhalb in Zustände oberhalb der Fermi-Kante anregen, wobei ein ‐Loch‐ in der Fermi-See zurückbleibt. Allerdings kostet diese Anregung in einem nichtwechselwirkenden Fermi-Gas keine Energie. Anders verhält es sich in einem Supraleiter. Dort gibt es eine Energielücke zwischen Zuständen unterhalb und oberhalb der Fermi-Kante, den sog. ‐Gap‐. Im Energiespektrum der Dirac-Gleichung gibt es auch einen solchen Gap, dort ist er gerade  $2mc^2$ .

Zum Schluss dieses Abschnitts bemerken wir noch, dass auch das Energiespektrum der Klein-Gordon-Gleichung die Form hat wie in Abb. 1.1(a) gezeigt. Auch hier sollte das Vakuum instabil sein, da ein Teilchen unter stetiger Energieabgabe immer niedrigere Energiezustände annehmen kann. Hier ist allerdings keine solche Lösung dieses Problems durch eine voll besetzte Dirac-See möglich: da es sich bei skalaren Teilchen (wie sie durch die Klein-Gordon-Gleichung beschrieben werden) um **Bosonen** handelt, für die es kein Pauli-Prinzip gibt, hindert sie nichts daran, auch in Zustände niedrigerer Energie zu springen, auch wenn diese schon mit Teilchen mit identischen Quantenzahlen besetzt sind.

### 1.2.9 Die Dirac-Gleichung in externen Feldern

Koppeln wir ein externes elektromagnetisches Feld an, so ist wie im Fall der Klein-Gordon-Gleichung der 4-Impuls-Operator  $\hat{p}^\mu$  durch den **kanonischen 4-Impuls-Operator**  $\hat{p}^\mu - \mathbf{q}A^\mu$  zu ersetzen, vgl. Gl. (1.33). Dann lautet die Dirac-Gleichung

$$[\not{\hat{p}} - \mathbf{q}\not{A}(X) - mc] \psi(X) = [i\hbar\not{D} - \mathbf{q}\not{A}(X) - mc] \psi(X) \equiv [i\hbar\not{D} - mc] \psi(X) = 0, \quad (1.149)$$

mit der kovarianten Ableitung (1.35). Durch Multiplikation mit  $c\gamma^0$  und Umstellen von Termen kann man dies in die Form (1.46) bringen,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \vec{r}) = \left\{ c \hat{\alpha} \cdot \left[ \hat{\vec{p}} - \mathbf{q} \vec{A}(t, \vec{r}) \right] + \hat{\beta} mc^2 + \mathbf{q} \varphi(t, \vec{r}) \right\} \psi(t, \vec{r}) \equiv \hat{H}_D \psi(t, \vec{r}), \quad (1.150)$$

mit dem **Dirac-Hamilton-Operator** im externen elektromagnetischen Feld

$$\hat{H}_D \equiv c \hat{\alpha} \cdot \left[ \hat{\vec{p}} - \mathbf{q} \vec{A}(t, \vec{r}) \right] + \hat{\beta} mc^2 + \mathbf{q} \varphi(t, \vec{r}). \quad (1.151)$$

### 1.2.10 Ladungskonjugation

Wir definieren den sog. **ladungskonjugierten** Dirac-Spinor durch die Gleichung

$$\psi_C \equiv C \gamma^0 \psi^*, \quad (1.152)$$

wobei die sog. **Ladungskonjugationsmatrix** in der Dirac-Darstellung

$$C \equiv -i\gamma^0\gamma^2 = -i\hat{\alpha}^2 = -i \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_2 \\ \hat{\sigma}_2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.153)$$

ist. Aufgrund der Definition von  $\gamma^0$  ist dann

$$\psi_C = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \psi^* = \begin{pmatrix} \psi_4^* \\ -\psi_3^* \\ -\psi_2^* \\ \psi_1^* \end{pmatrix}. \quad (1.154)$$

Abgesehen von der komplexen Konjugation vertauscht der Ladungskonjugationsoperator obere und untere Komponenten des 4-Spinors, sowie dann jeweils noch die Komponenten der 2-Spinoren. Wir erwarten also, dass sowohl Energie wie auch Spin eines Teilchens durch die Ladungskonjugation ihr Vorzeichen ändern. Wir werden dies im folgenden präzisieren. Zunächst aber notieren wir noch eine alternative (und gebräuchlichere) Schreibweise für  $\psi_C$ . Weil  $\gamma^0$  (in der Dirac-Darstellung) reell ist,  $\gamma^0 = (\gamma^0)^*$ , gilt

$$\psi_C = C(\gamma^0\psi)^* = C[(\gamma^0\psi)^\dagger]^T = C[\psi^\dagger(\gamma^0)^\dagger]^T = C(\psi^\dagger\gamma^0)^T \equiv C\bar{\psi}^T, \quad (1.155)$$

wobei wir ausgenutzt haben, dass  $\gamma^0$  hermitesch ist und dass  $\dagger = *T$ , also  $* = \dagger T$ .

Die Ladungskonjugationsmatrix besitzt folgende Eigenschaften:

- (i)  $C^2 = (-i)^2\gamma^0\gamma^2\gamma^0\gamma^2 = (\gamma^0)^2(\gamma^2)^2 = -\mathbb{1}$ .
- (ii) Aus (i) folgt, durch Multiplikation von rechts mit  $C^{-1}$ , dass  $C = -C^{-1}$ .
- (iii)  $C^\dagger = i(\gamma^2)^\dagger(\gamma^0)^\dagger = -i\gamma^2\gamma^0 = i\gamma^0\gamma^2 = -C$ .
- (iv) Aus (iii) folgt die Unitarität von  $C$ ,  $C^\dagger = C^{-1}$ .
- (v) Aus der expliziten Darstellung von  $C$  folgt  $C = -C^T$ .
- (vi)  $C\gamma^\mu C^{-1} = -(\gamma^\mu)^T$ .

**Beweis:** Wir betrachten die Fälle  $\mu = 0, 2$  und  $\mu = 1, 3$  separat:

(a)  $\mu = 0, 2$ :

$$C\gamma^{0,2}C^{-1} = -i\gamma^0\gamma^2\gamma^{0,2}C^{-1} = \gamma^{0,2}(i\gamma^0\gamma^2)C^{-1} = \gamma^{0,2}(-C)C^{-1} = -\gamma^{0,2} \equiv -(\gamma^{0,2})^T,$$

wobei wir die explizite Dirac-Darstellung der Gamma-Matrizen benutzt haben.

(b)  $\mu = 1, 3$ :

$$C\gamma^{1,3}C^{-1} = -i\gamma^0\gamma^2\gamma^{1,3}C^{-1} = \gamma^{1,3}(-i\gamma^0\gamma^2)C^{-1} \equiv \gamma^{1,3} = -(\gamma^{1,3})^T,$$

wobei wir wieder die explizite Dirac-Darstellung der Gamma-Matrizen benutzt haben, q.e.d.

- (vii) Aus (vi) folgt durch Multiplikation von  $C^{-1} = -C$  von rechts und von  $C = -C^{-1}$  von links, dass  $C(\gamma^\mu)^T C^{-1} = -\gamma^\mu$ .

Mit diesen Eigenschaften berechnen wir den **Dirac-adjungierten ladungskonjugierten Spinor**,

$$\begin{aligned}\bar{\psi}_C &\equiv \psi_C^\dagger \gamma^0 = (C\bar{\psi}^T)^\dagger \gamma^0 = \bar{\psi}^* C^\dagger \gamma^0 = (\psi^\dagger \gamma^0)^* C^\dagger \gamma^0 = \psi^T \gamma^0 (-C) \gamma^0 \\ &= i \psi^T \gamma^0 \gamma^0 \gamma^2 \gamma^0 = -i \psi^T \gamma^0 \gamma^2 = \psi^T C.\end{aligned}\quad (1.156)$$

Was für Objekte werden durch den ladungskonjugierten Spinor  $\psi_C$  beschrieben? Dazu bilden wir das Komplex-Konjugierte der Dirac-Gleichung in externen Feldern (1.150) und multiplizieren von links mit  $C\gamma^0$ :

$$\begin{aligned}-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C\gamma^0 \psi^* &= C\gamma^0 \left[ c\gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \left( +i\hbar \vec{\nabla} - \mathbf{q}\vec{A} \right) + \mathbf{q}\varphi + \gamma^0 mc^2 \right] \psi^* \\ &= \left[ cC\vec{\gamma}^* C^{-1} \cdot \left( i\hbar \vec{\nabla} - \mathbf{q}\vec{A} \right) C\gamma^0 \gamma^0 + \mathbf{q}\varphi C\gamma^0 + mc^2 C\gamma^0 \gamma^0 \right] \psi^*.\end{aligned}$$

Die Dirac-Matrizen  $\gamma^i$  sind antihermitesch, also  $(\gamma^i)^* = [(\gamma^i)^\dagger]^T = -(\gamma^i)^T$ , also mit Eigenschaft (vii)  $C\vec{\gamma}^* C^{-1} = +\vec{\gamma}$ . Dann ergibt sich mit  $C\gamma^0 \equiv -\gamma^0 C$  und der Definition (1.152)

$$\begin{aligned}-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_C &= \left[ -c\vec{\gamma} \cdot \left( i\hbar \vec{\nabla} - \mathbf{q}\vec{A} \right) \gamma^0 + \mathbf{q}\varphi - \gamma^0 mc^2 \right] \psi_C \\ &= \left[ c\gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \left( i\hbar \vec{\nabla} - \mathbf{q}\vec{A} \right) + \mathbf{q}\varphi - \gamma^0 mc^2 \right] \psi_C.\end{aligned}\quad (1.157)$$

Multiplikation mit  $-1$  ergibt

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_C = \left[ c\gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \left( -i\hbar \vec{\nabla} + \mathbf{q}\vec{A} \right) - \mathbf{q}\varphi + \gamma^0 mc^2 \right] \psi_C.\quad (1.158)$$

Dies ist offenbar die Dirac-Gleichung für ein Teilchen der Ladung  $-\mathbf{q}$ . Dies erklärt die Bezeichnung ‘‘Ladungskonjugation’’ für die Operation (1.152). Der ladungskonjugierte Spinor gehorcht also derselben Gleichung wie der ursprüngliche Spinor, man muss aber das Vorzeichen der Ladung umdrehen.

Kombinieren wir diesen Befund mit der Tatsache, dass die Ladungskonjugation offensichtlich auch obere und untere Komponenten des 4-Spinors sowie den Spin eines Teilchens umdreht, vgl. Gl. (1.154), so legt dies nahe, dass die **Ladungskonjugation Teilchen in Antiteilchen** umwandelt. Dieser Verdacht wird dadurch erhärtet, dass wir die Ladungskonjugation (1.152) explizit für den Spinor  $u(\vec{p}, s)$  aus Gl. (1.129) betrachten,

$$\begin{aligned}u_C(\vec{p}, s) &= C\gamma^0 u^*(\vec{p}, s) = \sqrt{E_{\vec{p}} + mc^2} \begin{pmatrix} 0 & i\hat{\sigma}_2 \\ -i\hat{\sigma}_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_s^* \\ c \frac{\hat{\sigma}^* \cdot \vec{p}}{E_{\vec{p}} + mc^2} \chi_s^* \end{pmatrix} \\ &= \sqrt{E_{\vec{p}} + mc^2} \begin{pmatrix} ic \frac{\hat{\sigma}_2 \hat{\sigma}^* \cdot \vec{p}}{E_{\vec{p}} + mc^2} \chi_s^* \\ -i\hat{\sigma}_2 \chi_s^* \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (1.159)$$

Es gilt ferner

$$\hat{\sigma}_2 \hat{\sigma}^* = -\hat{\sigma} \hat{\sigma}_2, \quad (1.160)$$

weil  $\hat{\sigma}_{1,3}$  reell sind und dies daher aufgrund der Antikommutationsrelation der Pauli-Matrizen gilt, während  $\hat{\sigma}_2$  rein imaginär ist und diese Gleichung daher identisch erfüllt ist. Also erhalten wir

$$u_C(\vec{p}, s) = \sqrt{E_{\vec{p}} + mc^2} \begin{pmatrix} c \frac{\hat{\sigma} \cdot \vec{p}}{E_{\vec{p}} + mc^2} (-i) \hat{\sigma}_2 \chi_s^* \\ -i \hat{\sigma}_2 \chi_s^* \end{pmatrix} \equiv v(\vec{p}, s), \quad (1.161)$$

wobei wir die Tatsache, dass  $\chi_s$  reell ist, und die Definition (1.136) des Spinors  $\eta_{-s}$  benutzt haben. Der **ladungskonjugierte Teilchen-Spinor**  $u_C(\vec{p}, s)$  ist also identisch mit dem **Antiteilchen-Spinor**  $v(\vec{p}, s)$ ! Analog zeigt man

$$v_C(\vec{p}, s) = u(\vec{p}, s). \quad (1.162)$$

Die Ladungskonjugationsoperation wandelt also offensichtlich Teilchen in Antiteilchen um und umgekehrt.

8.5.2012

### 1.2.11 Nichtrelativistischer Grenzfall – Pauli-Gleichung

Wir erwarten, dass sich im **nichtrelativistischen Grenzfall** die freie Dirac-Gleichung auf die Schrödinger-Gleichung reduziert. Die Dirac-Gleichung in externen elektromagnetischen Feldern sollte sich dagegen auf die **Pauli-Gleichung** reduzieren. Wir betrachten im folgenden gleich diesen Fall. Die Schrödinger-Gleichung ergibt sich einfach dadurch, dass wir im Endresultat die elektromagnetischen Felder auf null setzen.

Da weder in der Schrödinger- noch in der Pauli-Gleichung Antiteilchen auftreten, müssen wir diese zunächst aus der Dirac-Gleichung eliminieren. Dies geht, indem wir die Dirac-Gleichung in ein gekoppeltes System von zwei Gleichungen für die oberen und unteren Komponenten des 4-Spinors  $\psi(X)$  aufspalten. Dazu schreiben wir

$$\psi \equiv \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad (1.163)$$

mit den 2-Spinoren  $\phi$  und  $\chi$ . Hierbei beschreibt der 2-Spinor  $\phi$  für Lösungen positiver Energie, also **Teilchen**, während der 2-Spinor  $\chi$  Lösungen negativer Energie, also **Antiteilchen** beschreibt. Setzen wir diese Aufspaltung in die Dirac-Gleichung (1.150) ein, so ergibt sich mit Hilfe der Dirac-Darstellung (1.67) für die Matrizen  $\hat{\alpha}^i, \hat{\beta}$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi &= (mc^2 + \mathbf{q}\varphi) \phi + c \hat{\sigma} \cdot (\hat{\vec{p}} - \mathbf{q}\vec{A}) \chi, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi &= (-mc^2 + \mathbf{q}\varphi) \chi + c \hat{\sigma} \cdot (\hat{\vec{p}} - \mathbf{q}\vec{A}) \phi. \end{aligned} \quad (1.164)$$

In einer nichtrelativistischen Theorie spielt die Ruheenergie  $E_0 = mc^2$  keine Rolle. Wir können sie von den 2-Spinoren in Form einer Phase abspalten,

$$\begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \equiv \exp\left(-\frac{i}{\hbar} mc^2 t\right) \begin{pmatrix} \phi_{\text{nr}} \\ \chi_{\text{nr}} \end{pmatrix}. \quad (1.165)$$

Setzen wir diesen Ansatz in das Gleichungssystem (1.164) ein, so erhalten wir wegen

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} mc^2 t\right) \left(mc^2 + i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right) \begin{pmatrix} \phi_{\text{nr}} \\ \chi_{\text{nr}} \end{pmatrix}$$

folgendes Gleichungssystem für die **nichtrelativistischen** 2-Spinoren  $\phi_{\text{nr}}$  und  $\chi_{\text{nr}}$ ,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_{\text{nr}} &= \mathbf{q}\varphi \phi_{\text{nr}} + c \hat{\sigma} \cdot \left(\hat{\vec{p}} - \mathbf{q}\vec{A}\right) \chi_{\text{nr}}, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi_{\text{nr}} &= -(2mc^2 - \mathbf{q}\varphi) \chi_{\text{nr}} + c \hat{\sigma} \cdot \left(\hat{\vec{p}} - \mathbf{q}\vec{A}\right) \phi_{\text{nr}}. \end{aligned} \quad (1.166)$$

Falls der Antiteilchen-Spinor  $\chi_{\text{nr}}(t, \vec{r})$  ein Eigenzustand zum Energie-Operator ist, können wir die linke Seite der zweiten Gleichung durch  $E_{\text{nr}}^{(\chi)} \chi_{\text{nr}}$  ersetzen, mit der nichtrelativistischen Energie  $E_{\text{nr}}^{(\chi)}$  des 2-Spinors  $\chi_{\text{nr}}$ . Wir erwarten aber im nichtrelativistischen Grenzfall, dass die Ruheenergie alle anderen Energien bei weitem übersteigt,

$$\frac{E_{\text{nr}}^{(\chi)}}{2mc^2} \sim \frac{\mathbf{q}\varphi}{2mc^2} \ll 1.$$

Dann können wir unter Vernachlässigung von Termen von der Ordnung  $E_{\text{nr}}^{(\chi)}/(2mc^2)$  und  $\mathbf{q}\varphi/(2mc^2)$  die zweite Gleichung (1.166) explizit nach  $\chi_{\text{nr}}$  auflösen,

$$\chi_{\text{nr}} = \frac{c}{2mc^2} \hat{\sigma} \cdot \left(\hat{\vec{p}} - \mathbf{q}\vec{A}\right) \phi_{\text{nr}} + O\left(\frac{E_{\text{nr}}^{(\chi)}}{2mc^2}, \frac{\mathbf{q}\varphi}{2mc^2}\right). \quad (1.167)$$

Setzen wir dies in die erste Gleichung (1.166) ein, so erhalten wir unter Vernachlässigung parametrisch kleiner Terme eine Gleichung, in der **ausschließlich** der nichtrelativistische Teilchen-Spinor  $\phi_{\text{nr}}$  auftritt,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_{\text{nr}} &\simeq \mathbf{q}\varphi \phi_{\text{nr}} + \frac{c^2}{2mc^2} \hat{\sigma} \cdot \left(\hat{\vec{p}} - \mathbf{q}\vec{A}\right) \hat{\sigma} \cdot \left(\hat{\vec{p}} - \mathbf{q}\vec{A}\right) \phi_{\text{nr}} \\ &= \left[\frac{1}{2m} \hat{\sigma} \cdot \left(\hat{\vec{p}} - \mathbf{q}\vec{A}\right) \hat{\sigma} \cdot \left(\hat{\vec{p}} - \mathbf{q}\vec{A}\right) + \mathbf{q}\varphi\right] \phi_{\text{nr}}. \end{aligned} \quad (1.168)$$

Allgemein gilt

$$\begin{aligned} \hat{\sigma} \cdot \vec{a} \hat{\sigma} \cdot \vec{b} &= \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j a^i b^j = \frac{1}{2} (\{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\} + [\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j]) a^i b^j \\ &= (\delta^{ij} + i \epsilon^{ijk} \hat{\sigma}_k) a^i b^j \equiv \vec{a} \cdot \vec{b} + i \hat{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b}). \end{aligned} \quad (1.169)$$

In Gl. (1.168) hat es den Anschein, als ob  $\vec{a} \equiv \vec{b} = \hat{\vec{p}} - \mathbf{q}\vec{A}$ , also dass der Term mit dem Kreuzprodukt in Gl. (1.169) nicht auftritt. Dies ist aber nicht richtig, da  $\hat{\vec{p}}$  ein Operator ist und deshalb auf  $\vec{A}(t, \vec{r})$  im zweiten Faktor wirkt. Wir berechnen daher sorgfältig

$$\begin{aligned} \hat{\sigma} \cdot \left[\left(\hat{\vec{p}} - \mathbf{q}\vec{A}\right) \times \left(\hat{\vec{p}} - \mathbf{q}\vec{A}\right)\right] &= \epsilon^{ijk} \hat{\sigma}_i (\hat{p}^j - \mathbf{q}A^j) (\hat{p}^k - \mathbf{q}A^k) \\ &= \epsilon^{ijk} \hat{\sigma}_i [\hat{p}^j \hat{p}^k - \mathbf{q}(\hat{p}^j A^k) - \mathbf{q}(A^k \hat{p}^j + A^j \hat{p}^k) + \mathbf{q}^2 A^j A^k] \\ &= i\hbar \mathbf{q} \epsilon^{ijk} \hat{\sigma}_i \partial_j A^k \equiv i\hbar \mathbf{q} \hat{\sigma} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \\ &\equiv i\hbar \mathbf{q} \hat{\sigma} \cdot \vec{B}. \end{aligned} \quad (1.170)$$

Hierbei haben wir mehrfach die Antisymmetrie von  $\epsilon^{ijk}$  in den letzten beiden Indizes, sowie die Definition  $\vec{B} \equiv \vec{\nabla} \times \vec{A}$  des magnetischen Induktionsfeldes ausgenutzt. Eingesetzt in Gl. (1.169) ergibt sich für Gl. (1.168)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_{\text{nr}} = \left[ \frac{1}{2m} \left( \hat{p} - \mathbf{q}\vec{A} \right)^2 + \mathbf{q}\varphi - \frac{\mathbf{q}\hbar}{2m} \hat{\sigma} \cdot \vec{B} \right] \phi_{\text{nr}} . \quad (1.171)$$

Dies ist die **Pauli-Gleichung**. Für Elektronen mit  $\mathbf{q} = -e$  und mit dem **Bohrschen Magneton**

$$\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m} , \quad (1.172)$$

vgl. Gl. (6.11) der Vorlesung “Quantenmechanik I”, nimmt sie die bekannte Form

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_{\text{nr}} = \left[ \frac{1}{2m} \left( \hat{p} + e\vec{A} \right)^2 - e\varphi + \mu_B \hat{\sigma} \cdot \vec{B} \right] \phi_{\text{nr}} \quad (1.173)$$

an, vgl. Gl. (6.32) der Vorlesung “Quantenmechanik I”. Man beachte, dass der **Landé-Faktor**  $g = 2$  automatisch korrekt herauskommt, vgl. Diskussion in Abschnitt 6.2 der Vorlesung “Quantenmechanik I”.

### 1.2.12 Die Spin-Bahn-Kopplung

In der Herleitung der Pauli-Gleichung im vorangegangenen Abschnitt hatten wir ab Gl. (1.167) eine Reihe von Termen kleiner Ordnung vernachlässigt. Führt man die Rechnung etwas sorgfältiger ohne diese Approximation durch, ergibt sich eine ganze Reihe von zusätzlichen Termen, von denen wir hier lediglich einige besprechen wollen (eine weiterführende Diskussion findet man in der Literatur [4]). Wir vernachlässigen dazu nach wie vor **alle** Terme der Ordnung  $O(E_{\text{nr}}^{(x)}/2mc^2)$  in Gl. (1.167), aber wir berücksichtigen Terme in **erster Ordnung**  $O(\mathbf{q}\varphi/2mc^2)$ . Gleichung (1.167) lautet dann

$$\begin{aligned} \chi_{\text{nr}} &= \frac{c}{2mc^2 - \mathbf{q}\varphi} \hat{\sigma} \cdot \left( \hat{p} - \mathbf{q}\vec{A} \right) \phi_{\text{nr}} + O\left( \frac{E_{\text{nr}}^{(x)}}{2mc^2} \right) \\ &= \frac{1}{2mc} \left( 1 + \frac{\mathbf{q}\varphi}{2mc^2} \right) \hat{\sigma} \cdot \left( \hat{p} - \mathbf{q}\vec{A} \right) \phi_{\text{nr}} + O\left( \frac{E_{\text{nr}}^{(x)}}{2mc^2}, \frac{\mathbf{q}^2\varphi^2}{4m^2c^4} \right) . \end{aligned} \quad (1.174)$$

Konkret interessieren wir uns auf den Effekt des zusätzlichen Terms auf ein Elektron,  $\mathbf{q} = -e$ , in wasserstoffähnlichen Atomen (s. auch Abschnitt 1.2.15), wo lediglich ein skalares (Coulomb-)Potential  $\varphi(r) \equiv +Ze/(4\pi\epsilon_0 r)$ , aber kein 3-Vektorpotential wirkt,  $\vec{A} = 0$ . Betrachten wir also die erste Gleichung (1.166) für diesen Fall und setzen Gl. (1.174) ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_{\text{nr}} &= \left[ \frac{1}{2m} \hat{\sigma} \cdot \hat{p} \left( 1 - \frac{e\varphi}{2mc^2} \right) \hat{\sigma} \cdot \hat{p} - e\varphi \right] \phi_{\text{nr}} \\ &= \left( \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e}{4m^2c^2} \hat{\sigma} \cdot \hat{p} \varphi \hat{\sigma} \cdot \hat{p} - e\varphi \right) \phi_{\text{nr}} , \end{aligned} \quad (1.175)$$

wobei wir Gl. (1.169) benutzt haben. Beim zweiten Term müssen wir beachten, dass der erste 3-Impuls-Operator auch auf das skalare Potential  $\varphi$  wirkt,

$$\begin{aligned}\hat{\sigma} \cdot \hat{p} \varphi \hat{\sigma} \cdot \hat{p} &= (\hat{\sigma} \cdot \hat{p} \varphi) \hat{\sigma} \cdot \hat{p} + \varphi (\hat{\sigma} \cdot \hat{p})^2 = -i\hbar (\hat{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \varphi) \hat{\sigma} \cdot \hat{p} + \varphi (\hat{\sigma} \cdot \hat{p})^2 \\ &= -i\hbar (\vec{\nabla} \varphi) \cdot \hat{p} + \hbar \hat{\sigma} \cdot [(\vec{\nabla} \varphi) \times \hat{p}] + \varphi \hat{p}^2,\end{aligned}\quad (1.176)$$

wobei wir wieder Gl. (1.169) benutzt haben. Für Zentralpotentiale  $\varphi \equiv \varphi(r)$  gilt

$$\vec{\nabla} \varphi(r) \equiv \frac{d\varphi}{dr} \vec{e}_r = \frac{1}{r} \frac{d\varphi}{dr} \vec{r},$$

und damit wird Gl. (1.176) zu

$$\hat{\sigma} \cdot \hat{p} \varphi \hat{\sigma} \cdot \hat{p} = -i\hbar \frac{d\varphi}{dr} \hat{p}_r + \frac{\hbar}{r} \frac{d\varphi}{dr} \hat{\sigma} \cdot \hat{L} + \varphi \hat{p}^2. \quad (1.177)$$

Mit dem Spin-Operator  $\hat{S} \equiv (\hbar/2)\hat{\sigma}$  erkennen wir, dass der zweite Term die Bedeutung einer **Spin-Bahn-Kopplung** hat,

$$\hbar \hat{\sigma} \cdot \hat{L} \equiv 2 \hat{L} \cdot \hat{S}.$$

Setzen wir alles in Gl. (1.175), so folgt

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_{\text{nr}} = \left[ \frac{1}{2m} \left( 1 - \frac{e\varphi}{2mc^2} \right) \hat{p}^2 - e\varphi + \frac{i\hbar e}{4m^2 c^2} \frac{d\varphi}{dr} \hat{p}_r - \frac{e}{2m^2 c^2 r} \frac{d\varphi}{dr} \hat{L} \cdot \hat{S} \right] \phi_{\text{nr}}. \quad (1.178)$$

Der Spin-Bahn-Kopplungsterm sorgt für die Aufspaltung der Entartung von Energieniveaus mit unterschiedlichem Drehimpuls  $\ell$ . Weil aber der Koeffizient mit dem Bohrschen Radius

$$\frac{1}{a_B} = \frac{me^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \quad (1.179)$$

folgendermaßen abgeschätzt werden kann,

$$\begin{aligned}-\frac{e}{2m^2 c^2 r} \frac{d\varphi}{dr} &= \frac{e}{2m^2 c^2} \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^3} = \frac{Z}{2m^2 c^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{a_B^3}{r^3} \frac{m^3 e^6}{(4\pi\epsilon_0)^3 \hbar^6} \\ &= \frac{Z}{2\hbar^2} \frac{a_B^3}{r^3} \alpha^4 mc^2 \simeq 1.45 \cdot 10^{-3} \frac{Z}{2\hbar^2} \frac{a_B^3}{r^3} \text{ eV},\end{aligned}$$

ist der Effekt sehr klein. Dennoch ist er als sog. **Feinstrukturaufspaltung** der Spektrallinien experimentell beobachtet worden.

### 1.2.13 Gesamtdrehimpuls

Wir hatten gesehen, dass der Dirac-Hamilton-Operator  $\hat{H}_{0D}$  mit dem Helizitätsoperator  $\hat{S}_{\hat{p}}$  vertauscht, Gl. (1.122), beide also im Prinzip ein gemeinsames System von Eigenzuständen besitzen. Die Eigenzustände zu Energie und Helizität sind aber i.a. recht kompliziert, vgl. Gl. (1.148), so dass sie für konkrete Rechnungen nicht immer geeignet erscheinen. Es

gibt aber noch einen anderen Operator, der mit  $\hat{H}_{0D}$  vertauscht. Dazu erinnern wir uns, dass der Spin-Operator  $\hat{S}$  i.a. **nicht** mit  $\hat{H}_{0D}$  vertauscht. Es gilt nämlich mit Gl. (1.118) und dem Dirac-Hamilton-Operator  $\hat{H}_{0D} = c\gamma^0\vec{\gamma} \cdot \hat{\vec{p}} + \gamma^0 mc^2$  (sowie der Einsteinschen Summenkonvention für doppelt auftretende Indizes)

$$\begin{aligned}
 [\hat{S}^i, \hat{H}_{0D}] &= \frac{\hbar}{2} \{c [\gamma_5 \gamma^0 \gamma^i, \gamma^0 \gamma^j] \hat{p}^j + mc^2 [\gamma_5 \gamma^0 \gamma^i, \gamma^0]\} \\
 &= \frac{\hbar}{2} [c (\gamma_5 \gamma^0 \gamma^i \gamma^0 \gamma^j - \gamma^0 \gamma^j \gamma_5 \gamma^0 \gamma^i) \hat{p}^j + mc^2 (\gamma_5 \gamma^0 \gamma^i \gamma^0 - \gamma^0 \gamma_5 \gamma^0 \gamma^i)] \\
 &= \frac{\hbar}{2} [c (-\gamma_5 \gamma^i \gamma^j + \gamma_5 \gamma^j \gamma^i) \hat{p}^j + mc^2 (-\gamma_5 \gamma^i + \gamma_5 \gamma^i)] \\
 &= -\frac{\hbar c}{2} \gamma_5 [\gamma^i, \gamma^j] \hat{p}^j \\
 &= -\frac{\hbar c}{2} \gamma_5 \left[ \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_i \\ -\hat{\sigma}_i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_j \\ -\hat{\sigma}_j & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_j \\ -\hat{\sigma}_j & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_i \\ -\hat{\sigma}_i & 0 \end{pmatrix} \right] \hat{p}^j \\
 &= \frac{\hbar c}{2} \gamma_5 \begin{pmatrix} [\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] & 0 \\ 0 & [\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] \end{pmatrix} \hat{p}^j = i\hbar c \gamma_5 \epsilon^{ijk} \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_k & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_k \end{pmatrix} \hat{p}^j \\
 &= i\hbar c \epsilon^{ijk} \gamma_5 \gamma_5 \gamma^0 \gamma^k \hat{p}^j = i\hbar c \gamma^0 \epsilon^{ijk} \hat{p}^j \gamma^k . \tag{1.180}
 \end{aligned}$$

Hierbei haben wir von den Antivertauschungsrelationen (1.73) und (1.117), von  $(\gamma^0)^2 = \mathbb{1}$ , sowie von der Zwischenrechnung, die zum Resultat (1.118) für den Helizitätsoperator führte, Gebrauch gemacht.

Andererseits gilt für den Kommutator des **Drehimpulsoperators**  $\hat{L} \equiv \vec{r} \times \hat{\vec{p}}$  mit dem Dirac-Hamilton-Operator

$$\begin{aligned}
 [\hat{L}^i, \hat{H}_{0D}] &= \epsilon^{ijk} \{c [x^j \hat{p}^k, \gamma^0 \gamma^\ell \hat{p}^\ell] + mc^2 [x^j \hat{p}^k, \gamma^0]\} \\
 &= c \epsilon^{ijk} (x^j \hat{p}^k \gamma^0 \gamma^\ell \hat{p}^\ell - \gamma^0 \gamma^\ell \hat{p}^\ell x^j \hat{p}^k) \\
 &= c \epsilon^{ijk} \gamma^0 \gamma^\ell [x^j \hat{p}^k \hat{p}^\ell - (\hat{p}^\ell x^j) \hat{p}^k - x^j \hat{p}^\ell \hat{p}^k] \\
 &= i\hbar c \gamma^0 \gamma^\ell \epsilon^{ijk} \delta^{j\ell} \hat{p}^k = i\hbar c \gamma^0 \epsilon^{ijk} \gamma^j \hat{p}^k \equiv -i\hbar c \gamma^0 \epsilon^{ijk} \hat{p}^j \gamma^k . \tag{1.181}
 \end{aligned}$$

Der Vergleich mit Gl. (1.180) ergibt, dass die **Summe** aus Drehimpuls- und Spin-Operator, also der **Gesamtdrehimpuls-Operator**

$$\hat{J} \equiv \hat{L} + \hat{S} \tag{1.182}$$

mit dem Dirac-Hamilton-Operator vertauscht,

$$[\hat{J}, \hat{H}_{0D}] = 0 . \tag{1.183}$$

Der Dirac-Hamilton- und der Gesamtdrehimpuls-Operator besitzen also ein gemeinsames System von Eigenfunktionen.

Dies gilt übrigens auch in Anwesenheit eines skalaren Potentials  $\varphi(r)$ , das nur von der Radialvariable  $|\vec{r}| = r$  abhängt, weil der entsprechende Term im Dirac-Hamilton-Operator (1.151),  $\mathfrak{q}\varphi(r)$ , proportional zur Einheitsmatrix ist und daher trivialerweise



mit  $\hat{S}$  vertauscht. Er vertauscht auch mit  $\hat{L}$ , weil dieser Operator nur auf den Winkelanteil von  $\vec{r}$  wirkt. Daher vertauscht  $\mathbf{q}\varphi(r)$  auch mit  $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ . Damit eignet sich der Gesamtdrehimpuls-Operator zur Klassifizierung von Eigenfunktionen in wasserstoffähnlichen Atomen ohne äußeres Magnetfeld. Schalten wir ein solches ein, so gilt dies nicht mehr, wie man sich dadurch klarmachen kann, dass man zeigt, dass  $\left[ \hat{J}, \gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \vec{A} \right] \neq 0$ .

### 1.2.14 Parität

Eine **Paritätstransformation**  $\hat{P}$  bewirkt eine **Raumspiegelung**  $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ . Bei Lorentz-Vektoren wird also durch eine Paritätstransformation das Vorzeichen der räumlichen Komponenten umgedreht, z.B.

$$\hat{P}x^\mu = (ct, -\vec{r})^T, \quad \hat{P}p^\mu = (p^0, -\vec{p})^T,$$

wobei  $\hat{P}$  der sog. **Raumspiegelungsoperator** ist. Für Dirac-Spinoren ist das Verhalten unter Paritätstransformation unwesentlich komplizierter. Der entsprechende Operator lautet

$$\hat{\mathcal{P}} \equiv \gamma^0 \hat{P}, \quad (1.184)$$

was wir aber hier nicht beweisen wollen.

Weil

$$\hat{\mathcal{P}}^2 = (\gamma^0)^2 \hat{P}^2 = \mathbb{1}, \quad (1.185)$$

sind die **Eigenwerte** von  $\hat{\mathcal{P}}$  gerade  $\pm 1$ , entsprechend Zuständen **gerader** (+1) bzw. **ungerader** (-1) **Parität**. Für den 4-Spinor (1.163) gilt mit Gl. (1.184)

$$\hat{\mathcal{P}} \psi(t, \vec{r}) = \begin{pmatrix} \hat{P} \phi(t, \vec{r}) \\ -\hat{P} \chi(t, \vec{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi(t, -\vec{r}) \\ -\chi(t, -\vec{r}) \end{pmatrix}. \quad (1.186)$$

Falls  $\psi$  ein Eigenzustand zum Paritätsoperator mit **gerader/ungerader** Parität ist,

$$\hat{\mathcal{P}} \psi(t, \vec{r}) = \pm \psi(t, \vec{r}) = \begin{pmatrix} \pm \phi(t, \vec{r}) \\ \pm \chi(t, \vec{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi(t, -\vec{r}) \\ -\chi(t, -\vec{r}) \end{pmatrix}, \quad (1.187)$$

so hat  $\phi$  ebenfalls gerade/ungerade Parität, während  $\chi$  ungerade/gerade Parität besitzt. Die Parität von  $\chi$  ist also die umgekehrte von  $\phi$  bzw.  $\psi$ .

Für Systeme, in denen lediglich ein Zentralpotential  $\mathbf{q}\varphi(r)$  (welches invariant unter Paritätstransformationen ist) wirkt, ist Parität eine Quantenzahl, die sich genau wie die Energie und der Gesamtdrehimpuls zur Klassifikation der Zustände eignet, da sie mit dem Dirac-Hamilton-Operator vertauscht:

$$\begin{aligned} \left[ \hat{\mathcal{P}}, \hat{H}_D \right] &= \left[ \gamma^0 \hat{P}, c\gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \vec{p} + \gamma^0 mc^2 + \mathbf{q}\varphi(r) \right] \\ &= \left[ \gamma^0 \hat{P}, -i\hbar c \gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} \right] = -i\hbar c \left( \gamma^0 \hat{P} \gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} - \gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} \gamma^0 \hat{P} \right) \\ &= -i\hbar c \left( -\vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} + \vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} \right) \hat{P} \equiv 0. \end{aligned} \quad (1.188)$$

### 1.2.15 Das relativistische Wasserstoffatom I – Vorbemerkungen

Wir kommen nun zur Lösung der Dirac-Gleichung für ein Elektron in einem **wasserstoffähnlichen Atom**, d.h. das Elektron unterliegt dem Einfluß des 4-Vektorpotentials

$$A^\mu(X) = \left( \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 cr}, \vec{0} \right)^T \equiv \frac{\hbar c}{e} \left( \frac{Z\alpha}{cr}, \vec{0} \right)^T. \quad (1.189)$$

Für diesen Fall hatten wir gesehen, dass der Dirac-Hamilton-Operator mit dem Gesamtdrehimpuls-Operator (1.182) und dem Paritätsoperator (1.184) vertauscht. Eigenfunktionen des Dirac-Hamilton-Operators sind also gleichzeitig Eigenfunktionen zu  $\hat{J}$  und  $\hat{P}$ .

Wir suchen nun die Eigenwerte und Eigenfunktionen der **stationären** Dirac-Gleichung

$$E \psi(\vec{r}) = \hat{H}_D \psi(\vec{r}) = \left( -i\hbar c \gamma^0 \vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} + \gamma^0 mc^2 - \hbar c \frac{Z\alpha}{r} \right) \psi(\vec{r}). \quad (1.190)$$

Es ist zweckmäßig, folgenden Ansatz für den 4-Spinor  $\psi(\vec{r})$  zu machen,

$$\psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} F(\vec{r}) \\ G(\vec{r}) \end{pmatrix}, \quad (1.191)$$

wobei  $F$  und  $G$  jeweils 2-Spinoren sind. Da die Eigenfunktionen von  $\hat{H}_D$  auch Eigenfunktionen zum Paritätsoperator sind, kann man  $F$  und  $G$  durch ihre Parität klassifizieren. Dabei müssen wir nur berücksichtigen, dass  $G$  umgekehrte Parität wie  $F$  hat, vgl. Diskussion im vorangegangenen Abschnitt,

$$\begin{aligned} F^\pm(\vec{r}) &= \pm F^\pm(-\vec{r}), \\ G^\pm(\vec{r}) &= \mp G^\pm(-\vec{r}). \end{aligned} \quad (1.192)$$

Man beachte, dass in dieser Konvention  $G^+$  **ungerade** und  $G^-$  **gerade** Parität besitzt. Funktionen gerader Parität, also  $F^+$  und  $G^-$ , sind symmetrisch unter Punktspiegelung am Ursprung, sie besitzen damit auch **gerade** Werte des **Bahndrehimpulses** ( $s-$ ,  $d-$ , ... Wellen). Funktionen ungerader Parität, also  $F^-$  und  $G^+$ , sind antisymmetrisch unter Punktspiegelung am Ursprung, sie besitzen damit **ungerade** Werte des Bahndrehimpulses ( $p-$ , ... Wellen), vgl. Abb. 1.2.

Da die Eigenfunktionen  $\psi$  auch Eigenfunktionen zum Gesamtdrehimpulsoperator sein sollen, können wir folgenden Separationsansatz machen,

$$\psi_{jm}^\pm(\vec{r}) = \begin{pmatrix} f^\pm(r) \mathcal{Y}_{jm}^\pm(\hat{r}) \\ i g^\pm(r) \mathcal{Y}_{jm}^\mp(\hat{r}) \end{pmatrix}. \quad (1.193)$$

Hierbei sind die  $\mathcal{Y}_{jm}^\pm(\hat{r})$  die sog. **generalisierten Kugelflächenfunktionen**, die, wie wir im nächsten Abschnitt sehen werden, aus den von der nichtrelativistischen Diskussion wasserstoffähnlicher Atome bekannten **Kugelflächenfunktionen**  $Y_{\ell m}(\hat{r})$  und den 2-Spinoren  $\chi_{+1/2}$  und  $\chi_{-1/2}$  aus Gl. (1.128) gebildet werden. Die generalisierten Kugelflächenfunktionen sind nur Funktionen des Polar- und Azimutwinkels,  $\hat{r} \equiv \vec{r}/r = (\cos \varphi \sin \vartheta, \sin \varphi \sin \vartheta, \cos \vartheta)^T$ . Dagegen hängen die Funktionen  $f^\pm(r)$  und  $g^\pm(r)$  in Gl.

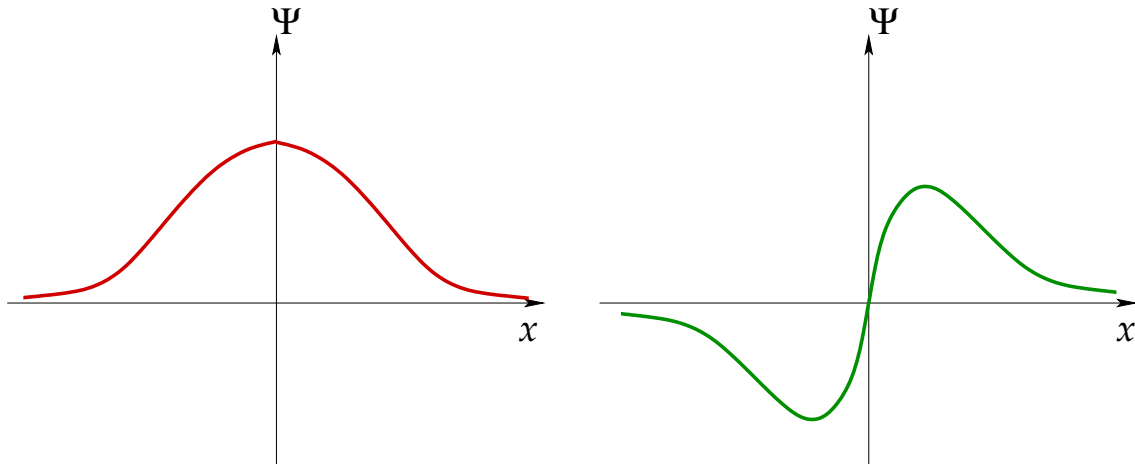


Abbildung 1.2: (a)  $s$ -Welle. Sie ist symmetrisch unter Punktspiegelung am Ursprung, besitzt daher gerade Parität. (b)  $p$ -Welle. Sie ist antisymmetrisch unter Punktspiegelung am Ursprung, besitzt daher ungerade Parität.

(1.193) nur noch von der Radialkoordinate  $r = |\vec{r}|$  ab. Der Faktor  $i$  vor der unteren Komponente ist reine Konvention. Man beachte, dass die generalisierte Kugelflächenfunktion in der unteren Komponente **umgekehrte** Parität wie die in der oberen Komponente hat. Damit wird die Parität der unteren Komponente relativ zur oberen bereits festgelegt, was bedeutet, dass die Funktion  $g^\pm$  **dieselbe** Parität wie  $f^\pm$  hat, also  $f^+$  und  $g^+$  haben **gerade**, während  $f^-$  und  $g^-$  **ungerade** Parität haben.

### 1.2.16 Die generalisierten Kugelflächenfunktionen

10.5.2012

In diesem Abschnitt wollen wir die generalisierten Kugelflächenfunktionen  $\mathcal{Y}_{jm}^\pm(\hat{r})$  explizit konstruieren und uns über ihre Eigenschaften Klarheit verschaffen. Zunächst ist klar, dass sie per Konstruktion **Eigenfunktionen** zu  $\hat{J}^2$  und  $\hat{J}^z$  sind,

$$\begin{aligned}\hat{J}^2 \mathcal{Y}_{jm}^\pm(\hat{r}) &= \hbar^2 j(j+1) \mathcal{Y}_{jm}^\pm(\hat{r}), \\ \hat{J}^z \mathcal{Y}_{jm}^\pm(\hat{r}) &= \hbar m \mathcal{Y}_{jm}^\pm(\hat{r}).\end{aligned}\tag{1.194}$$

Wie beim nichtrelativistischen Bahndrehimpuls gibt es auch hier **Stufenoperatoren**, die aus der  $x$ - und  $y$ -Komponente von  $\hat{J}$  gebildet werden,

$$\hat{J}_\pm \equiv \hat{J}^x \pm i\hat{J}^y,\tag{1.195}$$

und die  $z$ -Komponente des Gesamtdrehimpulses um eine Stufe erhöhen oder erniedrigen,

$$\hat{J}_\pm \mathcal{Y}_{jm}^\pm(\hat{r}) = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \mathcal{Y}_{j,m \pm 1}^\pm(\hat{r}),\tag{1.196}$$

vgl. Glgen. (5.19) und (5.22) der Vorlesung “Quantenmechanik I”.

Um den Gesamtdrehimpuls  $\hat{J}$  zu erhalten, sind nach Gl. (1.182) Drehimpuls  $\hat{L}$  und Spin  $\hat{S}$  zu addieren. Es handelt sich aber natürlich nicht um die Addition gewöhnlicher Vektoren, sondern quantenmechanischer Operatoren. Hierfür gibt es Regeln, die wir ausführlich in Abschnitt 2.3 besprechen werden. Für das folgende geben wir einfach das Resultat an. Um eine Eigenfunktion zum Gesamtdrehimpuls  $j$  mit  $z$ -Komponente  $m$  zu erhalten, müssen wir eine Eigenfunktion zum Bahndrehimpuls  $\ell$  mit  $z$ -Komponente  $m_\ell$  mit einer Eigenfunktion zum Spin  $S = 1/2$  kombinieren. Dabei kann der Spin aber sowohl in  $(+z)$ -Richtung zeigen, also mit  $z$ -Komponente  $s = +1/2$  (Spin up), als auch in  $(-z)$ -Richtung, also mit  $z$ -Komponente  $s = -1/2$  (Spin down). Wir können also zwei Werte von  $m_\ell$  wählen, um ein vorgegebenes  $m$  zu bekommen,

$$m_\ell = m \mp \frac{1}{2} \iff m = m_\ell \pm \frac{1}{2}. \quad (1.197)$$

Für fest vorgegebene  $j, m$  und  $\ell$  ergibt sich die generalisierte Kugelflächenfunktion damit als Linearkombination zweier Beiträge zu den beiden möglichen Werten für  $m_\ell$ ,

$$\mathcal{Y}_{jm}^\pm(\hat{r}) = \langle \ell \ m - \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \frac{1}{2} | j \ m \rangle \chi_{+1/2} Y_{\ell, m-1/2}(\hat{r}) + \langle \ell \ m + \frac{1}{2}; \frac{1}{2} -\frac{1}{2} | j \ m \rangle \chi_{-1/2} Y_{\ell, m+1/2}(\hat{r}). \quad (1.198)$$

Die Koeffizienten

$$\langle \ell \ m_\ell; S \ s | j \ m \rangle$$

sind die sog. **Clebsch-Gordan-Koeffizienten** für die Addition von zwei Drehimpulsen  $\ell$  und  $S$  mit  $z$ -Komponenten  $m_\ell$  und  $s$  zum Gesamtdrehimpuls  $j$  mit  $z$ -Komponente  $m$ , vgl. Abschnitt 2.3.

Für  $S = 1/2$  sind  $j$  und  $\ell$  natürlich nicht beliebig wählbar, sondern über die Relation

$$j = \ell \pm S = \ell \pm \frac{1}{2} \iff \ell = j \mp \frac{1}{2}, \quad (1.199)$$

miteinander verknüpft. Für vorgegebenes  $j$  kann  $\ell$  also nur zwei mögliche Werte annehmen, die sich um  $\Delta\ell = j + 1/2 - (j - 1/2) = 1$  unterscheiden. Da  $\ell \in \mathbb{N}_0$ , kann  $\ell$  gerade oder ungerade sein. Für vorgegebenes  $j$  gibt es daher **zwei** generalisierte Kugelflächenfunktionen (1.198), die sich im Wert von  $\ell$  unterscheiden, eine für  $\ell = j - 1/2$  und eine für  $\ell = j + 1/2$ . Wenn  $\ell = j - 1/2$  gerade (ungerade) ist, dann ist  $\ell = j + 1/2$  ungerade (gerade).

Diese beiden Möglichkeiten entsprechen gerade den beiden Paritätseigenwerten  $\pm$  der generalisierten Kugelflächenfunktionen (1.198). Um dies einzusehen, bemerken wir, dass die Parität der generalisierten Kugelflächenfunktion (1.198) offensichtlich durch die Parität der Kugelflächenfunktion  $Y_{\ell m}(\hat{r})$  festgelegt wird. Diese hatten wir schon Gl. (5.41) der Vorlesung ‘‘Quantenmechanik I’’ untersucht,

$$\hat{P} Y_{\ell m}(\hat{r}) = (-1)^\ell Y_{\ell m}(\hat{r}), \quad (1.200)$$

sie wird also durch den Wert  $\ell$  des Bahndrehimpulses bestimmt: gerade (ungerade) Werte von  $\ell$  entsprechen gerader (ungerader) Parität. Die Eigenschaft (1.200) für die gewöhnlichen Kugelflächenfunktionen überträgt sich direkt auf die generalisierten Kugelflächenfunktionen,

$$\hat{P} \mathcal{Y}_{\ell m}^\pm(\hat{r}) = (-1)^\ell \mathcal{Y}_{\ell m}^\pm(\hat{r}) \equiv \pm \mathcal{Y}_{\ell m}^\pm(\hat{r}), \quad (1.201)$$

weil  $(-1)^\ell$  genau für gerade (ungerade) Parität positiv (negativ) ist. Die Wahl des Paritätseigenwertes für die generalisierten Kugelflächenfunktionen legt also fest, ob  $\ell$  gerade oder ungerade ist. Da  $\ell$  außerdem über die Relation (1.199) mit dem fest vorgegebenen Wert von  $j$  verknüpft ist, ist  $\ell$  eindeutig bestimmt. Für die beiden möglichen Werte von  $\ell$  (für die es jeweils noch zwei mögliche Werte von  $s$  gibt) sind die Clebsch-Gordan-Koeffizienten in Tabelle 1.1 angegeben.

	$\langle \ell \ m - s; \frac{1}{2} \ s   j \ m \rangle$	
	$s = \frac{1}{2}$	$s = -\frac{1}{2}$
$\ell = j - \frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2} + m}{2\ell + 1}}$	$\sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2} - m}{2\ell + 1}}$
$\ell = j + \frac{1}{2}$	$-\sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2} - m}{2\ell + 1}}$	$\sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2} + m}{2\ell + 1}}$

Tabelle 1.1: Clebsch-Gordan-Koeffizienten.

Kombinieren wir Gl. (1.193) mit den Glgen. (1.194) und (1.201), so erhalten wir

$$\begin{aligned}
 \hat{J}^2 \psi_{jm}^\pm(\vec{r}) &= \hbar^2 j(j+1) \psi_{jm}^\pm(\vec{r}), \\
 \hat{J}^z \psi_{jm}^\pm(\vec{r}) &= \hbar m \psi_{jm}^\pm(\vec{r}), \\
 \hat{\mathcal{P}} \psi_{jm}^\pm(\vec{r}) &= \pm \psi_{jm}^\pm(\vec{r}),
 \end{aligned} \tag{1.202}$$

wobei wir für die letzte Gleichung noch Gl. (1.186) benutzt haben.

Anstelle der Parität kann man aber eine **neue Quantenzahl** einführen,

$$\kappa = \begin{cases} +(j + \frac{1}{2}) \equiv \ell, & \text{falls } \ell = j + \frac{1}{2}, \\ -(j + \frac{1}{2}) \equiv -(\ell + 1), & \text{falls } \ell = j - \frac{1}{2}. \end{cases} \tag{1.203}$$

Die Quantenzahlen  $j$  und  $\kappa$  legen  $\ell$  und damit die Parität eindeutig fest. Den Zusammenhang zwischen  $j$ ,  $\kappa$ ,  $\ell$  und Parität haben wir für die niedrigsten Werte von  $j$  in Tab. 1.2 dargestellt.

$j$	$\kappa$	$\ell$	Parität
$\frac{1}{2}$	+1	1	-
	-1	0	+
$\frac{3}{2}$	+2	2	+
	-2	1	-
$\frac{5}{2}$	+3	3	-
	-3	2	+

Tabelle 1.2: Zusammenhang zwischen  $j$ ,  $\kappa$ ,  $\ell$  und Parität.

Die Einführung von  $\kappa$  vereinfacht die Clebsch-Gordan-Koeffizienten aus Tab. 1.1,

$$\begin{aligned} \langle \ell \ m - \tfrac{1}{2}; \tfrac{1}{2} \ \tfrac{1}{2} | j \ m \rangle &= -\text{sgn}(\kappa) \sqrt{\frac{\kappa + \frac{1}{2} - m}{2\kappa + 1}}, \\ \langle \ell \ m + \tfrac{1}{2}; \tfrac{1}{2} \ -\tfrac{1}{2} | j \ m \rangle &= \sqrt{\frac{\kappa + \frac{1}{2} + m}{2\kappa + 1}}, \end{aligned}$$

wie man sich durch explizites Nachrechnen überzeugt. Ersetzt man die Parität durch  $\kappa$ , so können die generalisierten Kugelflächenfunktionen (1.198) also wie folgt geschrieben werden,

$$\mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}) = -\text{sgn}(\kappa) \sqrt{\frac{\kappa + \frac{1}{2} - m}{2\kappa + 1}} \chi_{+1/2} Y_{\ell, m-1/2}(\hat{r}) + \sqrt{\frac{\kappa + \frac{1}{2} + m}{2\kappa + 1}} \chi_{-1/2} Y_{\ell, m+1/2}(\hat{r}). \quad (1.204)$$

Für die Wellenfunktion (1.193) ergibt sich damit

$$\psi_{jm}^\kappa(\vec{r}) = \begin{pmatrix} f_j^\kappa(r) \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}) \\ i g_j^\kappa(r) \mathcal{Y}_{jm}^{-\kappa}(\hat{r}) \end{pmatrix}. \quad (1.205)$$

Hierbei haben wir antizipiert, dass die Funktionen  $f_j^\kappa$  und  $g_j^\kappa$  auch von der Drehimpulsquantenzahl  $j$  abhängen werden.

Zum Schluss dieses Abschnitts verschaffen wir uns noch Klarheit über zwei Eigenschaften der generalisierten Kugelflächenfunktionen, die wir bei der Lösung des Radialanteils der Dirac-Gleichung im nächsten Abschnitt benötigen werden:

$$(i) \quad \hat{\sigma} \cdot \hat{L} \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}) = -\hbar(\kappa + 1) \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}). \quad (1.206)$$

**Beweis:** Mit Gl. (1.182) und  $\hat{S} = \hbar \hat{\sigma}/2$  gilt

$$\hat{J}^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2 \hat{L} \cdot \hat{S} \equiv \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + \hbar \hat{\sigma} \cdot \hat{L},$$

also

$$\begin{aligned} \hbar \hat{\sigma} \cdot \hat{L} \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}) &= \left( \hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2 \right) \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}) \\ &= \hbar^2 \left[ j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4} \right] \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}), \end{aligned}$$

wobei wir ausgenutzt haben, dass die generalisierten Kugelflächenfunktionen aufgrund von Gl. (1.198) natürlich auch Eigenfunktionen von  $\hat{L}^2$  und  $\hat{S}^2$  zu den Eigenwerten  $\hbar^2 \ell(\ell+1)$  bzw.  $\hbar^2 S(S+1) \equiv 3\hbar^2/4$  sind. Gemäß Gl. (1.199) ist aber der Wert  $\ell$  des Bahndrehimpulses für gegebenes  $j$  bereits festgelegt, so dass wir weiter berechnen

$$\begin{aligned} &\hbar \hat{\sigma} \cdot \hat{L} \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}) \\ &= \begin{cases} \hbar^2 \left[ j(j+1) - (j + \frac{1}{2})(j + \frac{3}{2}) - \frac{3}{4} \right] \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}), & \text{falls } \ell = j + \frac{1}{2} \equiv \kappa, \\ \hbar^2 \left[ j(j+1) - (j - \frac{1}{2})(j + \frac{1}{2}) - \frac{3}{4} \right] \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}), & \text{falls } \ell = j - \frac{1}{2} \equiv -(\kappa + 1), \end{cases} \\ &= \begin{cases} -\hbar^2 (j + \frac{3}{2}) \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}), & \text{falls } \kappa = \ell = j + \frac{1}{2}, \\ \hbar^2 (j - \frac{1}{2}) \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}), & \text{falls } \kappa = -(\ell + 1) = -(j + \frac{1}{2}), \end{cases} \\ &= -\hbar^2 (\kappa + 1) \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}), \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

$$(ii) \quad \hat{\sigma} \cdot \hat{r} \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}) = -\mathcal{Y}_{jm}^{-\kappa}(\hat{r}) . \quad (1.207)$$

**Beweis:** Der Beweis verlauft in zwei Schritten. Wir zeigen zunachst, dass  $\hat{\sigma} \cdot \hat{r} \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r})$  umgekehrte Paritat wie  $\mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r})$ , aber ansonsten dieselben Quantenzahlen  $j, m$  tragt, also

$$\hat{\sigma} \cdot \hat{r} \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}) = \mathcal{N}_j \mathcal{Y}_{jm}^{-\kappa}(\hat{r}) . \quad (1.208)$$

Im zweiten Schritt zeigen wir dann  $\mathcal{N}_j = -1$ .

Zunachst berechnen wir den Kommutator  $[\hat{J}^i, \hat{\sigma} \cdot \hat{r}]$ . Dazu benotigen wir

$$\begin{aligned} [\hat{L}^i, \hat{\sigma} \cdot \hat{r}] &= -i\hbar \epsilon^{ijk} x^j \partial_k \left( \hat{\sigma}_\ell \frac{x^\ell}{r} \right) = -i\hbar \epsilon^{ijk} x^j \hat{\sigma}_\ell \frac{\delta^{k\ell} r - x^\ell x^k / r}{r^2} \\ &= -i\hbar \epsilon^{ijk} \hat{x}^j \hat{\sigma}_\ell (\delta^{k\ell} - \hat{x}^k \hat{x}^\ell) = -i\hbar \epsilon^{ijk} \hat{x}^j \hat{\sigma}_k , \end{aligned} \quad (1.209)$$

und

$$[\hat{S}^i, \hat{\sigma} \cdot \hat{r}] = \frac{\hbar}{2} [\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] \hat{x}^j = i\hbar \epsilon^{ijk} \hat{\sigma}_k \hat{x}^j , \quad (1.210)$$

wobei wir die Kommutationsrelation (1.113) fur die Pauli-Matrizen benutzt haben. Kombinieren wir die Gln. (1.209) und (1.210), so erhalten wir

$$[\hat{J}^i, \hat{\sigma} \cdot \hat{r}] = 0 . \quad (1.211)$$

Selbstverstandlich gilt dann auch  $[\hat{J}^2, \hat{\sigma} \cdot \hat{r}] = 0$ .

Als nachstes berechnen wir den Antikommutator

$$\{\hat{P}, \hat{\sigma} \cdot \hat{r}\} = \hat{P} \hat{\sigma} \cdot \hat{r} + \hat{\sigma} \cdot \hat{r} \hat{P} = (-\hat{\sigma} \cdot \hat{r} + \hat{\sigma} \cdot \hat{r}) \hat{P} \equiv 0 . \quad (1.212)$$

Aus Gl. (1.211) folgt

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 [\hat{\sigma} \cdot \hat{r} \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r})] &= \hat{\sigma} \cdot \hat{r} \hat{J}^2 \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}) = \hbar^2 j(j+1) [\hat{\sigma} \cdot \hat{r} \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r})] , \\ \hat{J}^z [\hat{\sigma} \cdot \hat{r} \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r})] &= \hat{\sigma} \cdot \hat{r} \hat{J}^z \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}) = \hbar m [\hat{\sigma} \cdot \hat{r} \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r})] , \end{aligned}$$

was bedeutet, dass  $\hat{\sigma} \cdot \hat{r} \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r})$  dieselben Quantenzahlen  $j, m$  hat wie  $\mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r})$ . Aus Gl. (1.212) folgt dagegen, dass

$$\hat{P} [\hat{\sigma} \cdot \hat{r} \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r})] = -\hat{\sigma} \cdot \hat{r} \hat{P} \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}) = \begin{cases} -\hat{\sigma} \cdot \hat{r} \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}) , & \text{falls } \hat{P} \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}) = +\mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}) , \\ +\hat{\sigma} \cdot \hat{r} \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}) , & \text{falls } \hat{P} \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}) = -\mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}) , \end{cases}$$

was bedeutet, dass  $\hat{\sigma} \cdot \hat{r} \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r})$  die umgekehrte Paritat hat wie  $\mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r})$ . Beide Tatsachen zusammengenommen lassen sich wie in Gl. (1.208) dargestellt ausdrucken.

Wir mussen nun noch zeigen, dass die Normierungskonstante  $\mathcal{N}_j$  in Gl. (1.208) den Wert  $-1$  hat. Dazu genugt es,  $\mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r})$  bei bestimmten Werten fur die Winkel, z.B.  $\vartheta = \varphi = 0$ , also bei  $\hat{r} = (0, 0, 1) \equiv \hat{z}$ , und bei einem bestimmten Wert fur  $m$ ,

## 1 Relativistische Wellengleichungen

z.B.  $m = -1/2$ , zu betrachten. Aus Gl. (5.37) der Vorlesung ‘‘Quantenmechanik I’’ wissen wir, dass

$$Y_{\ell m_\ell}(\hat{z}) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m_\ell)!}{(\ell+m_\ell)!}} P_\ell^{m_\ell}(1) \equiv \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \delta_{m_\ell,0},$$

wobei wir die Tatsache benutzt haben, dass f ur  $m_\ell > 0$  alle zugeordneten Legendre-Polynome bei  $\cos\vartheta = 1$  verschwinden und f ur  $m_\ell = 0$  diese Polynome den Wert Eins annehmen. Gleichung (1.204) hat f ur  $m = -1/2$ ,  $\hat{r} = \hat{z}$  und  $\kappa = \ell > 0$  die folgende Form:

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_{j,-1/2}^\kappa(\hat{z}) &= -\sqrt{\frac{\kappa+1}{2\kappa+1}} \chi_{+1/2} Y_{\ell,-1}(\hat{z}) + \sqrt{\frac{\kappa}{2\kappa+1}} \chi_{-1/2} Y_{\ell,0}(\hat{z}) \\ &\equiv \sqrt{\frac{\kappa}{2\kappa+1}} \chi_{-1/2} \sqrt{\frac{2\kappa+1}{4\pi}} = \sqrt{\frac{\kappa}{4\pi}} \chi_{-1/2}, \end{aligned}$$

w ahrend f ur  $\kappa = -(\ell+1) < 0$  gilt

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_{j,-1/2}^\kappa(\hat{z}) &= \sqrt{\frac{\kappa+1}{2\kappa+1}} \chi_{+1/2} Y_{\ell,-1}(\hat{z}) + \sqrt{\frac{\kappa}{2\kappa+1}} \chi_{-1/2} Y_{\ell,0}(\hat{z}) \\ &\equiv \sqrt{\frac{\kappa}{2\kappa+1}} \chi_{-1/2} \sqrt{\frac{-2\kappa-1}{4\pi}} = \sqrt{\frac{-\kappa}{4\pi}} \chi_{-1/2}, \end{aligned}$$

also in beiden F allen f ur  $\hat{r} = \hat{z}$  und unter Benutzung von Gl. (1.208)

$$\begin{aligned} \hat{\sigma} \cdot \hat{z} \mathcal{Y}_{j,-1/2}^\kappa(\hat{z}) &\equiv \hat{\sigma}_3 \mathcal{Y}_{j,-1/2}^\kappa(\hat{z}) = \sqrt{\frac{|\kappa|}{4\pi}} \hat{\sigma}_3 \chi_{-1/2} = -\sqrt{\frac{|\kappa|}{4\pi}} \chi_{-1/2} \\ &\equiv \mathcal{N}_j \mathcal{Y}_{j,-1/2}^{-\kappa}(\hat{z}) = \mathcal{N}_j \sqrt{\frac{|\kappa|}{4\pi}} \chi_{-1/2}, \end{aligned} \quad (1.213)$$

d.h., wie behauptet,  $\mathcal{N}_j = -1$ , q.e.d..

Warum sind die beiden Eigenschaften (1.206) und (1.207) wichtig? Im n achsten Abschnitt, wenn es an die L osung der Radialgleichung geht, wird des  ofteren der Operator  $\hat{\sigma} \cdot \hat{p} \equiv -i\hbar \hat{\sigma} \cdot \vec{\nabla}$  auf die Funktionen  $\mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r})$  anzuwenden sein. Dieser Operator l asst sich wie folgt schreiben:

$$-i\hbar \hat{\sigma} \cdot \vec{\nabla} = -i\hbar \hat{\sigma} \cdot \hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{i}{r} \hat{\sigma} \cdot \hat{r} \hat{\sigma} \cdot \hat{L}. \quad (1.214)$$

**Beweis:** Wir berechnen mit Gl. (1.169) und  $\hat{L} = \vec{r} \times \hat{p} = -i\hbar \vec{r} \times \vec{\nabla}$

$$\begin{aligned} \frac{i}{r} \hat{\sigma} \cdot \hat{r} \hat{\sigma} \cdot \hat{L} &= \frac{i}{r} \hat{r} \cdot \hat{L} - \frac{1}{r} \hat{\sigma} \cdot (\hat{r} \times \hat{L}) \\ &= \frac{\hbar}{r} \epsilon^{ijk} \hat{x}^i \hat{x}^j \partial_k - \frac{1}{r} \epsilon^{ijk} \hat{\sigma}_i \hat{x}^j \hat{L}^k = \frac{i\hbar}{r} \epsilon^{ijk} \hat{\sigma}_i \hat{x}^j \epsilon^{klm} x^\ell \partial_m \\ &= \frac{i\hbar}{r} (\delta^{i\ell} \delta^{jm} - \delta^{im} \delta^{j\ell}) \hat{\sigma}_i \hat{x}^j x^\ell \partial_m = \frac{i\hbar}{r} (\hat{\sigma} \cdot \vec{r} \hat{r} \cdot \vec{\nabla} - r \hat{\sigma} \cdot \vec{\nabla}) \\ &\equiv i\hbar \left( \hat{\sigma} \cdot \hat{r} \frac{\partial}{\partial r} - \hat{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \right), \quad \text{q.e.d.} \end{aligned} \quad (1.215)$$

In Gl. (1.214) treten genau die Operatoren aus den Eigenschaften (1.206) und (1.207) auf.



### 1.2.17 Das relativistische Wasserstoffatom II – Lösung der Radialgleichungen

Wir kommen nun zur Bestimmung der Energie-Eigenwerte der stationären Dirac-Gleichung (1.190). Dazu setzen wir den Lösungsansatz (1.205) in diese Gleichung ein,

$$\begin{aligned} E f_j^\kappa(r) \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}) &= \left( mc^2 - \frac{Z\alpha}{r} \hbar c \right) f_j^\kappa(r) \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}) + \hbar c \hat{\sigma} \cdot \vec{\nabla} g_j^\kappa(r) \mathcal{Y}_{jm}^{-\kappa}(\hat{r}), \\ E g_j^\kappa(r) \mathcal{Y}_{jm}^{-\kappa}(\hat{r}) &= \left( -mc^2 - \frac{Z\alpha}{r} \hbar c \right) g_j^\kappa(r) \mathcal{Y}_{jm}^{-\kappa}(\hat{r}) - \hbar c \hat{\sigma} \cdot \vec{\nabla} f_j^\kappa(r) \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}). \end{aligned} \quad (1.216)$$

Kombinieren wir Gl. (1.214), angewendet auf die oberen und unteren Komponenten des 4-Spinors (1.205), mit den Eigenschaften (1.206) und (1.207), so können wir einige Terme wie folgt umschreiben,

$$\begin{aligned} \hat{\sigma} \cdot \vec{\nabla} g_j^\kappa(r) \mathcal{Y}_{jm}^{-\kappa}(\hat{r}) &= \hat{\sigma} \cdot \hat{r} \left[ \frac{dg_j^\kappa(r)}{dr} - \frac{g_j^\kappa(r)}{\hbar r} \hat{\sigma} \cdot \hat{L} \right] \mathcal{Y}_{jm}^{-\kappa}(\hat{r}) \\ &= \left[ -\frac{dg_j^\kappa(r)}{dr} - \frac{1-\kappa}{r} g_j^\kappa(r) \right] \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}), \\ \hat{\sigma} \cdot \vec{\nabla} f_j^\kappa(r) \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}) &= \hat{\sigma} \cdot \hat{r} \left[ \frac{df_j^\kappa(r)}{dr} - \frac{f_j^\kappa(r)}{\hbar r} \hat{\sigma} \cdot \hat{L} \right] \mathcal{Y}_{jm}^\kappa(\hat{r}) \\ &= \left[ -\frac{df_j^\kappa(r)}{dr} - \frac{1+\kappa}{r} f_j^\kappa(r) \right] \mathcal{Y}_{jm}^{-\kappa}(\hat{r}). \end{aligned} \quad (1.217)$$

Setzen wir dies in die Gln. (1.216) ein, so erkennen wir, dass auf beiden Seiten der Gleichungen ausschließlich generalisierte Kugelflächenfunktionen zum **selben** Wert von  $\kappa$  auftreten; wir können diese also abseparieren,

$$\begin{aligned} E f_j^\kappa(r) &= \left( mc^2 - \frac{Z\alpha}{r} \hbar c \right) f_j^\kappa(r) - \hbar c \left[ \frac{dg_j^\kappa(r)}{dr} + \frac{1-\kappa}{r} g_j^\kappa(r) \right], \\ E g_j^\kappa(r) &= \left( -mc^2 - \frac{Z\alpha}{r} \hbar c \right) g_j^\kappa(r) + \hbar c \left[ \frac{df_j^\kappa(r)}{dr} + \frac{1+\kappa}{r} f_j^\kappa(r) \right], \end{aligned} \quad (1.218)$$

oder

$$\begin{aligned} \left( \frac{E - mc^2}{\hbar c} + \frac{Z\alpha}{r} \right) f_j^\kappa(r) &= -\frac{dg_j^\kappa(r)}{dr} - \frac{1-\kappa}{r} g_j^\kappa(r), \\ \left( \frac{E + mc^2}{\hbar c} + \frac{Z\alpha}{r} \right) g_j^\kappa(r) &= \frac{df_j^\kappa(r)}{dr} + \frac{1+\kappa}{r} f_j^\kappa(r). \end{aligned} \quad (1.219)$$

Dies ist ein gekoppeltes System von zwei **gewöhnlichen** Differentialgleichungen **erster** Ordnung in der Variable  $r$  für die Funktionen  $f_j^\kappa(r)$  und  $g_j^\kappa(r)$ , die sog. **Radialgleichungen**. Im folgenden ist es zweckmäßig, der Übersicht halber die Indizes  $j$  und  $\kappa$  zunächst wegzulassen, sowie die folgende Substitution durchzuführen,

$$f_R \equiv r f, \quad g_R \equiv r g,$$

## 1 Relativistische Wellengleichungen

so dass wegen  $f = f_R/r$

$$\frac{df}{dr} = \frac{1}{r} \frac{df_R}{dr} - \frac{f_R}{r^2},$$

und entsprechend für die Ableitung  $dg/dr$ . Dann heben sich einige Terme in den Glgen. (1.219) weg und wir erhalten

$$\begin{aligned} \left( \frac{E - mc^2}{\hbar c} + \frac{Z\alpha}{r} \right) f_R(r) &= -\frac{dg_R(r)}{dr} + \frac{\kappa}{r} g_R(r), \\ \left( \frac{E + mc^2}{\hbar c} + \frac{Z\alpha}{r} \right) g_R(r) &= \frac{df_R(r)}{dr} + \frac{\kappa}{r} f_R(r). \end{aligned} \quad (1.220)$$

Um das **asymptotische Verhalten** für  $r \rightarrow \infty$  zu analysieren, können wir Terme der Ordnung  $O(r^{-1})$  vernachlässigen und erhalten

$$\begin{aligned} \frac{df_R(r)}{dr} &\simeq \frac{mc^2 + E}{\hbar c} g_R(r), \\ \frac{dg_R(r)}{dr} &\simeq \frac{mc^2 - E}{\hbar c} f_R(r). \end{aligned}$$

Differenzieren wir beide Gleichungen noch einmal nach  $r$ , so können wir sie durch gegenseitiges Einsetzen entkoppeln,

$$\begin{aligned} \frac{d^2 f_R(r)}{dr^2} &\simeq \frac{mc^2 + E}{\hbar c} \frac{dg_R(r)}{dr} \simeq \frac{m^2 c^4 - E^2}{\hbar^2 c^2} f_R(r) \\ &\quad ;, \\ \frac{d^2 g_R(r)}{dr^2} &\simeq \frac{mc^2 - E}{\hbar c} \frac{df_R(r)}{dr} \simeq \frac{m^2 c^4 - E^2}{\hbar^2 c^2} g_R(r). \end{aligned}$$

Für **ungebundene Zustände**,  $E > mc^2$ , erhalten wir **oszillierende Lösungen**,

$$r \longrightarrow \infty, \quad E > mc^2 : \quad f_R(r), g_R(r) \sim \cos(kr), \quad k = \frac{\sqrt{E^2 - m^2 c^4}}{\hbar c},$$

während für **gebundene Zustände**,  $E < mc^2$ , **exponentiell abfallende** oder **exponentiell anwachsende Lösungen** möglich sind. Letztere müssen wir natürlich aus Gründen der Normierbarkeit ausschließen, also verbleiben nur die exponentiell fallenden Lösungen,

$$r \longrightarrow \infty, \quad E < mc^2 : \quad f_R(r), g_R(r) \sim \exp(-kr), \quad k = \frac{\sqrt{m^2 c^4 - E^2}}{\hbar c}.$$

Im folgenden betrachten wir nur Lösungen für gebundene Zustände. Definieren wir die **dimensionslose Radialvariable**

$$\rho \equiv \frac{\sqrt{m^2 c^4 - E^2}}{\hbar c} r, \quad (1.221)$$

so können wir das Gleichungssystem (1.220) folgendermaßen schreiben,

$$\begin{aligned} \left( mc^2 - E - \sqrt{m^2 c^4 - E^2} \frac{Z\alpha}{\rho} \right) f_R(\rho) &= \sqrt{m^2 c^4 - E^2} \left[ \frac{dg_R(\rho)}{d\rho} - \frac{\kappa}{\rho} g_R(\rho) \right], \\ \left( mc^2 + E + \sqrt{m^2 c^4 - E^2} \frac{Z\alpha}{\rho} \right) g_R(\rho) &= \sqrt{m^2 c^4 - E^2} \left[ \frac{df_R(\rho)}{d\rho} + \frac{\kappa}{\rho} f_R(\rho) \right]. \end{aligned}$$

Nach Division durch  $\sqrt{m^2c^4 - E^2}$  und Definition der Variablen

$$\epsilon \equiv \sqrt{\frac{mc^2 - E}{mc^2 + E}}, \quad (1.222)$$

erhalten wir schließlich

$$\begin{aligned} \left(\epsilon - \frac{Z\alpha}{\rho}\right) f_R(\rho) &= \frac{dg_R(\rho)}{d\rho} - \frac{\kappa}{\rho} g_R(\rho), \\ \left(\frac{1}{\epsilon} + \frac{Z\alpha}{\rho}\right) g_R(\rho) &= \frac{df_R(\rho)}{d\rho} + \frac{\kappa}{\rho} f_R(\rho). \end{aligned} \quad (1.223)$$

Zur Lösung machen wir einen Potenzreihenansatz (multipliziert mit  $e^{-\rho}$ , um im Unendlichen exponentiell abklingende Lösungen zu erhalten),

$$\begin{aligned} f_R(\rho) &= \rho^\nu \sum_{k=0}^{\infty} A_k \rho^k e^{-\rho}, \\ g_R(\rho) &= \rho^\nu \sum_{k=0}^{\infty} B_k \rho^k e^{-\rho}. \end{aligned} \quad (1.224)$$

Eingesetzt in das Gleichungssystem (1.223) erhalten wir

15.5.2012

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{\infty} A_k (\epsilon \rho^{\nu+k} - Z\alpha \rho^{\nu+k-1}) &= \sum_{k=0}^{\infty} B_k [(\nu+k-\kappa)\rho^{\nu+k-1} - \rho^{\nu+k}], \\ \sum_{k=0}^{\infty} B_k \left(\frac{1}{\epsilon} \rho^{\nu+k} + Z\alpha \rho^{\nu+k-1}\right) &= \sum_{k=0}^{\infty} A_k [(\nu+k+\kappa)\rho^{\nu+k-1} - \rho^{\nu+k}], \end{aligned}$$

bzw. nach Umdefinition der Summationsindizes, um identische Potenzen von  $\rho$  vergleichen zu können,

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{k=0}^{\infty} [\epsilon A_{k-1} - Z\alpha A_k - (\nu+k-\kappa)B_k + B_{k-1}] \rho^{\nu+k-1}, \\ 0 &= \sum_{k=0}^{\infty} \left[ \frac{1}{\epsilon} B_{k-1} + Z\alpha B_k - (\nu+k+\kappa)A_k + A_{k-1} \right] \rho^{\nu+k-1}, \end{aligned}$$

wobei vereinbart wird, dass  $A_{-1} = B_{-1} \equiv 0$ . Da diese Gleichungen für jeden Wert von  $\rho$  gelten müssen, können sie nur erfüllt werden, wenn die Koeffizienten für **jeden einzelnen Term** verschwinden,

$$\begin{aligned} 0 &= \epsilon A_{k-1} + B_{k-1} - Z\alpha A_k - (\nu+k-\kappa)B_k, \\ 0 &= A_{k-1} + \frac{1}{\epsilon} B_{k-1} - (\nu+k+\kappa)A_k + Z\alpha B_k. \end{aligned} \quad (1.225)$$

# 1 Relativistische Wellengleichungen

Dieses Gleichungssystem kann man in Matrixform wie folgt schreiben:

$$0 = \begin{pmatrix} -Z\alpha & -\nu + \kappa & 0 & 0 & \cdots & & & & & & \\ -\nu - \kappa & Z\alpha & 0 & 0 & \cdots & & & & & & \\ \epsilon & 1 & -Z\alpha & -\nu - 1 + \kappa & 0 & \cdots & & & & & \\ 1 & 1/\epsilon & -\nu - 1 - \kappa & Z\alpha & 0 & \cdots & & & & & \\ 0 & 0 & \epsilon & 1 & -Z\alpha & -\nu - 2 + \kappa & 0 & \cdots & & & \\ 0 & 0 & 1/\epsilon & 1 & -\nu - 2 - \kappa & Z\alpha & 0 & \cdots & & & \\ \vdots & \vdots & & & & & & \ddots & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \\ A_1 \\ B_1 \\ A_2 \\ B_2 \\ \vdots \end{pmatrix} .$$

Ein nicht-trivialer Lösungsvektor  $(A_0, B_0, \dots, A_k, B_k, \dots)^T$  erfordert das Verschwinden der Koeffizientendeterminante. Bei genauem Hinsehen entpuppt sich diese als die Determinante einer Matrix vom in Aufgabe 2.1.1. besprochenen Typ (abgesehen davon, dass die Matrix hier unendlich dimensional ist),

$$D \equiv \begin{pmatrix} M_0 & 0 \\ E & D_1 \end{pmatrix} ,$$

mit der  $(2 \times 2)$ -Matrix

$$M_0 = \begin{pmatrix} -Z\alpha & -\nu + \kappa \\ -\nu - \kappa & Z\alpha \end{pmatrix} ,$$

der  $(\infty \times 2)$ -Matrix

$$E \equiv \begin{pmatrix} \epsilon & 1 \\ 1 & 1/\epsilon \\ 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \end{pmatrix} ,$$

und der  $(\infty \times \infty)$ -Matrix

$$D_1 \equiv \begin{pmatrix} -Z\alpha & -\nu - 1 + \kappa & 0 & \cdots & & & & & & & \\ -\nu - 1 - \kappa & Z\alpha & 0 & \cdots & & & & & & & \\ \epsilon & 1 & -Z\alpha & -\nu - 2 + \kappa & 0 & \cdots & & & & & \\ 1/\epsilon & 1 & -\nu - 2 - \kappa & Z\alpha & 0 & \cdots & & & & & \\ 0 & 0 & \epsilon & 1 & -Z\alpha & \cdots & & & & & \\ \vdots & \vdots & & & & & \ddots & & & & \end{pmatrix} .$$

Man beachte, dass  $D_1$  die gleiche Struktur wie  $D$  hat,

$$D_1 = \begin{pmatrix} M_1 & 0 \\ E & D_2 \end{pmatrix} ,$$

mit

$$M_1 = \begin{pmatrix} -Z\alpha & -\nu - 1 + \kappa \\ -\nu - 1 - \kappa & Z\alpha \end{pmatrix} .$$

Aufgabe 2.1.1. besagt, dass die Determinante der Matrix  $N$  wie folgt zu berechnen ist,

$$\det D = \det_{2 \times 2} M_0 \det D_1 = \det_{2 \times 2} M_0 \det_{2 \times 2} M_1 \det D_2 = \dots = \prod_{k=0}^{\infty} \det_{2 \times 2} M_k ,$$

wobei

$$M_k = \begin{pmatrix} -Z\alpha & -\nu - k + \kappa \\ -\nu - k - \kappa & Z\alpha \end{pmatrix} .$$

Das Ergebnis ist offensichtlich

$$0 = \det D = \prod_{k=0}^{\infty} [\kappa^2 - (\nu + k)^2 - (Z\alpha)^2] . \quad (1.226)$$

Die Koeffizientendeterminante verschwindet also, falls  $\nu$  einen der folgenden Werte annimmt:

$$\nu = -k \pm \sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha)^2}, \quad k \in \mathbb{N}_0 . \quad (1.227)$$

Mit dem Potenzreihenansatz (1.224) verhalten sich die Lösungen  $f$ ,  $g$  am Ursprung,  $r \rightarrow 0$ , wie

$$f = \frac{f_R}{r} \sim r^{\nu-1}, \quad g = \frac{g_R}{r} \sim r^{\nu-1} .$$

Damit die Lösung normierbar bleibt, muss z.B. gelten

$$\int d^3\vec{r} f^2 \sim \int_0^{\infty} dr r^2 r^{2\nu-2} = \int_0^{\infty} dr r^{2\nu} .$$

Um ein Divergieren des Integrals am Ursprung zu verhindern, müssen wir fordern

$$\nu > -\frac{1}{2} .$$

Vergleichen wir dies mit dem Ergebnis (1.227) und berücksichtigen, dass  $|\kappa| \geq 1$  und i.a.  $Z\alpha \ll 1$ , so müssen wir die negative Lösung in Gl. (1.227) ausschließen. Die positive Lösung ergibt die Bedingung

$$\nu + k = \sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha)^2} > k - \frac{1}{2} .$$

Dies ist nicht für beliebige Werte von  $k$  erfüllbar, es genügt aber, wenn es für ein  $k$ , z.B.  $k = 0$ , erfüllt wird (dies reicht aus, um die Koeffizientendeterminante zum Verschwinden zu bringen). Es ergibt sich also

$$\nu \equiv +\sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha)^2} . \quad (1.228)$$

Mit dieser Lösung bestimmen wir nun die Koeffizienten  $A_k, B_k$  in der Reihenentwicklung (1.224). Zunächst kann man die Koeffizienten  $A_{k-1}, B_{k-1}$  in den Glgen. (1.225) eliminieren,

$$\begin{aligned} A_{k-1} &= (\nu + k + \kappa)A_k - Z\alpha B_k - \frac{1}{\epsilon} B_{k-1}, \\ B_{k-1} &= (\nu + k - \kappa)B_k + Z\alpha A_k - \epsilon A_{k-1}, \\ \Leftrightarrow A_{k-1} &= (\nu + k + \kappa)A_k - Z\alpha B_k - \frac{1}{\epsilon} [(\nu + k - \kappa)B_k + Z\alpha A_k - \epsilon A_{k-1}] \\ &= \left( \nu + k + \kappa - \frac{Z\alpha}{\epsilon} \right) A_k - \left( Z\alpha + \frac{\nu + k - \kappa}{\epsilon} \right) B_k + A_{k-1}, \\ B_{k-1} &= (\nu + k - \kappa)B_k + Z\alpha A_k - \epsilon \left[ (\nu + k + \kappa)A_k - Z\alpha B_k - \frac{1}{\epsilon} B_{k-1} \right] \\ &= (\nu + k - \kappa + Z\alpha \epsilon) B_k + [Z\alpha - \epsilon(\nu + k + \kappa)] A_k + B_{k-1}, \end{aligned}$$

bzw.

$$\begin{aligned} \left( \nu + k + \kappa - \frac{Z\alpha}{\epsilon} \right) A_k &= \left( Z\alpha + \frac{\nu + k - \kappa}{\epsilon} \right) B_k, \\ (\nu + k - \kappa + Z\alpha\epsilon) B_k &= [\epsilon(\nu + k + \kappa) - Z\alpha] A_k. \end{aligned}$$

Multipliziert man die erste Gleichung mit  $\epsilon$ , so ergibt sich die zweite. Die beiden Gleichungen sind also nicht linear unabhängig. Dies bedeutet, dass man einen der beiden Koeffizienten, z.B.  $B_k$ , durch den anderen,  $A_k$ , ausdrücken kann,

$$B_k = A_k \frac{\epsilon(\nu + k + \kappa) - Z\alpha}{\nu + k - \kappa + Z\alpha\epsilon}. \quad (1.229)$$

Eingesetzt in, beispielsweise, die erste Gl. (1.225) ergibt sich eine Rekursionsformel für die Koeffizienten  $A_k$ ,

$$0 = \left[ \epsilon + \frac{\epsilon(\nu + k - 1 + \kappa) - Z\alpha}{\nu + k - 1 - \kappa + Z\alpha\epsilon} \right] A_{k-1} - \left[ Z\alpha + (\nu + k - \kappa) \frac{\epsilon(\nu + k + \kappa) - Z\alpha}{\nu + k - \kappa + Z\alpha\epsilon} \right] A_k,$$

bzw., wenn wir  $k \rightarrow k + 1$  setzen und nach  $A_{k+1}$  auflösen

$$\begin{aligned} A_{k+1} &= A_k \frac{\epsilon(\nu + k + \kappa) - Z\alpha + \epsilon(\nu + k - \kappa + Z\alpha\epsilon)}{\nu + k - \kappa + Z\alpha\epsilon} \\ &\quad \times \frac{\nu + k + 1 - \kappa + Z\alpha\epsilon}{(\nu + k + 1 - \kappa) [\epsilon(\nu + k + 1 + \kappa) - Z\alpha] + Z\alpha(\nu + k + 1 - \kappa + Z\alpha\epsilon)} \\ &= A_k \frac{\nu + k + 1 - \kappa + Z\alpha\epsilon}{\nu + k - \kappa + Z\alpha\epsilon} \frac{2(\nu + k) + Z\alpha(\epsilon - 1/\epsilon)}{(\nu + k + 1)^2 - \kappa^2 + (Z\alpha)^2}. \end{aligned} \quad (1.230)$$

Für  $k \rightarrow \infty$  geht dies gegen

$$A_{k+1} \longrightarrow A_k \frac{2}{k+1} = A_{k-1} \frac{2 \cdot 2}{(k+1)k} = \dots \sim \frac{2^{k+1}}{(k+1)!},$$

was bedeutet, dass die Potenzreihe (1.224) bis auf ein Polynom endlicher Ordnung in  $\rho$  wie folgt abgeschätzt werden kann:

$$\sum_{k=0}^{\infty} A_k \rho^k \sim \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2\rho)^k}{k!} \equiv e^{2\rho}.$$

Dann divergiert aber die Funktion  $f_R$  im Unendlichen,

$$f_R \sim \rho^\nu e^{2\rho} e^{-\rho} \sim \rho^\nu e^\rho,$$

und die Lösung ist nicht normierbar. Der Ausweg ist zu fordern, dass die Potenzreihe (1.224) bei einem gewissen  $k = N < \infty$  abbricht, also dass  $A_k \equiv 0 \quad \forall k > N$ . Dies ist die gesuchte **Abbruchbedingung**, die letztlich eine **Bedingungsgleichung für die Energie-Eigenwerte** darstellt.

Betrachten wir den Ausdruck (1.230) für  $k = N$ , also für den Wert von  $k$ , für den der Koeffizient  $A_{N+1} \equiv 0$  wird, dann erkennen wir, dass dies nur dann der Fall ist, wenn einer

der Zähler der beiden Brüche verschwindet. Für  $\kappa < 0$  ist der erste Zähler nie negativ, kann also nicht verschwinden, und für  $\kappa > 0$  ist

$$\kappa - \nu = \kappa - \sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha)^2} = \kappa - \kappa \left[ 1 - \frac{(Z\alpha)^2}{2\kappa^2} + O\left(\frac{Z^4\alpha^4}{\kappa^4}\right) \right] \simeq \frac{(Z\alpha)^2}{2\kappa} \ll 1.$$

Also ist  $1 + \nu - \kappa$  ein Wert, der ein wenig kleiner als 1, aber nie negativ ist. Dann kann aber der erste Zähler auch für  $\kappa > 0$  nie null werden. Es bleibt nur die Möglichkeit, dass der zweite Zähler bei  $k = N$  eine Nullstelle hat,

$$2(\nu + N) = \frac{Z\alpha}{\epsilon} (1 - \epsilon^2) = Z\alpha \sqrt{\frac{mc^2 + E}{mc^2 - E}} \frac{mc^2 + E - mc^2 + E}{mc^2 + E} = \frac{2Z\alpha E}{\sqrt{m^2c^4 - E^2}},$$

bzw.

$$\begin{aligned} (m^2c^4 - E^2)(\nu + N)^2 &= (Z\alpha)^2 E^2 \\ \Leftrightarrow E^2 [(\nu + N)^2 + (Z\alpha)^2] &= m^2c^4(\nu + N)^2, \end{aligned}$$

also

$$\begin{aligned} E_{N,\kappa} &= mc^2 \sqrt{\frac{(\nu + N)^2}{(\nu + N)^2 + (Z\alpha)^2}} = mc^2 \sqrt{1 - \frac{(Z\alpha)^2}{\kappa^2 - (Z\alpha)^2 + 2\nu N + N^2 + (Z\alpha)^2}} \\ &= mc^2 \sqrt{1 - \frac{(Z\alpha)^2}{(N + |\kappa|)^2 + 2N(\sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha)^2} - |\kappa|)}}. \end{aligned} \quad (1.231)$$

Man beachte, dass aufgrund der Rekursionsformel (1.230) auch alle Koeffizienten  $A_k$  mit  $k > N + 1$  verschwinden, da im Zähler immer ein Faktor  $2(\nu + N) + Z\alpha(\epsilon - 1/\epsilon) \equiv 0$  auftritt. Die Reihe (1.224) bricht also in der Tat ab.

Es gibt noch eine Besonderheit zu beachten: für  $\kappa > 0$  kann das kleinstmögliche  $N$ , bei dem die Reihe abbricht, nicht null sein. Falls nämlich  $N = 0$ , wird die erwartete Nullstelle im Zähler durch eine ebensolche im Nenner aufgehoben. Um dies zu sehen, erweitern wir den in Frage kommenden Bruch mit Eins,

$$\begin{aligned} \frac{2\nu + Z\alpha\epsilon - Z\alpha/\epsilon}{\nu + Z\alpha\epsilon - \kappa} &= \frac{2\nu + Z\alpha\epsilon - Z\alpha/\epsilon}{\nu + Z\alpha\epsilon - \kappa} \frac{\nu + Z\alpha\epsilon + \kappa}{\nu + Z\alpha\epsilon + \kappa} \\ &= \frac{(2\nu + Z\alpha\epsilon - Z\alpha/\epsilon)(\nu + Z\alpha\epsilon + \kappa)}{\kappa^2 - (Z\alpha)^2 + 2\nu Z\alpha\epsilon + (Z\alpha\epsilon)^2 - \kappa^2} \\ &= \frac{(2\nu + Z\alpha\epsilon - Z\alpha/\epsilon)(\nu + Z\alpha\epsilon + \kappa)}{Z\alpha\epsilon(2\nu + Z\alpha\epsilon - Z\alpha/\epsilon)} \equiv \frac{\nu + Z\alpha\epsilon + \kappa}{Z\alpha\epsilon} \neq 0. \end{aligned}$$

Wir müssen den Fall  $\kappa > 0$ ,  $N = 0$  daher in der folgenden Diskussion ausschließen.

Wir definieren nun eine **neue Quantenzahl**

$$n \equiv N + |\kappa| \geq 1. \quad (1.232)$$

Da für  $\kappa > 0$  der Wert  $N = 0$  auszuschließen ist, haben wir

$$n > \kappa \equiv \ell \quad \text{für } \kappa > 0$$

## 1 Relativistische Wellengleichungen

und

$$n \geq -\kappa \equiv \ell + 1 \quad \text{für} \quad \kappa < 0 .$$

Also ist einerseits

$$-n \leq \kappa < n , \quad (1.233)$$

und andererseits

$$n > \ell \geq 0 . \quad (1.234)$$

Dies zeigt, dass die neue Quantenzahl  $n$  die aus der nichtrelativistischen Diskussion bekannte **Hauptquantenzahl** ist. Ersetzt man  $N$  durch  $n \equiv N + |\kappa|$  und  $|\kappa| \equiv j + \frac{1}{2}$ , vgl. Gl. (1.203), so folgt für die Energie-Eigenwerte (1.231)

$$E_{nj} = mc^2 \sqrt{1 - \frac{(Z\alpha)^2}{n^2 + 2(n - j - \frac{1}{2}) \left[ \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2} - j - \frac{1}{2} \right]}} . \quad (1.235)$$

Dies sind die Energie-Eigenwerte für gebundene Lösungen der Dirac-Gleichung im Coulomb-Potential eines wasserstoffähnlichen Atomkerns.

Für  $Z\alpha \ll 1$  läßt sich der Ausdruck (1.235) entwickeln. Mit

$$\sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2} - j - \frac{1}{2} \simeq -\frac{(Z\alpha)^2}{2(j + \frac{1}{2})}$$

und

$$\frac{(Z\alpha)^2}{n^2 - (Z\alpha)^2(n - j - \frac{1}{2}) / (j + \frac{1}{2})} \simeq \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left[ 1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left( \frac{n}{j + \frac{1}{2}} - 1 \right) \right]$$

erhalten wir aus Gl. (1.235) bis auf Terme der Ordnung  $O[(Z\alpha)^6]$

$$\begin{aligned} E_{nj} &= mc^2 \left[ 1 - \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} - \frac{(Z\alpha)^4}{8n^4} - \frac{(Z\alpha)^4}{2n^4} \left( \frac{n}{j + \frac{1}{2}} - 1 \right) \right] + O[(Z\alpha)^6] \\ &= mc^2 \left[ 1 - \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} - \frac{(Z\alpha)^4}{2n^4} \left( \frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right] + O[(Z\alpha)^6] . \end{aligned} \quad (1.236)$$

Der erste Term ist die Ruheenergie. Der zweite ist mit der **Rydberg-Energie**

$$E_R \equiv \frac{\hbar^2}{2m a_B^2} = \frac{m e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = mc^2 \frac{\alpha^2}{2}$$

gerade identisch mit

$$E_{nr} = -mc^2 \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} \equiv -E_R \frac{Z^2}{n^2} , \quad (1.237)$$

also der **nichtrelativistischen Energie** im  $n$ -ten Energieniveau. Der letzte Term in Gl. (1.236) stellt die erste relativistische Korrektur dar, beinhaltet also beispielsweise die in Abschnitt 1.2.12 besprochene **Spin-Bahn-Kopplung**, und liefert die **Feinstruktur** der Energiespektren, da die Entartung zu gegebener Hauptquantenzahl  $n$  aber unterschiedlichem Gesamtdrehimpuls  $j$  durch diesen Term aufgehoben wird.



$n$	$\kappa$	$j$	$\ell$	Bezeichnung ( $n\ell_j$ )	$E_{nj}[mc^2]$	Reihenfolge
1	-1	$\frac{1}{2}$	0	$1S_{1/2}$	$\sqrt{1 - (Z\alpha)^2}$	0
2	-2	$\frac{3}{2}$	1	$2P_{3/2}$	$\sqrt{1 - \frac{1}{4}(Z\alpha)^2}$	2
	-1	$\frac{1}{2}$	0	$2S_{1/2}$	$\sqrt{1 - \frac{1}{2} \frac{(Z\alpha)^2}{1 + \sqrt{1 - (Z\alpha)^2}}}$	1
1	$\frac{1}{2}$	1	$2P_{1/2}$			
3	-3	$\frac{5}{2}$	2	$3D_{5/2}$	$\sqrt{1 - \frac{1}{9}(Z\alpha)^2}$	5
	-2	$\frac{3}{2}$	1	$3P_{3/2}$	$\sqrt{1 - \frac{(Z\alpha)^2}{5 + 2\sqrt{4 - (Z\alpha)^2}}}$	4
	2	$\frac{3}{2}$	2	$3D_{3/2}$		
	-1	$\frac{1}{2}$	0	$3S_{1/2}$	$\sqrt{1 - \frac{(Z\alpha)^2}{5 + 4\sqrt{1 - (Z\alpha)^2}}}$	3
1	$\frac{1}{2}$	1	$3P_{1/2}$			

Tabelle 1.3: Tabelle der niedrigsten Energie-Niveaus des relativistischen Elektrons in wasserstoffähnlichen Atomen. Die Bezeichnung für den Bahndrehimpuls  $\ell$  folgt dem aus der nichtrelativistischen Diskussion bekannten Schema  $\ell = S, P, D, \dots$  für  $\ell = 0, 1, 2, \dots$

In Tab. 1.3 sind die niedrigsten Energie-Niveaus des Elektrons in wasserstoffähnlichen Atomen entsprechend ihren Quantenzahlen aufgeführt. Man erkennt die Entartung der Energie-Niveaus zu gleichem  $n$  und  $j$ , aber umgekehrter Parität ( $\pm\kappa$ ). In der letzten Spalte ist die Reihenfolge der Energie-Niveaus, beginnend vom Grundzustand, aufgeführt. Die relativistischen Korrekturen sorgen dafür, dass beispielsweise der  $2P_{3/2}$ -Zustand etwas höher als der  $2P_{1/2}$ -Zustand liegt.

Das Termschema des relativistischen Wasserstoffatoms ist in Abb. 1.3 dargestellt. Die linke Spalte entspricht der nichtrelativistischen Behandlung. Die nächste stellt die eben diskutierten relativistischen Resultate dar. In der dritten sind Effekte von Strahlungskorrekturen aus der quantenfeldtheoretischen Behandlung im Rahmen der **Quantenelektrodynamik** mit berücksichtigt. Die sog. **Lamb-Verschiebung** sorgt dabei für eine Aufhebung der Entartung von beispielsweise dem  $2S_{1/2}$ - und dem  $2P_{1/2}$ -Niveau. In der vierten Spalte schließlich sind noch die Korrekturen der **Hyperfeinaufspaltung** angedeutet, die von der Wechselwirkung mit dem Spin des Atomkerns herrühren.

Zum Ende dieses Abschnitts wollen wir noch die **Wellenfunktion im Grundzustand**, d.h. für  $n = 1$ ,  $\kappa = -1$ ,  $j = 1/2$ ,  $\ell = 0$ , also im  $1S_{1/2}$ -Zustand untersuchen. Weil  $\ell = m_\ell \equiv 0$ , ist  $m \equiv s = \pm 1/2$ , s. Gl. (1.197). Es gilt dann

$$\psi_{1/2,s}^{-1}(\vec{r}) = \begin{pmatrix} f_{1/2}^{-1}(r) \mathcal{Y}_{1/2,s}^{-1}(\hat{r}) \\ ig_{1/2}^{-1}(r) \mathcal{Y}_{1/2,s}^{+1}(\hat{r}) \end{pmatrix}. \quad (1.238)$$

Aufgrund von Gl. (1.207) ist

$$i\mathcal{Y}_{1/2,s}^{+1}(\hat{r}) = -i\hat{\sigma} \cdot \hat{r} \mathcal{Y}_{1/2,s}^{-1}(\hat{r}).$$

# 1 Relativistische Wellengleichungen

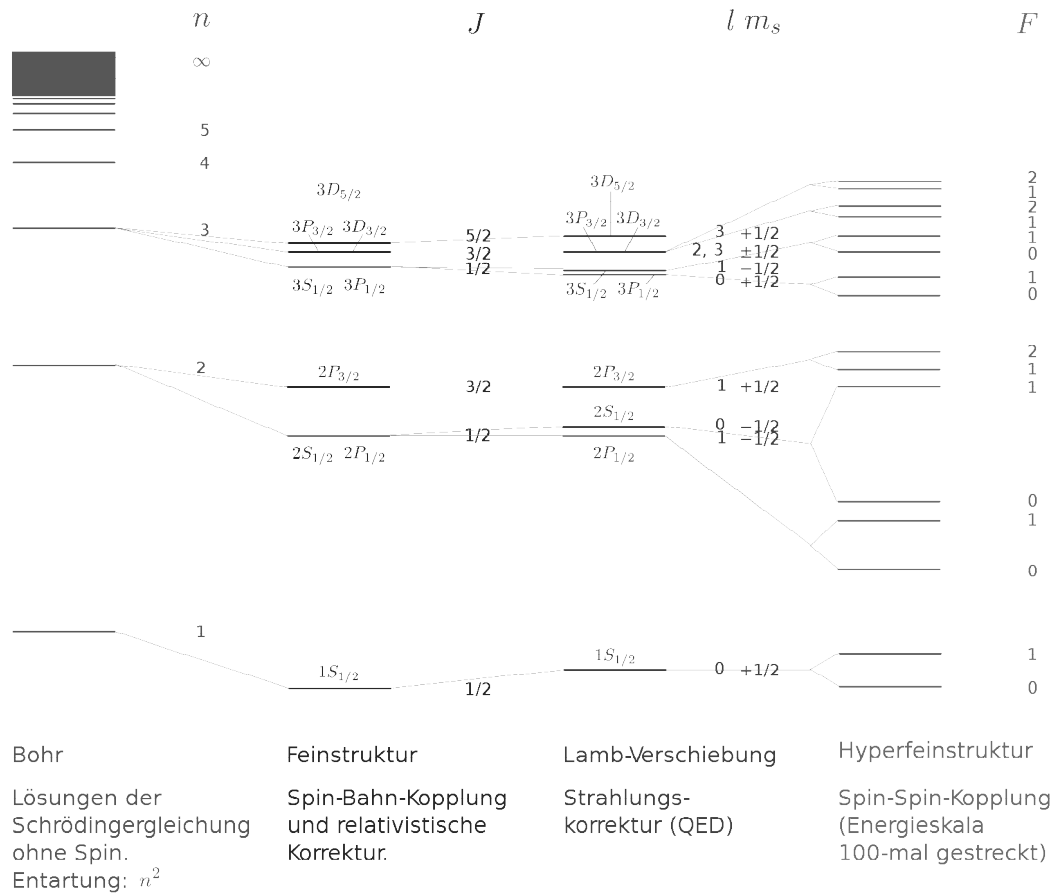


Abbildung 1.3: Termschema des relativistischen Wasserstoffatoms [9].

Ferner ist nach Gl. (1.204)

$$\mathcal{Y}_{1/2,s}^{-1}(\hat{r}) = \sqrt{\frac{1}{2} + s} \chi_{+1/2} Y_{0,s-1/2}(\hat{r}) + \sqrt{\frac{1}{2} - s} \chi_{-1/2} Y_{0,s+1/2}(\hat{r}) .$$

Die Kugelflächenfunktionen verschwinden für  $|m_\ell| > \ell$ , also muss für den ersten Term  $s = +1/2$  und für den zweiten  $s = -1/2$  gelten. In beiden Fällen nimmt die Kugelflächenfunktion den Wert

$$Y_{00}(\hat{r}) \equiv \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

an. Wir erhalten somit

$$\mathcal{Y}_{1/2,s}^{-1}(\hat{r}) = \frac{\chi_s}{\sqrt{4\pi}} , \quad s = \pm \frac{1}{2} .$$

Damit haben wir für die Grundzustandswellenfunktion

$$\psi_{1/2,s}^{-1}(\vec{r}) \equiv \psi_{1/2,s}^{-1}(r) = \frac{\chi_s}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} f_{1/2}^{-1}(r) \\ -i\hat{\sigma} \cdot \hat{r} g_{1/2}^{-1}(r) \end{pmatrix} . \quad (1.239)$$

Die Grundzustandswellenfunktion ist offensichtlich kugelsymmetrisch. Die Radialfunktionen besitzen die Potenzreihendarstellungen (1.224). Für  $n = N + |\kappa| = 1$  und  $\kappa = -1$  brechen diese schon nach dem ersten Term ( $N = 0$ ) ab. Mit  $E_{1,1/2} = mc^2 \sqrt{1 - (Z\alpha)^2}$  ist

$$\rho = \frac{r}{\hbar c} \sqrt{m^2 c^4 - E_{1,1/2}^2} = \frac{r}{\hbar c} \sqrt{m^2 c^4 (1 - 1 + (Z\alpha)^2)} = \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c} r ,$$

und damit

$$\begin{aligned} f_{1/2}^{-1}(r) &= \frac{1}{r} \rho^\nu A_0 e^{-\rho} \equiv \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c} \rho^{\sqrt{1-(Z\alpha)^2}-1} e^{-\rho} A_0 , \\ g_{1/2}^{-1}(r) &= \frac{1}{r} \rho^\nu B_0 e^{-\rho} \equiv \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c} \rho^{\sqrt{1-(Z\alpha)^2}-1} e^{-\rho} B_0 . \end{aligned} \quad (1.240)$$

Es gilt

$$\epsilon = \sqrt{\frac{mc^2 - E_{1,1/2}}{mc^2 + E_{1,1/2}}} = \sqrt{\frac{1 - \sqrt{1 - (Z\alpha)^2}}{1 + \sqrt{1 - (Z\alpha)^2}}} = \frac{1 - \sqrt{1 - (Z\alpha)^2}}{Z\alpha}$$

und damit aufgrund von Gl. (1.229)

$$\begin{aligned} B_0 &= A_0 \frac{\epsilon(\nu + \kappa) - Z\alpha}{\nu - \kappa + Z\alpha\epsilon} = A_0 \frac{\epsilon(\sqrt{1 - (Z\alpha)^2} - 1) - Z\alpha}{\sqrt{1 - (Z\alpha)^2} + 1 + Z\alpha\epsilon} \\ &= -\frac{A_0}{2Z\alpha} \left[ (Z\alpha)^2 + \left(1 - \sqrt{1 - (Z\alpha)^2}\right)^2 \right] = -\frac{A_0}{Z\alpha} \left(1 - \sqrt{1 - (Z\alpha)^2}\right) , \end{aligned}$$

Für  $Z\alpha \ll 1$  können wir wieder entwickeln,

$$\frac{1 - \sqrt{1 - (Z\alpha)^2}}{Z\alpha} \simeq \frac{Z\alpha}{2} .$$

Also ist

$$\begin{aligned} f_{1/2}^{-1}(r) &\simeq \frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c} \rho^{-(Z\alpha)^2/2} e^{-\rho} A_0 , \\ g_{1/2}^{-1}(r) &\simeq -\frac{Z\alpha mc^2}{\hbar c} \rho^{-(Z\alpha)^2/2} e^{-\rho} A_0 \frac{Z\alpha}{2} \equiv -\frac{Z\alpha}{2} f_{1/2}^{-1}(r) . \end{aligned}$$

Die unteren Komponenten der Wellenfunktion sind also um einen Faktor  $Z\alpha/2 \ll 1$  kleiner als die oberen. Es gibt einen wichtigen Unterschied zur nichtrelativistischen Grundzustandswellenfunktion: die relativistische Wellenfunktion divergiert am Ursprung wie  $r^{-(Z\alpha)^2/2}$ . Diese Divergenz ist wegen  $Z\alpha \ll 1$  jedoch sehr schwach und die Wellenfunktion ist nach wie vor integrierbar. Die Normierungskonstante  $A_0$  ist aus der Forderung

$$1 \equiv \sum_{s=\pm 1/2} \int d^3\vec{r} |\psi_{1/2,s}^{-1}(\vec{r})|^2$$

bestimmbar.

### 1.3 Die Proca-Gleichung

Wir haben in den vorangegangenen Abschnitten relativistische Wellengleichungen für Teilchen mit Spin 0 (Klein-Gordon-Gleichung) und mit Spin 1/2 (Dirac-Gleichung). Es gibt auch Wellengleichungen für Teilchen mit höherem Spin. Photonen beispielsweise sind **masselose** Teilchen mit Spin 1; die Lagrangedichte ist in Gl. (1.4) gegeben und die zugehörigen Euler-Lagrange-Gleichungen sind die Maxwell-Gleichungen (1.1). Es ist naheliegend, für Spin-1-Teilchen einen ähnlichen Ansatz für die Lagrange-Dichte zu wählen. Allerdings muss im Fall von Teilchen mit **Masse**  $m \neq 0$  die Lagrange-Dichte noch um einen **Massenterm** erweitert werden. Vernachlässigen wir die Kopplung an externe Ströme, so lautet die zugehörige Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L}_{\text{Proca}} = -\frac{(\hbar c)^2}{4} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} + \frac{m^2 c^4}{2} V^\mu V_\mu, \quad (1.241)$$

mit dem Feldstärketensor

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu V^\nu - \partial^\nu V^\mu, \quad (1.242)$$

wobei das "4-Vektorpotential"  $V^\mu$  das massive Spin-1-Feld beschreibt. Man beachte, dass die Einheiten so gewählt sind, dass  $V^\mu$  die gleiche Dimension wie das Klein-Gordon-Feld  $\phi$  besitzt. Aus der Euler-Lagrange-Gleichung

$$0 = \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}_{\text{Proca}}}{\partial(\partial_\mu V_\nu)} - \frac{\partial \mathcal{L}_{\text{Proca}}}{\partial V_\nu} \quad (1.243)$$

erhalten wir die sog. **Proca-Gleichung**

$$0 = \hbar^2 \partial_\mu F^{\mu\nu} + m^2 c^2 V^\nu = (\hbar^2 \square + m^2 c^2) V^\nu - \hbar^2 \partial^\nu \partial_\mu V^\mu, \quad (1.244)$$

wobei wir im zweiten Schritt die Definition (1.242) des Feldstärketensors benutzt haben.

Teilchen mit Spin 1 besitzen entsprechend ihrer möglichen Spin-Einstellrichtungen (+1, 0, -1) **drei** Freiheitsgrade. Das Proca-Feld  $V^\mu$  hat aber zunächst vier unabhängige Komponenten. Es muss also eine **zusätzliche** Bedingung geben, die erlaubt, eine der vier Komponenten von  $V^\mu$  zu eliminieren. Diese erhalten wir, wenn wir die 4-Divergenz der Proca-Gleichung (1.244) bilden,

$$0 = (\hbar^2 \square + m^2 c^2) \partial_\nu V^\nu - \hbar^2 \square \partial_\mu V^\mu \equiv m^2 c^2 \partial_\nu V^\nu,$$

oder, da  $m \neq 0$ ,

$$0 = \partial_\mu V^\mu. \quad (1.245)$$

Diese zusätzliche Bedingung ist identisch mit der **Lorenz-Eichung** in der Elektrodynamik. Sie erlaubt, eine der vier Komponenten, z.B.  $V^0$ , durch die anderen drei auszudrücken. Benutzen wir Gl. (1.245), so vereinfacht sich die Proca-Gleichung (1.244) zu

$$0 = (\hbar^2 \square + m^2 c^2) V^\mu. \quad (1.246)$$

Diese Gleichung besagt, dass **jede** der Komponenten von  $V^\mu$  für sich die **Klein-Gordon-Gleichung** erfüllt.

Eine Wellengleichung für Teilchen mit Spin 3/2 ist die sog. **Rarita-Schwinger-Gleichung** und wird in Übungsaufgabe 4.2 behandelt.

## 2 Symmetrien

22.5.2012

Der Begriff der **Symmetrie**, d.h. der **Invarianz** einer Theorie unter bestimmten **Transformationen** der in ihr enthaltenen Größen, spielt eine wichtige, wenn nicht sogar die wichtigste Rolle, in der mathematischen Formulierung der Naturgesetze. Wir hatten den Symmetriebegriff schon in Abschnitt 1.4 der Vorlesung “Analytische Mechanik und Spezielle Relativitätstheorie” diskutiert. Wir hatten dort gesehen, dass die **Invarianz der Wirkung** unter **Koordinatentransformationen**

$$\begin{aligned}t &\longrightarrow t'(t), \\ \vec{q}(t) &\longrightarrow \vec{q}'(\vec{q}(t), t),\end{aligned}$$

gemäß dem **Noetherschen Theorem** zu **Integralen der Bewegung**, d.h. zu **Erhaltungssätzen** führt. Eine Transformation, die die Wirkung invariant läßt bezeichnet man als **Symmetrietransformation**.

Wie wir in diesem Kapitel sehen werden, läßt sich der Symmetriebegriff auch auf **quantenmechanische Systeme** übertragen. Auch hier werden wir auf **Integrale der Bewegung** geführt. Wir werden allerdings nicht wie beim Noether-Theorem den Zugang über die Invarianz der Wirkung wählen, sondern direkt das Verhalten der Schrödinger-Gleichung unter Symmetrietransformationen untersuchen.

Um die mathematische Struktur von Symmetrietransformationen in der Quantenmechanik zu verstehen, werden wir eine kurze Einführung in die **Gruppentheorie** geben. Wir werden dann sehen, dass sich Symmetrien einer Theorie nicht nur auf die Invarianz unter Koordinatentransformationen beschränken. Mindestens genauso wichtig ist die Klasse der sog. **internen Symmetrien**, d.h. Transformationen, die nicht mit den Raum-Zeit-Koordinaten des Systems zusammenhängen. In diesem Zusammenhang diskutieren wir die **Isospin-Symmetriegruppe** und die **Flavor-Symmetriegruppe**, die für die Physik der Starken Wechselwirkung von großer Bedeutung ist.

### 2.1 Symmetrien in der Quantenmechanik

#### 2.1.1 Raum-Translationen

Wir betrachten den Hilbert-Raum-Zustand  $|\psi\rangle$ . Diesem Zustand kann man gemäß

$$|\psi\rangle \longrightarrow \psi(\vec{r}) \equiv \langle \vec{r} | \psi \rangle$$

eine **Wellenfunktion** im Ortsraum zuordnen. Wir betrachten nun eine **Translation im Raum**

$$\vec{r} \longrightarrow \vec{r}' = \vec{r} + \vec{a}, \quad (2.1)$$

## 2 Symmetrien

wobei  $\vec{a} = \overrightarrow{const.}$ . Wenn wir fordern, dass die Physik **invariant** unter solchen Raum-Translationen ist, also dass die Raum-Translation (2.1) eine **Symmetrietransformation** ist, dann muss für die transformierte Wellenfunktion gelten

$$\psi'(\vec{r}') \equiv \psi(\vec{r}) , \quad (2.2)$$

d.h. die transformierte Wellenfunktion  $\psi'$  am transformierten Ort  $\vec{r}'$  muss gleich der ursprünglichen Wellenfunktion  $\psi$  am ursprünglichen Ort  $\vec{r}$  sein. Mit Gl. (2.1) läßt sich Gl. (2.2) wie folgt schreiben

$$\psi'(\vec{r} + \vec{a}) = \psi(\vec{r}) \quad \text{oder} \quad \psi'(\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \vec{a}) . \quad (2.3)$$

Die letzte Gleichung läßt sich mit dem sog. **räumlichen Verschiebungsoperator**  $\hat{U}_r(\vec{a})$  wie folgt ausdrücken,

$$\psi'(\vec{r}) = \hat{U}_r(\vec{a}) \psi(\vec{r}) . \quad (2.4)$$

Wenn eine Raum-Translation eine Symmetrietransformation ist, kann sie keinen Einfluß darauf haben, ob ein Zustand häufiger oder seltener auftritt. Aufgrund der **Wahrscheinlichkeitserhaltung** gilt daher

$$\begin{aligned} \langle \psi' | \psi' \rangle &= \int d^3\vec{r}' \langle \psi' | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \psi' \rangle = \int d^3\vec{r} \psi'^*(\vec{r}) \psi'(\vec{r}) = \int d^3\vec{r} \left[ \hat{U}_r(\vec{a}) \psi(\vec{r}) \right]^* \hat{U}_r(\vec{a}) \psi(\vec{r}) \\ &= \int d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r}) \hat{U}_r^\dagger(\vec{a}) \hat{U}_r(\vec{a}) \psi(\vec{r}) \equiv \int d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = \langle \psi | \psi \rangle . \end{aligned} \quad (2.5)$$

Dies bedeutet, dass  $\hat{U}_r(\vec{a})$  ein **unitärer** Operator sein muss,

$$\hat{U}_r^\dagger(\vec{a}) \hat{U}_r(\vec{a}) \equiv \mathbb{1} \quad \iff \quad \hat{U}_r^\dagger(\vec{a}) = \hat{U}_r^{-1}(\vec{a}) . \quad (2.6)$$

Wir wollen diesen Operator jetzt explizit bestimmen. O.B.d.A. betrachten wir eine Verschiebung in  $x$ -Richtung,  $\vec{a} = (a, 0, 0)^T$  und entwickeln die rechte Seite von Gl. (2.3) in eine Taylor-Reihe um  $\vec{r}$ ,

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r} - \vec{a}) &= \psi(\vec{r}) - a \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r}) + \frac{1}{2!} a^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(\vec{r}) - \frac{1}{3!} a^3 \frac{\partial^3}{\partial x^3} \psi(\vec{r}) + \dots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-a)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} \psi(\vec{r}) \equiv \exp\left(-a \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi(\vec{r}) \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} a \hat{p}^x\right) \psi(\vec{r}) \equiv \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{\vec{p}}\right) \psi(\vec{r}) , \end{aligned}$$

wobei wir den Impuls-Operator  $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$  benutzt haben. Durch Vergleich mit Gl. (2.4) identifizieren wir

$$\hat{U}_r(\vec{a}) \equiv \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{\vec{p}}\right) . \quad (2.7)$$

Diese Form des Raum-Translationsoperators gilt auch für beliebige  $\vec{a}$ . Da  $\hat{\vec{p}}$  (als Observable) ein **hermitescher** Operator ist,  $\hat{\vec{p}}^\dagger \equiv \hat{\vec{p}}$ , ist die Unitarität (2.6) des Raum-Translationsoperators  $\hat{U}_r(\vec{a})$  sofort offensichtlich:

$$\hat{U}_r^\dagger(\vec{a}) = \exp\left(+\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{\vec{p}}\right) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} (-\vec{a}) \cdot \hat{\vec{p}}\right] = \hat{U}_r(-\vec{a}) ,$$

wobei wir  $\vec{a} \in \mathbb{R}^3$  benutzt haben. Weil aber eine Verschiebung um  $-\vec{a}$  die ursprüngliche Verschiebung um  $+\vec{a}$  rückgängig macht,

$$\hat{U}_r(-\vec{a}) \hat{U}_r(\vec{a}) \equiv \mathbb{1} ,$$

gilt

$$\hat{U}_r^\dagger(\vec{a}) = \hat{U}_r(-\vec{a}) = \hat{U}_r^{-1}(\vec{a}) , \quad \text{q.e.d.} . \quad (2.8)$$

Falls die Raum-Translation (2.1) eine Symmetrietransformation ist, bleibt der Hamilton-Operator **invariant**,

$$\hat{H} \longrightarrow \hat{H}' \equiv \hat{H} \quad (\vec{r} \longrightarrow \vec{r}' = \vec{r} + \vec{a}) . \quad (2.9)$$

Die transformierte Wellenfunktion (2.2) erfüllt natürlich auch eine Schrödinger-Gleichung. Berücksichtigen wir gleich eine mögliche Zeitabhängigkeit, so lautet diese

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi'(t, \vec{r}) = \hat{H} \psi'(t, \vec{r}) . \quad (2.10)$$

Setzen wir Gl. (2.4) ein (eine mögliche Zeitabhängigkeit der Wellenfunktion läßt diese Gleichung unverändert), so erhalten wir, da Zeit- und Ortsableitungen miteinander vertauschen,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}_r(\vec{a}) \psi(t, \vec{r}) \equiv \hat{U}_r(\vec{a}) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r, \vec{r}) = \hat{H} \hat{U}_r(\vec{a}) \psi(t, \vec{r}) . \quad (2.11)$$

Da auch die untransformierte Wellenfunktion die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung erfüllt,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \vec{r}) = \hat{H} \psi(t, \vec{r}) , \quad (2.12)$$

können wir Gl. (2.11) schreiben als

$$\hat{U}_r(\vec{a}) \hat{H} \psi(t, \vec{r}) = \hat{H} \hat{U}_r(\vec{a}) \psi(t, \vec{r}) , \quad (2.13)$$

bzw., da dies für beliebige Wellenfunktionen  $\psi(t, \vec{r})$  gelten muss,

$$\hat{U}_r(\vec{a}) \hat{H} = \hat{H} \hat{U}_r(\vec{a}) \quad \iff \quad [\hat{U}_r(\vec{a}), \hat{H}] = 0 . \quad (2.14)$$

Eine Raum-Translation ist also eine **Symmetrietransformation**, wenn der Raum-Translationsoperator  $\hat{U}_r(\vec{a})$  mit dem Hamilton-Operator des Systems vertauscht. Dies muss auch für **infinitesimale** Raum-Translationen,  $|\vec{a}| \ll 1$ , gelten. Für solche kann man den Raum-Translationsoperator (2.7) in eine Taylor-Reihe entwickeln,

$$\hat{U}_r(\vec{a}) \simeq \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{\vec{p}} , \quad (2.15)$$

wobei wir Terme der Größenordnung  $O(a^2)$  vernachlässigen können. Eingesetzt in Gl. (2.14) ergibt sich

$$\left[ \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{\vec{p}}, \hat{H} \right] \equiv \frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot [\hat{\vec{p}}, \hat{H}] = 0 \quad \iff \quad [\hat{\vec{p}}, \hat{H}] = 0 , \quad (2.16)$$

weil der infinitesimale Verschiebungsvektor  $\vec{a}$  beliebig ist. Für **raumtranslationsinvariante Systeme** vertauscht also der **Impuls-Operator** mit dem Hamilton-Operator. Damit ist der **Impuls** aber auch gleichzeitig ein **Integral der Bewegung** (vgl. Diskussion in Abschnitt 3.3.3 der Vorlesung ‘‘Quantenmechanik I’’), d.h. es gilt die **Impulserhaltung**, und man kann ein System von Eigenzuständen von  $\hat{H}$  finden, die gleichzeitig Eigenzustände von  $\hat{\vec{p}}$  sind.

### 2.1.2 Zeit-Translationen

Wir betrachten nun **Translationen der Zeit**,

$$t \longrightarrow t' = t + a, \quad (2.17)$$

wobei  $a = \text{const.}$ . Wir fordern, dass die Physik **invariant** unter solchen Translationen in der Zeit ist, also die Zeit-Translation (2.17) eine **Symmetrietransformation** ist. Dann muss für die transformierte Wellenfunktion gelten (wir unterdrücken eine mögliche Ortsabhängigkeit, da sie für das folgende keine Rolle spielt)

$$\psi'(t') = \psi(t), \quad (2.18)$$

d.h. die transformierte Wellenfunktion  $\psi'$  zur verschobenen Zeit  $t'$  muss identisch mit der ursprünglichen Wellenfunktion  $\psi$  zur ursprünglichen Zeit  $t$  sein. Setzen wir Gl. (2.17) ein, so läßt sich dies folgendermaßen schreiben,

$$\psi'(t+a) = \psi(t) \iff \psi'(t) = \psi(t-a) \equiv \hat{U}_t(a) \psi(t), \quad (2.19)$$

wobei wir in Analogie zum vorangegangenen Abschnitt die Wirkung der Zeit-Translation wieder durch einen Operator, den sog. **Zeit-Translationsoperator**  $\hat{U}_t(a)$ , ausgedrückt haben. In völliger Analogie zu Herleitung des Raum-Translationsoperators (2.7) erhalten wir nun

$$\hat{U}_t(a) = \exp\left(-a \frac{\partial}{\partial t}\right) \equiv \exp\left(\frac{i}{\hbar} a \hat{E}\right), \quad (2.20)$$

mit dem **Energie-Operator**  $\hat{E} \equiv i\hbar\partial/\partial t$ . Die Unitarität des Zeit-Translationsoperators folgt aus der Hermitizität des Energie-Operators,  $\hat{E}^\dagger \equiv \hat{E}$  (Energie-Eigenwerte sind stets reellwertig) und  $a \in \mathbb{R}$ .

Die Anwendung des Operators (2.20) auf Zustände, die die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung (2.12) erfüllen, ergibt die Identität  $\hat{E} \equiv \hat{H}$ , so dass wir den Zeit-Translationsoperator (2.20) auch schreiben können als

$$\hat{U}_t(a) \equiv \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H} a\right). \quad (2.21)$$

Er ist damit identisch mit dem **Zeit-Entwicklungsoperator** für nicht explizit zeitabhängige Hamilton-Operatoren, vgl. Gl. (3.92) der Vorlesung ‘‘Quantenmechanik I’’. (Man beachte jedoch, dass die Zeitverschiebung (2.17) eine Zeitentwicklung des Zustands  $\psi(t)$  in den Zustand  $\psi(t-a)$  bewirkt, s. Gl. (2.19), also um ein Zeitintervall  $-a$  rückwärts in der Zeit.)

Symmetrie unter Zeit-Translationen bedeutet, dass der Hamilton-Operator **invariant** bleibt,

$$\hat{H} \longrightarrow \hat{H}' \equiv \hat{H} \quad (t \longrightarrow t' = t + a). \quad (2.22)$$

Der zeittranslatierte Zustand  $\psi'(t)$  erfüllt natürlich auch wieder die (zeitabhängige) Schrödinger-Gleichung

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi'(t) &= \hat{H} \psi'(t) \\ \iff i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}_t(a) \psi(t) &\equiv \hat{U}_t(a) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = \hat{U}_t(a) \hat{H} \psi(t) = \hat{H} \hat{U}_t(a) \psi(t), \end{aligned} \quad (2.23)$$



wobei wir Gl. (2.19) und die ursprüngliche Schrödinger-Gleichung (2.12) benutzt haben. Da dies für eine beliebige Wellenfunktion gelten soll, erhalten wir

$$\hat{U}_t(a) \hat{H} = \hat{H} \hat{U}_t(a) \iff [\hat{U}_t(a), \hat{H}] = 0, \quad (2.24)$$

in Analogie zu Gl. (2.14) für Raum-Translationen. Für **zeittranslationsinvariante Systeme** vertauscht also der Zeit-Translationsoperator mit dem Hamilton-Operator. Da dies auch für infinitesimale Zeit-Translationen gelten muss,  $|a| \ll 1$ , gilt aber nach Taylor-Entwicklung des Zeit-Translationsoperators (2.20)

$$[\hat{E}, \hat{H}] = \left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \hat{H} \right] = 0 \iff \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0, \quad (2.25)$$

d.h. der Hamilton-Operator darf **nicht explizit zeitabhängig** sein. Der Zeit-Translationsoperator ist damit für zeittranslationsinvariante Systeme identisch mit dem Zeit-Entwicklungsoperator, vgl. Gl. (2.21). Die mit dieser Symmetrie einhergehende **Erhaltungsgröße** ist die **Gesamtenergie** des Systems.

### 2.1.3 Drehungen

Wir betrachten eine **Drehung im Raum** um den **infinitesimalen** Winkel  $\delta\vec{\phi}$  (um die durch die Richtung von  $\delta\vec{\phi}$  definierte Drehachse),

$$\vec{r} \longrightarrow \vec{r}' = \vec{r} + \delta\vec{\phi} \times \vec{r}. \quad (2.26)$$

Wir fordern, dass dies eine **Symmetrietransformation** ist, d.h.

$$\psi'(\vec{r}') = \psi(\vec{r}) \iff \psi'(\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \delta\vec{\phi} \times \vec{r}). \quad (2.27)$$

Für infinitesimale Drehwinkel,  $|\delta\vec{\phi}| \ll 1$  können wir die rechte Seite wieder in eine Taylor-Reihe entwickeln, die wir nach Termen der Ordnung  $O(\delta\phi)$  abbrechen,

$$\begin{aligned} \psi'(\vec{r}) &= \psi(\vec{r}) - (\delta\vec{\phi} \times \vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}) + O(\delta\phi^2) \\ &\simeq \psi(\vec{r}) - \delta\vec{\phi} \cdot (\vec{r} \times \vec{\nabla}) \psi(\vec{r}) \equiv \left[ \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot (\vec{r} \times \hat{\vec{p}}) \right] \psi(\vec{r}) \\ &= \left( \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot \hat{\vec{L}} \right) \psi(\vec{r}), \end{aligned} \quad (2.28)$$

wobei wir die Definitionen des Skalarproduktes, des Impuls-Operators,  $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$ , und des **Drehimpuls-Operators**,  $\hat{\vec{L}} = \vec{r} \times \hat{\vec{p}}$ , benutzt haben. Wir fordern wieder, dass die Transformation (2.27) durch einen Operator bewirkt wird,

$$\psi'(\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \delta\vec{\phi} \times \vec{r}) = \hat{U}_R(\delta\vec{\phi}) \psi(\vec{r}). \quad (2.29)$$

Vergleich mit Gl. (2.28) zeigt, dass der **infinitesimale Drehoperator** die Form

$$\hat{U}_R(\delta\vec{\phi}) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot \hat{\vec{L}} \quad (2.30)$$

hat. Dies sind die ersten beiden Terme einer Taylor-Entwicklung einer Exponentialfunktion. Der Drehoperator für **beliebige** (nicht notwendigerweise infinitesimale) Drehwinkel ist daher definiert als

$$\hat{U}_R(\vec{\phi}) \equiv \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{\phi} \cdot \hat{\vec{L}}\right). \quad (2.31)$$

Die Unitarität des Drehoperators folgt aus der Hermitezität des Drehimpuls-Operators,  $\hat{\vec{L}}^\dagger = \hat{\vec{L}}$ , und weil  $\vec{\phi} \in \mathbb{R}^3$ .

Für **rotationsinvariante Systeme** gilt wieder, dass der Hamilton-Operator invariant bleibt,

$$\hat{H} \longrightarrow \hat{H}' = \hat{H} \quad (\vec{r} \longrightarrow \vec{r}' = \vec{r} + \vec{\phi} \times \vec{r}). \quad (2.32)$$

Auf dem gleichen Weg wie in den beiden vorangegangenen Abschnitten zeigt man dann, dass

$$\left[\hat{U}_R(\vec{\phi}), \hat{H}\right] = 0, \quad (2.33)$$

also dass der Drehoperator mit dem Hamilton-Operator vertauscht. Für infinitesimale Drehungen ist dies äquivalent mit

$$\left[\hat{\vec{L}}, \hat{H}\right] = 0. \quad (2.34)$$

Dies bedeutet, dass der **Drehimpuls erhalten ist** und dass man ein gemeinsames System von Eigenzuständen von  $\hat{H}$ ,  $\hat{\vec{L}}^2$  und  $\hat{L}^z$  finden kann.

## 2.2 Einführung in die Gruppentheorie

### 2.2.1 Allgemeines über Gruppen

**Definition:** Eine Menge

$$G = \{a, b, c, \dots\}$$

ist eine **Gruppe**, falls es eine **Verknüpfung** (“Multiplikation”)

$$a \circ b$$

von Elementen  $a, b \in G$  gibt, welche folgende Eigenschaften erfüllt:

(i)  $\forall a, b \in G$  ist auch  $a \circ b \in G$ .

Man sagt,  $G$  ist **abgeschlossen** unter der Verknüpfung (Multiplikation) von Gruppenelementen.

(ii)  $\exists e \in G$ , so dass  $\forall a \in G$  gilt  $a \circ e = e \circ a = a$ ,

d.h. es existiert ein sog. **Eins-Element**.

(iii)  $\forall a \in G \exists a^{-1} \in G$ , so dass  $a^{-1} \circ a = a \circ a^{-1} = e$ ,

d.h. es existiert zu jedem Gruppenelement ein **inverses Element**.

(iv)  $\forall a, b, c \in G$  gilt  $(a \circ b) \circ c = a \circ (b \circ c)$ ,

das **Assoziativgesetz der Multiplikation**.

**Definition:** Eine Gruppe heißt **abelsch**, falls  $\forall a, b \in G$  gilt  $a \circ b = b \circ a$ , d.h. die Multiplikation ist **kommutativ**.

**Definition:** Eine Gruppe heißt **kontinuierlich**, falls man die Elemente der Gruppe durch kontinuierliche **Parameter**  $\vec{t} = (t_1, t_2, \dots)^T \in \mathbb{R}^n$  charakterisieren kann, also

$$G = \{ a(\vec{t}), b(\vec{t}), c(\vec{t}), \dots \} .$$

**Definition:** Eine Gruppe heißt **kontinuierlich verbunden**, falls man durch kontinuierliche Veränderung der Parameter  $\vec{t}$  von einem Element der Gruppe zum nächsten gelangt.

**Beispiel 1:** Die Gruppe der Raum-Translationen

$$G_r = \{ \hat{U}_r(\vec{a}), \vec{a} \in \mathbb{R}^3 \}$$

(mit der gewöhnlichen Multiplikation der Gruppenelemente als Verknüpfung) ist eine kontinuierlich verbundene, abelsche Gruppe.

Sie ist kontinuierlich verbunden, weil man durch stetige Veränderung der Parameter  $\vec{a} = (a^x, a^y, a^z)^T$  jedes beliebige Element der Gruppe erzeugen kann.

Sie ist abelsch, weil zwei beliebige Translationen miteinander vertauschen. Es genügt, dies für **infinitesimale** Translationen zu zeigen. Aufgrund der kontinuierlichen Verbundenheit der Gruppe kann man nämlich jede beliebige Translation durch eine (unendliche) Abfolge infinitesimaler Translationen darstellen. Für zwei infinitesimale Translationen um die konstanten Vektoren  $\delta\vec{a}_1$  und  $\delta\vec{a}_2$  gilt

$$\begin{aligned} \hat{U}_r(\delta\vec{a}_1) \hat{U}_r(\delta\vec{a}_2) &= \left( \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{a}_1 \cdot \hat{\vec{p}} \right) \left( \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{a}_2 \cdot \hat{\vec{p}} \right) \\ &= \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} (\delta\vec{a}_1 + \delta\vec{a}_2) \cdot \hat{\vec{p}} - \frac{1}{\hbar^2} \delta a_1^i \delta a_2^j \hat{p}^i \hat{p}^j \\ &= \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} (\delta\vec{a}_1 + \delta\vec{a}_2) \cdot \hat{\vec{p}} - \frac{1}{\hbar^2} \delta a_1^i \delta a_2^j \hat{p}^j \hat{p}^i \\ &= \left( \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{a}_2 \cdot \hat{\vec{p}} \right) \left( \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{a}_1 \cdot \hat{\vec{p}} \right) \equiv \hat{U}_r(\delta\vec{a}_2) \hat{U}_r(\delta\vec{a}_1) , \end{aligned}$$

wobei wir die **Vertauschbarkeit** der Komponenten des Impuls-Operators,

$$[\hat{p}^i, \hat{p}^j] = 0 , \tag{2.35}$$

ausgenutzt haben, q.e.d.

**Beispiel 2:** Dagegen ist die Gruppe der Raumdrehungen,

$$G_R = \{ \hat{U}_R(\vec{\phi}), \vec{\phi} \in [-\pi, \pi]^3 \} , \tag{2.36}$$

zwar kontinuierlich verbunden, aber **nicht-abelsch**, weil

$$[\hat{L}^i, \hat{L}^j] = i\hbar \epsilon^{ijk} \hat{L}_k . \tag{2.37}$$

Der Vertauschungsrest sorgt dafür, dass

24.5.2012

$$\hat{U}_R(\vec{\phi}_1) \hat{U}_R(\vec{\phi}_2) \neq \hat{U}_R(\vec{\phi}_2) \hat{U}_R(\vec{\phi}_1)$$

**Definition:** Eine kontinuierliche Gruppe heißt **kompakt**, falls die Menge aller Werte, die die Parameter  $\vec{t}$  durchlaufen, die sog. **Gruppenmannigfaltigkeit**, kompakt ist.

**Beispiel:** Drehungen in zwei Raum-Dimensionen, also in einer Ebene, werden durch **orthogonale**  $(2 \times 2)$ -Matrizen

$$O(\phi) \equiv \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -\sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}$$

mit Determinante  $\det O(\phi) = \cos^2 \phi + \sin^2 \phi = +1$  vermittelt. Diese bilden die **Gruppe der speziellen orthogonalen  $(2 \times 2)$ -Matrizen**,

$$SO(2) = \{O(\phi), \phi \in [0, 2\pi]\} . \quad (2.38)$$

Es handelt sich um eine **einparametrische** Gruppe, mit dem Drehwinkel  $\phi$  als Gruppenparameter. Da jede Drehung nach  $2\pi$  in sich selbst übergeht, kann man die Gruppenmannigfaltigkeit auf das **kompakte** Intervall  $[0, 2\pi]$  beschränken. Damit ist auch  $SO(2)$  eine kompakte Gruppe.

**Definition:** Zwei Gruppen  $G, H$  heißen **lokal isomorph**, falls es auf Teilmengen  $U \subset G, V \subset H$  eine Bijektion  $\mathcal{F}$  zwischen Gruppenelementen gibt,

$$\forall a \in U \subset G, b \in V \subset H : b = \mathcal{F}(a), a = \mathcal{F}^{-1}(b) .$$

**Beispiel:**  $SO(2)$  ist isomorph zur **Gruppe der unitären Transformationen in einer Dimension**,

$$U(1) = \{e^{i\phi}, \phi \in [0, 2\pi]\} , \quad (2.39)$$

d.h. der Multiplikation mit einem "Phasenfaktor", einer komplexen Zahl vom Betrag 1. Dies kann als Drehung in der **komplexen** Zahlenebene interpretiert werden. Die Existenz einer Bijektion  $\mathcal{F}$  ist nun evident, man muss lediglich jedem Element  $O(\phi) \in SO(2)$  das Element  $e^{i\phi} \in U(1)$  zuordnen.

**Definition:** Falls in der obigen Definition der lokalen Isomorphie  $U = G, V = H$ , spricht man von **globaler Isomorphie**.

**Beispiel:** Da die Gruppenmannigfaltigkeit  $[0, 2\pi]$  für  $SO(2)$  und  $U(1)$  **identisch** ist, sind diese Gruppen also nicht nur lokal, sondern sogar **global isomorph**.

**Definition:** Eine Gruppe heißt **endlich**, falls sie endlich viele Elemente hat, ansonsten heißt sie **unendlich**. Die **Ordnung** einer endlichen Gruppe ist die Zahl ihrer Elemente.

## 2.2.2 Darstellung von Gruppen

**Definition:** Eine **Darstellung** einer Gruppe  $G$  ist eine **Abbildung**  $D$  von Elementen  $g \in G$  auf die Menge  $L$  der **linearen Operatoren**  $D(g)$ ,

$$\begin{aligned} D : G &\rightarrow L, \\ g &\mapsto D(g), \end{aligned}$$

mit den Eigenschaften

(i)  $D(e) \equiv \mathbb{1}$ ,

das Eins-Element wird auf den Einheitsoperator abgebildet, und

(ii)  $D(a \circ b) = D(a)D(b)$ ,

die Gruppenverknüpfung entspricht der Multiplikation auf dem Raum der linearen Operatoren.

**Beispiel 1:**  $e^{i\phi}$  ist streng genommen nicht ein Element der Gruppe  $U(1)$ , sondern die **Darstellung** eines solchen Elements. In der Physik benutzt man die Begriffe “Darstellung eines Gruppenelements” und “Gruppenelement” aber gerne synonym.

**Beispiel 2:** Der lineare Operator  $\hat{U}_r(\vec{a}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{\vec{p}}\right)$  ist streng genommen die **Darstellung** eines Elementes der Gruppe  $G_r$  der Raum-Translationen, nämlich dasjenige, das eine Verschiebung um den Vektor  $\vec{a}$  bewirkt.

**Beispiel 3:** Die **zyklische Gruppe der Ordnung 3**,  $Z_3$ , ist durch die folgende Verknüpfungstabelle definiert:

$\circ$	$e$	$a$	$b$
$e$	$e$	$a$	$b$
$a$	$a$	$b$	$e$
$b$	$b$	$e$	$a$

Tabelle 2.1: Verknüpfungstabelle der  $Z_3$ .

Die Verknüpfungstabelle sorgt für die Abgeschlossenheit der Gruppe. Man erkennt außerdem, dass  $b = a^{-1}$ , so dass für die Existenz des Inversen gesorgt ist. Die Gültigkeit des Assoziativgesetzes prüft man anhand der Verknüpfungstabelle rasch nach.  $Z_3$  ist keine kontinuierliche, sondern eine sog. **diskrete** Gruppe. Sie ist außerdem **abelsch**, wie man ebenfalls anhand der Verknüpfungstabelle überprüft. Eine **Darstellung** von  $Z_3$  ist die Multiplikation mit den Phasenfaktoren

$$D(e) = 1, \quad D(a) = e^{2\pi i/3}, \quad D(b) = e^{-2\pi i/3} \equiv e^{4\pi i/3}.$$

Man prüft leicht nach, dass diese Darstellung unter der gewöhnlichen Multiplikation die gleichen Eigenschaften wie in der Verknüpfungstabelle angegeben hat.

**Definition:** Die **Dimension** einer Darstellung ist die Dimension des Raumes, auf den die linearen Operatoren der Darstellung wirken.

**Beispiel:** In den obigen Darstellungen von  $U(1)$  oder  $Z_3$  ist dies eine Dimension, also sind diese Darstellungen eindimensional.

**Definition:** Die **reguläre** Darstellung  $\bar{D}(G)$  einer Gruppe  $G$  ergibt sich daraus, dass man jedem  $g_j \in G$  einen Zustandsvektor  $|g_j\rangle$  einer Orthonormalbasis eines Hilbert-Raums  $\mathcal{H}$  zuordnet,

$$\forall g_j \in G : \quad g_j \mapsto |g_j\rangle, \quad \langle g_i | g_j \rangle = \delta_{ij} \quad \forall |g_i\rangle, |g_j\rangle \in \mathcal{H}, \quad (2.40)$$

## 2 Symmetrien

und sodann die Wirkung eines beliebigen Elements  $g_i \in G$  auf den Zustandsvektor  $|g_j\rangle$  durch die lineare Abbildung

$$\bar{D}(g_i) |g_j\rangle = |g_i \circ g_j\rangle \quad \forall g_i, g_j \in G, \quad (2.41)$$

definiert.

**Beispiel:** Betrachten wir  $Z_3$ . Dann müssen wir zunächst den Gruppenelementen Hilbert-Raumzustände zuordnen,

$$\begin{aligned} g_1 \equiv e &\mapsto |g_1\rangle \equiv |e\rangle, \\ g_2 \equiv a &\mapsto |g_2\rangle \equiv |a\rangle, \\ g_3 \equiv b &\mapsto |g_3\rangle \equiv |b\rangle, \end{aligned}$$

mit  $\langle g_i | g_j \rangle = \delta_{ij}$ . Die reguläre Darstellung ergibt sich gemäß der Definition (2.41) und mit Hilfe der Verknüpfungstabelle 2.1:

$$\begin{aligned} \bar{D}(e) |e\rangle &= |e \circ e\rangle = |e\rangle, & \bar{D}(a) |e\rangle &= |a \circ e\rangle = |a\rangle, & \bar{D}(b) |e\rangle &= |b \circ e\rangle = |b\rangle, \\ \bar{D}(e) |a\rangle &= |e \circ a\rangle = |a\rangle, & \bar{D}(a) |a\rangle &= |a \circ a\rangle = |b\rangle, & \bar{D}(b) |a\rangle &= |b \circ a\rangle = |e\rangle, \\ \bar{D}(e) |b\rangle &= |e \circ b\rangle = |b\rangle, & \bar{D}(a) |b\rangle &= |a \circ b\rangle = |e\rangle, & \bar{D}(b) |b\rangle &= |b \circ b\rangle = |a\rangle. \end{aligned}$$

Die **Dimension der regulären Darstellung** einer Gruppe entspricht der **Ordnung** der Gruppe. Für die zyklische Gruppe ist die Ordnung = 3 und damit  $\dim \bar{D}(Z_3) = 3$ .

Die reguläre Darstellung (2.41) kann man auch in Form einer **Matrixdarstellung** schreiben. Dazu definiert man

$$[\bar{D}(g)]_{ij} \equiv \langle g_i | \bar{D}(g) | g_j \rangle \quad \forall g \in G, \quad |g_i\rangle, |g_j\rangle \in \mathcal{H}. \quad (2.42)$$

**Beispiel:** Für  $Z_3$  gilt

$$[\bar{D}(e)] = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad [\bar{D}(a)] = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad [\bar{D}(b)] = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

In der Matrixdarstellung entspricht die Gruppenverknüpfung der Matrixmultiplikation,

$$\begin{aligned} [\bar{D}(g_i \circ g_j)]_{k\ell} &= \langle g_k | \bar{D}(g_i \circ g_j) | g_\ell \rangle = \langle g_k | \bar{D}(g_i) \bar{D}(g_j) | g_\ell \rangle \\ &= \sum_m \langle g_k | \bar{D}(g_i) | g_m \rangle \langle g_m | \bar{D}(g_j) | g_\ell \rangle = \sum_m [\bar{D}(g_i)]_{km} [\bar{D}(g_j)]_{m\ell}. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Im allgemeinen ist die Matrixmultiplikation **nicht** kommutativ. Man prüft aber leicht nach, dass dies für  $Z_3$  (welches eine abelsche Gruppe ist) trotzdem gilt.

Im allgemeinen sind **Matrixdarstellungen** einer Gruppe selbst wieder Gruppen, die zu der jeweiligen Gruppe (global) **isomorph** sind. Deshalb benutzt man im physikalischen Sprachgebrauch auch kurzerhand den Begriff “Gruppe” synonym mit “Matrixdarstellung einer Gruppe” oder “Darstellung einer Gruppe”.

**Beispiel:** Betrachte die Gruppe der Raum-Translationen,  $G_r$ . Eine **Darstellung** von  $G_r$  hatten wir schon kennengelernt,

$$D(G_r) = \left\{ \hat{U}_r(\vec{a}), \vec{a} \in \mathbb{R}^3 \right\},$$

mit dem **linearen Operator**  $\hat{U}_r(\vec{a}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{\vec{p}}\right)$ . (Offenbar waren wir vormalig im Sprachgebrauch ‘‘Gruppe’’ und ‘‘Darstellung einer Gruppe’’ etwas ungenau; die ‘‘Gruppe’’ der Raum-Translationen hatten wir genau genommen als eine mögliche Darstellung dieser Gruppe in Form der linearen Operatoren  $\hat{U}_r(\vec{a})$  eingeführt.) Eine **Matrixdarstellung** von  $G_r$  gewinnt man, indem man für eine beliebige Orthonormalbasis  $\{|\psi_n\rangle, n = 0, 1, 2, \dots\}$  mit der Darstellung  $D(g(\vec{a}))$  des Gruppenelements  $g(\vec{a}) \in G_r$  die Matrizen

$$[D(g(\vec{a}))]_{ij} = \langle \psi_i | D(g(\vec{a})) | \psi_j \rangle \equiv \langle \psi_i | \hat{U}_r(\vec{a}) | \psi_j \rangle = \langle \psi_i | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{\vec{p}}\right) | \psi_j \rangle$$

bildet. Durch Einfügen vollständiger Einsen von Ortsraumzuständen läßt sich dies folgendermaßen schreiben:

$$\begin{aligned} [D(g(\vec{a}))]_{ij} &= \int d^3\vec{r}' d^3\vec{r} \langle \psi_i | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \hat{\vec{p}}\right) | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \psi_j \rangle \\ &= \int d^3\vec{r}' d^3\vec{r} \psi_i^*(\vec{r}') \delta^{(3)}(\vec{r}' - \vec{r}) \exp\left(-\vec{a} \cdot \vec{\nabla}_r\right) \psi_j(\vec{r}) \\ &= \int d^3\vec{r} \psi_i^*(\vec{r}) \exp\left(-\vec{a} \cdot \vec{\nabla}_r\right) \psi_j(\vec{r}), \end{aligned}$$

wobei wir den Impuls-Operator in Ortsdarstellung und die Orthonormalität der Ortseigenzustände benutzt haben.

### 2.2.3 Lie-Gruppen

**Lie-Gruppen** sind kontinuierliche Gruppen mit  $N$  Parametern  $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)^T \in \mathbb{R}^N$ , deren Elemente sich (in der Darstellung als lineare Operatoren) in der Form

$$\hat{U}(\vec{\alpha}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \alpha_j \hat{X}_j\right) \quad (2.44)$$

schreiben lassen. Offensichtlich ist

$$\hat{U}(\vec{0}) = \mathbb{1}, \quad (2.45)$$

der Ursprung des Parameterraums wird auf das Eins-Element (bzw. seine entsprechende Darstellung als linearer Operator) abgebildet.

**Beispiele:**

- (i) Die Elemente der Gruppe der Raum-Translationen,  $G_r$ , haben eine Darstellung der Form (2.44), mit  $N = 3$ ,  $\hat{X}_j = \hat{p}^j$  und  $\alpha_j = a^j$ ,  $j = x, y, z$ , vgl. Gl. (2.7).

## 2 Symmetrien

- (ii) Die Elemente der Drehgruppe,  $G_R$ , haben eine Darstellung der Form (2.44), mit  $N = 3$ ,  $\hat{X}_j = \hat{L}^j$  und  $\alpha_j = \phi^j$ ,  $j = x, y, z$ , vgl. Gl. (2.31).

Die sog. **Generatoren**  $\hat{X}_j$  der Lie-Gruppe berechnet man als Ableitung der Gruppenelemente nach den Parametern am Ort des Eins-Elements:

$$\hat{X}_j = i\hbar \left. \frac{\partial}{\partial \alpha_j} \hat{U}(\vec{\alpha}) \right|_{\vec{\alpha}=0}. \quad (2.46)$$

**Infinitesimale** Transformationen erhält man aus der Taylor-Entwicklung der Exponentialfunktion für infinitesimale Parameter,  $|\delta\alpha_i| \ll 1$ ,  $i = 1, \dots, N$ ,

$$\hat{U}(\delta\vec{\alpha}) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \delta\alpha_j \hat{X}_j + O(\delta\alpha^2). \quad (2.47)$$

Jede **endliche** Transformation läßt sich als Folge infinitesimaler Transformationen darstellen. Wir schreiben dazu mit  $n \in \mathbb{N}$   $\alpha_j = n\delta\alpha_j$ ,  $j = 1, \dots, N$ , und berechnen

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \left[ \hat{U}(\delta\vec{\alpha}) \right]^n &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left[ \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \delta\alpha_j \hat{X}_j \right]^n = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[ \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \frac{\alpha_j}{n} \hat{X}_j \right]^n \\ &= \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \alpha_j \hat{X}_j \right), \end{aligned}$$

wobei wir die Identität

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left( 1 + \frac{x}{n} \right)^n = e^x$$

mit  $x = -(i/\hbar) \sum_{j=1}^N \alpha_j \hat{X}_j$  benutzt haben.

### Folgerungen:

- (i) Die Generatoren sind **linear unabhängig**.

**Beweis:** Das Eins-Element ist eindeutig, so dass aus der Bedingung

$$\hat{U}(\vec{\alpha}) = \mathbb{1}$$

folgt, dass

$$\alpha_1 = \dots = \alpha_N \equiv 0.$$

Dies gilt auch für infinitesimale Parameter  $\delta\alpha_j$ , also aus der Bedingung

$$\hat{U}(\delta\vec{\alpha}) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \delta\alpha_j \hat{X}_j + O(\delta\alpha^2) = \mathbb{1} \quad (2.48)$$

folgt, dass

$$\delta\alpha_1 = \dots = \delta\alpha_N \equiv 0.$$



Die Bedingung (2.48) kann man aber durch Subtraktion der  $\mathbb{1}$  auf beiden Seiten und unter Vernachlässigung quadratisch kleiner Terme schreiben als

$$\sum_{j=1}^N \delta\alpha_j \hat{X}_j = 0. \quad (2.49)$$

Wenn aber aus dieser Bedingung folgt, dass alle  $\delta\alpha_j = 0$  sind, dann müssen nach Definition der linearen Unabhängigkeit die  $\hat{X}_j$  linear unabhängig sein, q.e.d. 29.5.2012

(ii) Für **unitäre** Lie-Gruppen sind die Generatoren  $\hat{X}_j$  **hermitesch**.

**Beweis:** Für unitäre Lie-Gruppen gilt

$$\hat{U}^\dagger(\vec{\alpha}) = \hat{U}^{-1}(\vec{\alpha}). \quad (2.50)$$

Für infinitesimale Transformationen führt dies auf

$$\begin{aligned} \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \delta\alpha_j^* \hat{X}_j^\dagger + O(\delta\alpha^2) &= \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N (-\delta\alpha_j) \hat{X}_j + O(\delta\alpha^2) \\ \iff \sum_{j=1}^N \delta\alpha_j \hat{X}_j^\dagger &= \sum_{j=1}^N \delta\alpha_j \hat{X}_j \\ \implies \hat{X}_j^\dagger &= \hat{X}_j, \quad j = 1, \dots, N, \end{aligned}$$

wobei wir im zweiten Schritt ausgenutzt haben, dass die Parameter reellwertig sind,  $\delta\alpha_j^* = \delta\alpha_j$ , und im letzten Schritt, dass sie beliebig gewählt werden können, q.e.d.

**Beispiel 1:** Die Elemente der Gruppe  $U(1)$  haben die Darstellung  $e^{i\phi}$ , mit dem (einzigen) Parameter  $\phi \in \mathbb{R}$  und dem (einzigen) Generator  $\hat{X} \equiv \mathbb{1} \equiv 1$ .

**Beispiel 2:** Die Gruppe  $SU(2)$  ist die Gruppe der **speziellen unitären  $(2 \times 2)$ -Matrizen**, also der unitären  $(2 \times 2)$ -Matrizen mit Determinante  $+1$ . Eine Darstellung der Elemente von  $SU(2)$  ist

$$\hat{U}(\vec{\alpha}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{\alpha} \cdot \hat{\vec{S}}\right), \quad (2.51)$$

wobei die Parameter  $\alpha_j \in \mathbb{R}$ ,  $j = 1, 2, 3$ , und  $\hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2} \hat{\vec{\sigma}}$  der **Spin-Operator** ist, der proportional zum Vektor der **Pauli-Matrizen**  $\hat{\vec{\sigma}} = (\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3)^T$  ist. Aus diesem Grund bezeichnet man die Gruppe  $SU(2)$  auch als **Spin-Gruppe**.

Es ist aus Gl. (2.51) offensichtlich, dass  $SU(2)$  eine Lie-Gruppe darstellt. Aber sind die Elemente (2.51) tatsächlich unitäre  $(2 \times 2)$ -Matrizen mit Determinante  $+1$ ?

Die Unitarität ist aufgrund der Tatsache, dass die Parameter  $\alpha_j$  reell sind und  $\hat{\vec{S}}$  ein hermitescher Operator ist (weil der Spin eine physikalische Observable ist, bzw. weil die Pauli-Matrizen hermitesch sind), unmittelbar ersichtlich,

$$\hat{U}^\dagger(\vec{\alpha}) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{\alpha} \cdot \hat{\vec{S}}^\dagger\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} (-\vec{\alpha}) \cdot \hat{\vec{S}}\right) = \hat{U}^{-1}(\vec{\alpha}).$$

## 2 Symmetrien

Um zu zeigen, dass  $\hat{U}(\vec{\alpha})$  eine  $(2 \times 2)$ -Matrix ist, berechnen wir zunächst

$$\begin{aligned} (\vec{\alpha} \cdot \hat{\sigma})^{2n} &= \left[ (\vec{\alpha} \cdot \hat{\sigma})^2 \right]^n = \left[ \vec{\alpha} \cdot \vec{\alpha} + i \hat{\sigma} \cdot (\vec{\alpha} \times \vec{\alpha}) \right]^n = \alpha^{2n} \mathbb{1}, \\ (\vec{\alpha} \cdot \hat{\sigma})^{2n+1} &= (\vec{\alpha} \cdot \hat{\sigma})^{2n} \vec{\alpha} \cdot \hat{\sigma} = \alpha^{2n} \vec{\alpha} \cdot \hat{\sigma} = \alpha^{2n+1} \frac{\vec{\alpha}}{\alpha} \cdot \hat{\sigma}, \end{aligned}$$

wobei wir Gl. (1.169) benutzt haben. Damit können wir die Reihenentwicklung des Elements (2.51) der Spin-Gruppe schreiben als

$$\begin{aligned} \hat{U}(\vec{\alpha}) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( -\frac{i}{2} \right)^n (\vec{\alpha} \cdot \hat{\sigma})^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} \left( -\frac{i}{2} \right)^{2n} (\vec{\alpha} \cdot \hat{\sigma})^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \left( -\frac{i}{2} \right)^{2n+1} (\vec{\alpha} \cdot \hat{\sigma})^{2n+1} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left( \frac{\alpha}{2} \right)^{2n} \mathbb{1} - i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left( \frac{\alpha}{2} \right)^{2n+1} \frac{\vec{\alpha}}{\alpha} \cdot \hat{\sigma} \\ &= \cos \frac{\alpha}{2} \mathbb{1} - i \sin \frac{\alpha}{2} \frac{\vec{\alpha}}{\alpha} \cdot \hat{\sigma}. \end{aligned} \tag{2.52}$$

Dies ist als Summe von  $(2 \times 2)$ -Matrizen ebenfalls eine  $(2 \times 2)$ -Matrix. Schließlich berechnen wir noch die Determinante von  $\hat{U}(\vec{\alpha})$ :

$$\ln \det \hat{U}(\vec{\alpha}) = \text{Tr} \ln \hat{U}(\vec{\alpha}) = \text{Tr} \left( -\frac{i}{2} \vec{\alpha} \cdot \hat{\sigma} \right) = -\frac{i}{2} \vec{\alpha} \cdot \text{Tr} \hat{\sigma} \equiv 0,$$

weil die Pauli-Matrizen spurfrei sind. Damit ist aber

$$\det \hat{U}(\vec{\alpha}) = +1, \quad \text{q.e.d.}$$

Wir leiten nun aus der Abgeschlossenheit der Gruppe gegenüber Multiplikation eine weitere wichtige Relation für die Generatoren einer Lie-Gruppe ab. Es gilt i.a.,

$$\exp \left( -\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \alpha_j \hat{X}_j \right) \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^N \beta_k \hat{X}_k \right) \neq \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^N (\alpha_i + \beta_i) \hat{X}_i \right].$$

Es gilt aber immer, dass die Verknüpfung (Multiplikation) zweier Gruppenelemente ein neues Element der Gruppe ergibt,

$$\exp \left( -\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \alpha_j \hat{X}_j \right) \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^N \beta_k \hat{X}_k \right) = \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^N \delta_i \hat{X}_i \right).$$

Wir berechnen nun  $\delta_i$ . Dazu bilden wir auf beiden Seiten den Logarithmus,

$$\sum_{i=1}^N \delta_i \hat{X}_i = i\hbar \ln \left[ \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \alpha_j \hat{X}_j \right) \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^N \beta_k \hat{X}_k \right) \right],$$

und entwickeln die Exponentialfunktionen bis zur zweiten Ordnung in den Parametern  $\alpha_j, \beta_k$ ,

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \delta_i \hat{X}_i &\simeq i\hbar \ln \left[ \left( \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \alpha_j \hat{X}_j - \frac{1}{2\hbar^2} \sum_{j,k=1}^N \alpha_j \alpha_k \hat{X}_j \hat{X}_k \right) \right. \\ &\quad \left. \times \left( \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \sum_{\ell=1}^N \beta_\ell \hat{X}_\ell - \frac{1}{2\hbar^2} \sum_{\ell,m=1}^N \beta_\ell \beta_m \hat{X}_\ell \hat{X}_m \right) \right] \\ &\simeq i\hbar \ln \left[ \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N (\alpha_j + \beta_j) \hat{X}_j - \frac{1}{2\hbar^2} \sum_{j,k=1}^N (\alpha_j \alpha_k + 2\alpha_j \beta_k + \beta_j \beta_k) \hat{X}_j \hat{X}_k \right]. \end{aligned}$$

Nun entwickeln wir auch noch den Logarithmus bis zur zweiten Ordnung in den Parametern  $\alpha_j, \beta_k$ , und zwar gemäß der Formel

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + O(x^3),$$

und erhalten

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \delta_i \hat{X}_i &\simeq i\hbar \left[ -\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N (\alpha_j + \beta_j) \hat{X}_j - \frac{1}{2\hbar^2} \sum_{j,k=1}^N (\alpha_j \alpha_k + 2\alpha_j \beta_k + \beta_j \beta_k) \hat{X}_j \hat{X}_k \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2\hbar^2} \sum_{j,k=1}^N (\alpha_j \alpha_k + \alpha_j \beta_k + \beta_j \alpha_k + \beta_j \beta_k) \hat{X}_j \hat{X}_k \right] \\ &= \sum_{j=1}^N (\alpha_j + \beta_j) \hat{X}_j - \frac{i}{2\hbar} \sum_{j,k=1}^N (\alpha_j \beta_k - \beta_j \alpha_k) \hat{X}_j \hat{X}_k. \end{aligned}$$

Bringen wir den ersten Term auf die linke Seite und vertauschen die Summationsindizes im zweiten Beitrag des zweiten Terms, so erhalten wir

$$2i\hbar \sum_{i=1}^N (\delta_i - \alpha_i - \beta_i) \hat{X}_i = \sum_{j,k=1}^N \alpha_j \beta_k [\hat{X}_j, \hat{X}_k]. \quad (2.53)$$

Es ist nun klar, dass, wenn **alle Generatoren vertauschen**,

$$[\hat{X}_j, \hat{X}_k] = 0 \quad \forall j, k = 1, \dots, N,$$

aufgrund der linearen Unabhängigkeit der Generatoren

$$\delta_i = \alpha_i + \beta_i, \quad i = 1, \dots, N,$$

sein muss. Dann gilt aber

$$\begin{aligned} \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \alpha_j \hat{X}_j \right) \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^N \beta_k \hat{X}_k \right) &= \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^N (\alpha_i + \beta_i) \hat{X}_i \right] \\ &\equiv \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^N \beta_k \hat{X}_k \right) \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \alpha_j \hat{X}_j \right), \end{aligned} \quad (2.54)$$

d.h. die Gruppenelemente **vertauschen**. Es handelt sich also um eine **abelsche Gruppe**.

I.a. vertauschen aber die Generatoren nicht. Wir bezeichnen

$$2i\hbar(\delta_i - \alpha_i - \beta_i) \equiv i\hbar \gamma_i \quad (2.55)$$

und berechnen die  $\gamma_i$ . Offenbar müssen sie sowohl proportional zu den  $\alpha_j$  wie auch zu den  $\beta_k$  sein, da sie simultan mit  $\alpha_j$  **oder**  $\beta_k$  verschwinden, vgl. Gl. (2.53). Daher bietet sich der folgende **Ansatz** an:

$$\gamma_i = \sum_{j,k=1}^N f_{jki} \alpha_j \beta_k, \quad (2.56)$$

mit Konstanten  $f_{jki}$ . Eingesetzt in Gl. (2.53) ergibt sich

$$i\hbar \sum_{i,j,k=1}^N f_{jki} \alpha_j \beta_k \hat{X}_i = \sum_{j,k=1}^N \alpha_j \beta_k [\hat{X}_j, \hat{X}_k], \quad (2.57)$$

oder, weil  $\alpha_j, \beta_k$  beliebige Werte annehmen können,

$$[\hat{X}_j, \hat{X}_k] = i\hbar \sum_{i=1}^N f_{jki} \hat{X}_i \equiv i\hbar f_{jki} \hat{X}_i, \quad (2.58)$$

wobei wir wie gewohnt die Einsteinsche Summenkonvention benutzt haben. Diese Vertauschungsrelationen definieren eine **Algebra** für die Generatoren der Lie-Gruppe, die sog. **Lie-Algebra**. Die Konstanten  $f_{jki}$  sind die sog. **Strukturkonstanten** der Gruppe.

**Beispiel 1:** Für die Gruppe  $G_R$  der Raumdrehungen, Gl. (2.36), sind die drei Generatoren die Komponenten des **Drehimpulsoperators**, welche die **Drehimpulsalgebra** (2.37) erfüllen. Also ist

$$f_{jki} \equiv \epsilon^{jki}$$

**Beispiel 2:** Für die Gruppe  $SU(2)$  mit den Elementen (2.51) sind die Generatoren die Komponenten des **Spin-Operators**. Aufgrund der Vertauschungsrelation (1.113) für die Pauli-Matrizen erfüllen diese die Lie-Algebra

$$[\hat{S}^j, \hat{S}^k] = \frac{\hbar^2}{4} [\hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k] = \frac{\hbar^2}{4} 2i \epsilon_{jki} \hat{\sigma}_i \equiv i\hbar \epsilon^{jki} \hat{S}^i, \quad (2.59)$$

also dieselbe Lie-Algebra wie die Gruppe  $G_R$  der Raumdrehungen.

**Eigenschaften der Strukturkonstanten:**

(i) Wegen  $[\hat{X}_j, \hat{X}_k] = -[\hat{X}_k, \hat{X}_j]$  gilt

$$f_{jki} = -f_{kji}. \quad (2.60)$$

Für  $SU(2)$  und  $G_R$  ist dies aufgrund der Antisymmetrie des Levi-Civita-Tensors automatisch erfüllt.

- (ii) Für **unitäre** Gruppen sind die Strukturkonstanten **reell**. Mit der Hermitizität der Generatoren berechnen wir nämlich,

$$\begin{aligned} [\hat{X}_j, \hat{X}_k]^\dagger &= [\hat{X}_k^\dagger, \hat{X}_j^\dagger] = [\hat{X}_k, \hat{X}_j] = -[\hat{X}_j, \hat{X}_k] = -i\hbar f_{jki} \hat{X}_i \\ \iff -i\hbar f_{jki}^* \hat{X}_i^\dagger &= -i\hbar f_{jki}^* \hat{X}_i = -i\hbar f_{jki} \hat{X}_i . \end{aligned}$$

Aufgrund der linearen Unabhängigkeit der  $\hat{X}_i$  folgt daraus sofort

$$f_{jki}^* = f_{jki} , \quad \text{q.e.d.} . \quad (2.61)$$

- (iii) Es gilt die **Jacobi-Identität**

$$f_{ijl} f_{lkm} + f_{jkl} f_{lim} + f_{kil} f_{ljm} = 0 . \quad (2.62)$$

**Beweis:** Es gilt die folgende Identität für die Generatoren:

$$\begin{aligned} &[[\hat{X}_i, \hat{X}_j], \hat{X}_k] + [[\hat{X}_j, \hat{X}_k], \hat{X}_i] + [[\hat{X}_k, \hat{X}_i], \hat{X}_j] = \\ &= \hat{X}_i \hat{X}_j \hat{X}_k - \hat{X}_j \hat{X}_i \hat{X}_k - \hat{X}_k \hat{X}_i \hat{X}_j + \hat{X}_k \hat{X}_j \hat{X}_i \\ &+ \hat{X}_j \hat{X}_k \hat{X}_i - \hat{X}_k \hat{X}_j \hat{X}_i - \hat{X}_i \hat{X}_j \hat{X}_k + \hat{X}_i \hat{X}_k \hat{X}_j \\ &+ \hat{X}_k \hat{X}_i \hat{X}_j - \hat{X}_i \hat{X}_k \hat{X}_j - \hat{X}_j \hat{X}_k \hat{X}_i + \hat{X}_j \hat{X}_i \hat{X}_k \equiv 0 . \end{aligned}$$

Mit Hilfe der Lie-Algebra (2.58) ist dies identisch mit

$$\begin{aligned} 0 &= i\hbar \left\{ f_{ijl} [\hat{X}_l, \hat{X}_k] + f_{jkl} [\hat{X}_l, \hat{X}_i] + f_{kil} [\hat{X}_l, \hat{X}_j] \right\} \\ &= -\hbar^2 (f_{ijl} f_{lkm} + f_{jkl} f_{lim} + f_{kil} f_{ljm}) \hat{X}_m . \end{aligned}$$

Wegen der linearen Unabhängigkeit der Generatoren muss die Klammer verschwinden, d.h. es gilt die Jacobi-Identität (2.62), q.e.d.

**Beispiel:** Für die Gruppen  $SU(2)$  bzw.  $G_R$  sind die Strukturkonstanten durch die Komponenten des Levi-Civita-Tensors gegeben, die, wie wir schon aus der Vorlesung ‘‘Klassische Mechanik’’ wissen, die Jacobi-Identität (2.62) erfüllen, vgl. dort Gl. (1.137).

Lie-Gruppen haben die besondere Eigenschaft, dass die Kenntnis der Generatoren aufgrund von Gl. (2.44) die Kenntnis aller Gruppenelemente nach sich zieht. Eine **Darstellung der Generatoren** definiert dann gleichzeitig eine **Darstellung der Gruppe**. Eine besonders wichtige Darstellung ist die sog. **adjungierte Darstellung**, in der die Generatoren durch die Strukturkonstanten festgelegt werden,

$$(\hat{X}_i)_{jk} = -i\hbar f_{ijk} . \quad (2.63)$$

Es handelt sich dabei um eine **Matrixdarstellung** für den Generator  $\hat{X}_i$ ; das  $(jk)$ -Element des  $i$ -ten Generators ist durch die Strukturkonstante  $f_{ijk}$  gegeben. Es ist aufgrund

von Gl. (2.44) klar, dass für matrixwertige Generatoren auch die Gruppenelemente matrixwertig sind. Die **adjungierte Darstellung** definiert also eine **Matrixdarstellung der Gruppe**.

Wir zeigen nun, dass die adjungierte Darstellung (2.63) in der Tat eine mögliche Darstellung der Generatoren ist, weil sie in dieser Darstellung die Lie-Algebra der Gruppe erfüllen. Wir beginnen mit der Jacobi-Identität (2.62), die wir mit den Glgen. (2.60) und (2.63) und in folgender Form schreiben:

$$\begin{aligned} \hbar^2 f_{ij\ell} f_{\ell km} &= -\hbar^2 (f_{kil} f_{\ell jm} + f_{jkl} f_{\ell im}) \\ &= -\hbar^2 [(-f_{ik\ell})(-f_{j\ell m}) + f_{jkl}(-f_{i\ell m})] \\ \Leftrightarrow i\hbar f_{ij\ell} (\hat{X}_\ell)_{km} &= (\hat{X}_i)_{k\ell} (\hat{X}_j)_{\ell m} - (\hat{X}_j)_{k\ell} (\hat{X}_i)_{\ell m} \\ &\equiv \left( [\hat{X}_i, \hat{X}_j] \right)_{km} . \end{aligned}$$

Dies ist in der Tat die korrekte Lie-Algebra (2.44) für das  $(km)$ -Element der Generatoren in der Matrixdarstellung.

**Beispiel:** Die adjungierte Darstellung der Generatoren  $\hat{L}^x, \hat{L}^y, \hat{L}^z$  der Drehgruppe  $G_R$  lautet

$$(\hat{L}^i)_{jk} = -i\hbar \epsilon_{ijk} . \quad (2.64)$$

Die Generatoren sind also die  $(3 \times 3)$ -Matrizen

$$\hat{L}^x = -i\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{L}^y = -i\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{L}^z = -i\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} . \quad (2.65)$$

Betrachten wir beispielsweise eine Drehung um die  $z$ -Achse,

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \phi \hat{L}^z\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \phi\right)^n (\hat{L}^z)^n . \quad (2.66)$$

Nun ist in der adjungierten Darstellung

$$(\hat{L}^z)^{2n} = (-i\hbar)^{2n} \begin{pmatrix} (-1)^n & 0 & 0 \\ 0 & (-1)^n & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\hat{L}^z)^{2n+1} = (-i\hbar)^{2n+1} (-1)^n \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} .$$

Damit wird Gl. (2.66) zu

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \phi \hat{L}^z\right) &= \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \phi^{2n} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \phi^{2n+1} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + (\cos \phi - 1) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \sin \phi \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \equiv \hat{D}_{\vec{e}_z}(-\phi) . \end{aligned}$$

Dies ist gerade die **Drehmatrix** für Drehungen von **dreidimensionalen Vektoren** um den Winkel  $-\phi$  um die  $z$ -Achse. Entsprechend berechnet man die Drehmatrizen für Drehungen um die  $x$ - und  $y$ -Achse aus den Generatoren  $\hat{L}^x$  und  $\hat{L}^y$  in der adjungierten Darstellung.

Drehmatrizen in drei Dimensionen bilden die Gruppe der **speziellen, orthogonalen  $(3 \times 3)$ -Matrizen mit Determinante +1, oder kurz  $SO(3)$** . Was wir gerade gezeigt haben ist, dass  $SO(3)$  **isomorph** zur **adjungierten Darstellung** der Drehgruppe  $G_R$  ist. Weil man den Begriff "Darstellung einer Gruppe" und "Gruppe" synonym benutzt, sagt man auch, dass die  $SO(3)$  isomorph zur Drehgruppe  $G_R$  ist, bzw. dass  $SO(3)$  "die Drehgruppe ist". In Übungsaufgabe 5.2 haben wir gezeigt, dass  $SO(3)$  (lokal) isomorph zu  $SU(2)$  ist. Also ist auch  $SU(2)$  (lokal) isomorph zu  $G_R$ .

Weil die Strukturkonstanten der Gruppe  $SU(2)$  die gleichen sind wie die für  $G_R$ , stellt Gl. (2.65) auch gleichzeitig die **adjungierte Darstellung** der Generatoren  $\hat{S}^i$  der  $SU(2)$  dar. Man beachte den Unterschied zur sog. **fundamentale Darstellung**  $\hat{S}^i = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}^i$  dieser Generatoren. Für  $SU(2)$  besteht die fundamentale Darstellung aus  $(2 \times 2)$ -Matrizen, während die adjungierte aus  $(3 \times 3)$ -Matrizen gebildet wird. 31.5.2012

Die Form der Strukturkonstanten hängt i.a. von der Wahl der Generatoren ab. Es muss aber immer die Lie-Algebra (2.44) erfüllt sein, deshalb sind die Strukturkonstanten immer **antisymmetrisch** in den **ersten beiden** Indizes, Gl. (2.60). Man kann jedoch eine Wahl der Generatoren treffen, in denen die Strukturkonstanten **vollständig antisymmetrisch** sind,

$$f_{jki} = f_{kij} = f_{ijk} = -f_{kji} = -f_{jik} = -f_{ikj} . \quad (2.67)$$

**Bemerkung:** Für die Gruppe der Raumdrehungen,  $G_R$ , und damit für  $SO(3)$  und  $SU(2)$  ist dies automatisch erfüllt, da  $f_{jki} = \epsilon_{jki}$ .

**Beweis:** Wir benötigen eine Basis, in der die Generatoren die Relation

$$\text{Tr} \left( \hat{X}_i \hat{X}_j \right) = \lambda_i \delta_{ij} \quad (2.68)$$

erfüllen (wobei auf der rechten Seite nicht über  $i$  summiert wird), also in diesem Sinn **orthogonal** sind. Durch geeignetes Normieren der Generatoren kann man darüberhinaus erreichen, dass auch

$$\text{Tr} \left( \hat{X}_i \hat{X}_j \right) = \frac{\hbar^2}{2} \delta_{ij} \quad (2.69)$$

gilt. Dann berechnen wir mit der Lie-Algebra (2.44) den Ausdruck

$$-\frac{2i}{\hbar^3} \text{Tr} \left\{ \left[ \hat{X}_j, \hat{X}_k \right] \hat{X}_i \right\} = \frac{2}{\hbar^2} f_{jkl} \text{Tr} \left( \hat{X}_l \hat{X}_i \right) = f_{jkl} \delta_{li} = f_{jki} . \quad (2.70)$$

Andererseits ist die linke Seite dieser Gleichung identisch mit

$$\begin{aligned} -\frac{2i}{\hbar^3} \text{Tr} \left( \hat{X}_j \hat{X}_k \hat{X}_i - \hat{X}_k \hat{X}_j \hat{X}_i \right) &= -\frac{2i}{\hbar^3} \text{Tr} \left( \hat{X}_k \hat{X}_i \hat{X}_j - \hat{X}_i \hat{X}_k \hat{X}_j \right) \\ &= -\frac{2i}{\hbar^3} \text{Tr} \left\{ \left[ \hat{X}_k, \hat{X}_i \right] \hat{X}_j \right\} \equiv f_{kij} , \end{aligned} \quad (2.71)$$

wobei wir die zyklische Vertauschbarkeit der Operatoren unter der Spur und das Ergebnis der Rechnung, die auf Gl. (2.70) geführt hat, ausgenutzt haben. Der Vergleich mit Gl. (2.70) liefert bereits das erste Gleichheitszeichen in Gl. (2.67). Wenn wir von Gl. (2.71) ausgehend eine weitere zyklische Vertauschung unter der Spur vornehmen, erhalten wir auch das zweite Gleichheitszeichen in Gl. (2.67). Die restlichen Gleichheitszeichen erhält man nun aus den bestehenden Identitäten aufgrund der Eigenschaft (2.60).

Es bleibt noch zu klären, ob man eine Basis finden kann, in der Gl. (2.68) erfüllt ist. Wir betrachten dazu eine lineare Transformation  $L$  der Generatoren (einen “Wechsel der Basis”), so dass

$$\hat{X}_i \longrightarrow \hat{X}'_i = L_{ik} \hat{X}_k . \quad (2.72)$$

Die Vertauschungsrelation (2.44) lautet in der neuen Basis

$$\begin{aligned} [\hat{X}'_i, \hat{X}'_j] &= L_{ik} L_{jl} [\hat{X}_k, \hat{X}_l] = L_{ik} L_{jl} i\hbar f_{klm} \hat{X}_m \\ &= i\hbar L_{ik} L_{jl} f_{klm} L_{mn}^{-1} L_{nr} \hat{X}_r = i\hbar L_{ik} L_{jl} f_{klm} L_{mn}^{-1} \hat{X}'_n \\ &\equiv i\hbar f'_{ijn} \hat{X}'_n , \end{aligned}$$

wobei wir von der ersten zur zweiten Zeile die Invertierbarkeit der linearen Transformation,

$$L_{mn}^{-1} L_{nr} \equiv \delta_{mr}$$

und sodann, zum nächsten Gleichheitszeichen, die Definition (2.72) des Basiswechsels benutzt haben. Die letzte Identität schießlich entspringt der Forderung, dass auch die neuen Generatoren  $\hat{X}'_i$  die Lie-Algebra (2.44) erfüllen müssen, mit den **neuen Strukturkonstanten**  $f'_{ijn}$ . Wir lesen das folgende Transformationsverhalten für die Strukturkonstanten ab:

$$f_{ijn} \longrightarrow f'_{ijn} \equiv L_{ik} L_{jl} f_{klm} L_{mn}^{-1} . \quad (2.73)$$

Diese neuen Strukturkonstanten definieren eine neue **adjungierte Darstellung** der Generatoren:

$$\begin{aligned} (\hat{X}'_i)_{jk} &= -i\hbar f'_{ijk} = -i\hbar L_{im} L_{jn} f_{mnr} L_{rk}^{-1} \\ &= L_{im} L_{jn} (\hat{X}_m)_{nr} L_{rk}^{-1} = L_{im} \left( L \hat{X}_m L^{-1} \right)_{jk} , \end{aligned}$$

wobei wir die adjungierte Darstellung der alten Generatoren  $\hat{X}_m$  benutzt haben. In der adjungierten Darstellung berechnen wir nun

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left( \hat{X}'_i \hat{X}'_j \right) &= L_{im} L_{jn} \text{Tr} \left( L \hat{X}_m L^{-1} L \hat{X}_n L^{-1} \right) = L_{im} L_{jn} \text{Tr} \left( \hat{X}_m \hat{X}_n \right) \\ &= L_{im} \text{Tr} \left( \hat{X}_m \hat{X}_n \right) L_{nj}^T . \end{aligned} \quad (2.74)$$

Für unitäre Gruppen sind die Strukturkonstanten reell, also sind die Matrizen

$$M'_{ij} \equiv \text{Tr} \left( \hat{X}'_i \hat{X}'_j \right) , \quad M_{mn} \equiv \text{Tr} \left( \hat{X}_m \hat{X}_n \right) ,$$



ebenfalls reell. Außerdem sind diese Matrizen wegen der zyklischen Vertauschbarkeit unter der Spur symmetrisch. Also lassen sie sich mit Hilfe **orthogonaler Matrizen** diagonalisieren. Wenn wir für die lineare Transformation  $L$  diejenige orthogonale Matrix  $O \equiv L$  wählen, welche  $M$  diagonalisiert, erhalten wir aus Gl. (2.74) die Relation

$$\lambda_i \delta_{ij} = M'_{ij} = O_{im} M_{mn} O_{nj}^T .$$

Es gibt also in der Tat eine Basis (die man durch eine geeignete lineare Transformation  $L \equiv O$  erhält), in der

$$\text{Tr} \left( \hat{X}'_i \hat{X}'_j \right) \equiv \lambda_i \delta_{ij} , \quad \text{q.e.d. .}$$

**Definition:** Der **Rang** einer Lie-Gruppe ist die Zahl der **miteinander vertauschenden Generatoren** der Lie-Algebra.

**Beispiel 1:** Die Gruppe der Raum-Translationen  $G_r$ : Eine Darstellung der Gruppenelemente ist durch Gl. (2.7) gegeben. Die Generatoren sind die drei Komponenten des Impuls-Operators,  $\hat{p}^i$ . Alle drei Generatoren vertauschen miteinander,  $[\hat{p}^i, \hat{p}^j] = 0$ ,  $i, j = 1, 2, 3$ . Also ist  $\text{Rg } G_r = 3$ .

**Beispiel 2:** Die Gruppe der Raumdrehungen  $G_R$ : Eine Darstellung der Gruppenelemente ist durch Gl. (2.31) gegeben. Die Generatoren erfüllen die Drehimpuls-Algebra (2.37). Also vertauscht maximal jeder Generator  $\hat{L}^i$  mit sich selbst,  $\text{Rg } G_R = 1$ .

**Definition:** Die sog. **Cartan-Subalgebra** ist die Algebra, die sich aus der **maximalen** Anzahl miteinander vertauschenden Generatoren ergibt. Der Rang einer Lie-Gruppe ist folglich die Anzahl der Generatoren in der Cartan-Subalgebra.

### 2.2.4 Einfache und halbeinfache Lie-Gruppen

**Definition:** Eine **invariante Unteralgebra**  $\mathcal{I}$ , ein sog. **Ideal**, ist ein Satz von Generatoren,

$$\mathcal{I} = \left\{ \hat{X}_i, i = 1, \dots, M \right\} , \quad M < N ,$$

aus der Menge aller Generatoren,

$$\left\{ \hat{Y}_j, j = 1, \dots, N \right\} ,$$

mit der Eigenschaft

$$[\hat{Y}_j, \hat{X}_i] \in \mathcal{I} \quad \forall i = 1, \dots, M, \quad j = 1, \dots, N, \quad (2.75)$$

d.h. der Kommutator zwischen beliebigen Generatoren mit denen aus dem Ideal ist wieder ein Generator aus dem Ideal.

**Definition:** Eine **invariante Untergruppe**  $U \subset G$  ist die Menge aller Gruppenelemente  $u \in G$ , für die gilt

$$g^{-1} u g \in U \quad \forall g \in G .$$

**Satz:** Ein Ideal definiert eine invariante Untergruppe  $\mathcal{N}$ , einen sog. **Lieschen Normalteiler**,

$$\mathcal{N} = \left\{ h = \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \alpha_i \hat{X}_i \right) \right\} \subset G .$$

## 2 Symmetrien

Mit anderen Worten, für

$$\begin{aligned} h &= e^{-iX} \in \mathcal{N}, & X &\equiv \frac{1}{\hbar} \alpha_i \hat{X}_i, \\ g &= e^{-iY} \in G, & Y &\equiv \frac{1}{\hbar} \beta_j \hat{Y}_j, \end{aligned}$$

ist

$$g^{-1} h g \in \mathcal{N}.$$

**Beweis:** Es ist

$$\begin{aligned} g^{-1} h g &= e^{iY} e^{-iX} e^{-iY} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} e^{iY} X^n e^{-iY} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} (e^{iY} X e^{-iY})^n \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} X'^n = e^{-iX'} \equiv h', \end{aligned}$$

wobei wir  $X' \equiv e^{iY} X e^{-iY}$  definiert haben. Es ist zu zeigen, dass  $X' \in \mathcal{I}$ , dann ist  $h' \in \mathcal{N}$ . Dazu betrachten wir folgenden Operator,

$$X'(\epsilon) \equiv e^{i\epsilon Y} X e^{-i\epsilon Y}.$$

Offenbar ist  $X'(0) \equiv X$  und  $X'(1) \equiv X'$ . Eine Taylor-Entwicklung von  $X'(\epsilon)$  um  $\epsilon = 0$  ergibt

$$\begin{aligned} X'(\epsilon) &= X + \epsilon \left. \frac{\partial}{\partial \epsilon} X'(\epsilon) \right|_{\epsilon=0} + \frac{\epsilon^2}{2} \left. \frac{\partial^2}{\partial \epsilon^2} X'(\epsilon) \right|_{\epsilon=0} + \dots \\ &= X + \epsilon [iY e^{i\epsilon Y} X e^{-i\epsilon Y} + e^{i\epsilon Y} X (-iY) e^{-i\epsilon Y}]_{\epsilon=0} \\ &\quad + \frac{\epsilon^2}{2} (-Y^2 e^{i\epsilon Y} X e^{-i\epsilon Y} + 2Y e^{i\epsilon Y} X Y e^{-i\epsilon Y} - e^{i\epsilon Y} X Y^2 e^{-i\epsilon Y})_{\epsilon=0} + \dots \\ &= X + i\epsilon [Y, X] - \frac{\epsilon^2}{2} (Y^2 X - 2Y X Y + X Y^2) + \dots \\ &= X + i\epsilon [Y, X] - \frac{\epsilon^2}{2} [Y, [Y, X]] + \dots \end{aligned}$$

Daraus folgt, dass

$$X' = X'(1) = X + i[Y, X] - \frac{1}{2} [Y, [Y, X]] + \dots$$

Weil aber

$$\begin{aligned} X &= \frac{1}{\hbar} \alpha_i \hat{X}_i \in \mathcal{I}, \\ [Y, X] &= \frac{1}{\hbar^2} \alpha_i \beta_j [\hat{Y}_j, \hat{X}_i] \in \mathcal{I}, \\ [Y, [Y, X]] &= \frac{1}{\hbar} \beta_j [\hat{Y}_j, [Y, X]] \in \mathcal{I}, \quad \text{etc.}, \end{aligned}$$

ist  $X' \in \mathcal{I}$ , q.e.d.

**Definition:** Ein sog. **Liescher abelscher Normalteiler** ist eine invariante Lie-Untergruppe, bei der **alle** Elemente miteinander vertauschen,

$$\forall h, h' \in \mathcal{N} : [h, h'] = 0 .$$

Es ist klar, dass das zu  $\mathcal{N}$  gehörende Ideal  $\mathcal{I}$  dann ein sog. **abelsches Ideal** sein muss,

$$[\hat{X}_i, \hat{X}_j] = 0 , \quad \forall i, j = 1, \dots, M .$$

**Definition:** Eine Lie-Gruppe heißt **einfach**, wenn sie **keinen Lieschen Normalteiler** besitzt. Ihre zugehörige Lie-Algebra heißt **einfach**, wenn sie kein **Ideal** (außer der Lie-Algebra selbst,  $M = N$ , sowie der Null) besitzt.

**Definition:** Eine Lie-Gruppe heißt **halbeinfach**, wenn sie **keinen Lieschen abelschen Normalteiler** besitzt. Ihre zugehörige Lie-Algebra heißt **halbeinfach**, wenn sie kein **abelsches Ideal** besitzt.

**Beispiel 1:** Wir betrachten die Gruppe der Raumdrehungen  $G_R$  (oder  $SO(3)$  oder  $SU(2)$ ). Die Generatoren erfüllen die Vertauschungsrelationen (2.37),

$$\begin{aligned} [\hat{L}^x, \hat{L}^y] &= i\hbar \hat{L}^z , \\ [\hat{L}^y, \hat{L}^z] &= i\hbar \hat{L}^x , \\ [\hat{L}^z, \hat{L}^x] &= i\hbar \hat{L}^y , \end{aligned}$$

d.h. es gibt **kein** Ideal.  $G_R$  ist somit nicht nur eine halbeinfache, sondern sogar eine **einfache** Lie-Gruppe.

**Beispiel 2:** Wir betrachten die **Produktgruppe**  $SU(2) \times SO(3)$ . Die Generatoren dieser Gruppe sind die Komponenten  $\hat{S}^i$  des Spin-Operators (für  $SU(2)$ ) und die Komponenten  $\hat{L}^j$  des Drehimpuls-Operators (für  $SO(3)$ ). Es gelten die Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned} [\hat{S}^i, \hat{S}^j] &= i\hbar \epsilon^{ijk} \hat{S}^k , \\ [\hat{L}^i, \hat{L}^j] &= i\hbar \epsilon^{ijk} \hat{L}^k , \\ [\hat{S}^i, \hat{L}^j] &= 0 . \end{aligned}$$

Es gibt also zwei nicht-abelsche Ideale, die Menge der  $\hat{S}^i$  und die der  $\hat{L}^j$ . Damit ist die Produkt-Gruppe  $SU(2) \times SO(3)$  **halbeinfach**.

### 2.2.5 Casimir-Operatoren, Multipletts, Schurs Lemma

**Definition:** Ein **Casimir-Operator**  $\hat{C}$  ist ein Operator, der mit **allen** Gruppenelementen vertauscht,

$$[\hat{C}, g] = 0 \quad \forall g \in G . \tag{2.76}$$

**Beispiel:** Betrachte die Gruppe der Raumdrehungen  $G_R$ . Das **Quadrat** des Drehimpulsoperators,  $\hat{L}^2 = \sum_{j=1}^3 \hat{L}_j^2$  vertauscht mit allen Generatoren  $\hat{L}^i$ , also den Komponenten des Drehimpulsoperators,

$$[\hat{L}^2, \hat{L}^i] = 0 , \quad i = 1, 2, 3 , \tag{2.77}$$

und daher auch mit allen Gruppenelementen  $\hat{U}_R(\vec{\phi}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{\phi} \cdot \hat{\vec{L}}\right)$  (in der Darstellung als lineare Operatoren),

$$[\hat{\vec{L}}^2, \hat{U}_R(\vec{\phi})] = 0. \quad (2.78)$$

Damit ist  $\hat{\vec{L}}^2$  ein Casimir-Operator der Gruppe  $G_R$ .

Casimir-Operatoren sind in der Regel keine Generatoren, aber Funktionen derselben,

$$\hat{C} = \hat{C}(\hat{X}_1, \hat{X}_2, \dots, \hat{X}_N). \quad (2.79)$$

Sie sind i.a. **nicht eindeutig** bestimmt. Für **unitäre** Gruppen kann man sie aber immer als **hermitesche** Operatoren konstruieren.

**Beweis:** Für einen Casimir-Operator  $\hat{C}$  ist auch  $\hat{C}^\dagger$  ein Casimir-Operator, denn

$$[\hat{X}_i, \hat{C}^\dagger] = [\hat{X}_i^\dagger, \hat{C}^\dagger] = [\hat{C}, \hat{X}_i]^\dagger = 0,$$

wobei wir die Hermitizität der Generatoren für unitäre Gruppen ausgenutzt haben. Wir definieren dann den neuen Casimir-Operator

$$\hat{\hat{C}} \equiv \hat{C} + \hat{C}^\dagger, \quad (2.80)$$

der per Definition hermitesch ist,  $\hat{\hat{C}} \equiv \hat{\hat{C}}^\dagger$ , q.e.d.

12.6.2012

Von großer Bedeutung ist der folgende Satz (den wir ohne Beweis angeben), weil er bei Kenntnis des Rangs einer halbeinfachen Lie-Gruppe die maximal mögliche Anzahl von Casimir-Operatoren zu bestimmen erlaubt:

**Theorem von Racah:** Jede halbeinfache Lie-Gruppe  $G$  vom Rang  $r$  hat  $r$  Casimir-Operatoren  $\hat{C}_i(\hat{X}_1, \dots, \hat{X}_N)$ ,  $i = 1, \dots, r$ .

**Beispiel:**  $G_R$  (bzw.  $SU(2)$  oder  $SO(3)$ ) ist vom Rang 1, also existiert **genau ein** Casimir-Operator. Diesen haben wir schon kennengelernt, es ist

$$\hat{C}_1 = \hat{C}_1(\hat{L}^x, \hat{L}^y, \hat{L}^z) \equiv \sum_{j=1}^3 \hat{L}_j^2 = \hat{\vec{L}}^2.$$

Die physikalische Bedeutung der Casimir-Operatoren begründet sich in der Tatsache, dass ihre **Eigenvektoren** die **Multipletts** der Gruppe aufspannen, also z.B. für  $G_R$

$$\hat{\vec{L}}^2 |\ell\rangle = \hbar^2 \ell(\ell + 1) |\ell\rangle. \quad (2.81)$$

In diesem Fall sind die Multipletts die  $(2\ell + 1)$ -fach entarteteten Zustände zu gegebener Drehimpulsquantenzahl  $\ell$ .

Man bezeichnet das Multipllett zu

$$\begin{aligned} \ell = 0 & \text{ als Singlett,} \\ \ell = \frac{1}{2} & \text{ als Dublett,} \\ \ell = 1 & \text{ als Triplet,} \\ \ell = \frac{3}{2} & \text{ als Quadruplett, etc.} \end{aligned}$$

Für die Drehgruppe  $G_R$  ist die Bedeutung der Multipletts klar. Aber was ist ein Multipllett im allgemeinen, also für beliebige Gruppen? Dazu benötigen wir die folgende

**Definition:** Ein bezüglich einer Symmetriegruppe  $G$  **invarianter Unterraum**  $U$  eines Hilbert-Raumes  $\mathcal{H}$  ist die Menge aller Zustände, die unter der Wirkung von linearen Operatoren  $D(g)$ ,  $g \in G$ , **invariant** bleibt, also

$$\forall |\psi\rangle \in U, \forall g \in G : D(g)|\psi\rangle = |D(g)\psi\rangle \equiv |\psi'\rangle \in U.$$

Mit anderen Worten, die linearen Operatoren  $D(g)$  der Symmetriegruppe transformieren die Zustände eines invarianten Unterraums nur unter sich selbst, führen aber nicht aus dem invarianten Unterraum hinaus. Man spricht in diesem Fall von einem **reduziblen Unterraum** und von einer **reduziblen Darstellung**  $D(g)$  von Gruppenelementen  $g \in G$ .

**Beispiel:** Man betrachte Eigenzustände zum Drehimpuls  $\ell$  und seiner  $z$ -Komponente  $m$ ,  $|\ell m\rangle$ . Ein invarianter Unterraum  $U$  bzgl. der Drehgruppe  $G_R$  wird z.B. durch

$$U = \{|00\rangle, |11\rangle, |10\rangle, |1-1\rangle\} \quad (2.82)$$

aufgespannt, denn die Anwendung der Operatoren (2.31) auf diese Zustände führt nicht aus diesem Raum heraus. Es genügt, dies für infinitesimale Transformationen zu zeigen,

$$\begin{aligned} \hat{U}_R(\delta\vec{\phi}) &= \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot \hat{L} = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \left( \delta\phi^x \hat{L}^x + \delta\phi^y \hat{L}^y + \delta\phi^z \hat{L}^z \right) \\ &= \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \left( \delta\phi^z \hat{L}^z + \frac{\delta\phi^x - i\delta\phi^y}{2} \hat{L}_+ + \frac{\delta\phi^x + i\delta\phi^y}{2} \hat{L}_- \right), \end{aligned}$$

wobei wir die **Stufenoperatoren**

$$\hat{L}_\pm \equiv \hat{L}^x \pm i \hat{L}^y$$

benutzt haben.  $\hat{L}^z$  mißt lediglich den Wert von  $m$ , während  $\hat{L}_\pm$  den Wert von  $m$  jeweils um eine Stufe erhöhen bzw. erniedrigen. Weil aber

$$\hat{L}_\pm |\ell \pm \ell\rangle = 0,$$

führt die Wirkung der Stufenoperatoren auch nicht aus dem invarianten Unterraum  $U$  heraus.

**Definition:** Ein invarianter Unterraum  $M \subset \mathcal{H}$  heißt **irreduzibel**, falls er außer sich selbst keine weiteren invarianten Unterräume enthält. In diesem Fall sind die linearen Operatoren  $D(g)$ , die auf Zustände von  $M$  wirken, in einer **irreduziblen Darstellung** der Gruppenelemente  $g \in G$ .

**Definition:** Ein **Multiplett** ist ein irreduzibler invarianter Unterraum.

**Beispiel:** Der invariante Unterraum (2.82) aus dem vorangegangenen Beispiel ist **reduzibel**, da er **zwei** irreduzible invariante Unterräume enthält, das **Singlett**

$$M_0 = \{|00\rangle\} ,$$

und das **Triplet**

$$M_1 = \{|11\rangle, |10\rangle, |1-1\rangle\} .$$

Man kann sich leicht klarmachen, dass die Wirkung von linearen Operatoren  $\hat{U}_R(\vec{\phi})$  nicht aus den Multipletts  $M_0, M_1$  herausführen.

**Definition:** Eine Darstellung  $D(g)$  heißt **vollständig reduzibel**, falls man sie in Blockdiagonalform schreiben kann,

$$D(g) = \begin{pmatrix} D_0(g) & 0 & \cdots \\ 0 & D_1(g) & \\ \vdots & & \ddots \end{pmatrix} , \quad (2.83)$$

wobei alle  $D_i(g)$  **irreduzibel** sind, d.h. nur auf dem  $i$ -ten Multiplett  $M_i$  wirken.

**Beispiel:**

$$\hat{L}^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & & \\ 0 & \hbar^2 \frac{3}{4} \mathbb{1}_2 & 0 & \cdots & \\ \vdots & 0 & \hbar^2 2 \mathbb{1}_3 & 0 & \cdots \\ & \vdots & 0 & \hbar^2 \frac{15}{4} \mathbb{1}_4 & \\ & & \vdots & & \ddots \end{pmatrix}$$

ist eine vollständig reduzible Darstellung von  $\hat{L}^2$ . Die einzelnen Blockmatrizen sind die irreduziblen Darstellungen von  $\hat{L}^2$  auf den entsprechenden Multipletts. Diese Matrixdarstellung von  $\hat{L}^2$  ist uns übrigens schon in Abschnitt 5.1.3 der Vorlesung "Quantenmechanik I" begegnet.

Wir hatten in Abschnitt 2.1 gesehen, dass ein System invariant unter Raum- und Zeit-Translationen sowie Drehungen ist, wenn die **Generatoren** der entsprechenden Gruppen  $G_r, G_t$  und  $G_R$  mit dem **Hamilton-Operator** des Systems **vertauschen**. Wir wollen diesen Zusammenhang noch einmal kurz für beliebige Lie-Gruppen rekapitulieren und dann Schlußfolgerungen für die Casimir-Operatoren der Gruppe ziehen.

Sei  $G = \{g\}$  eine Lie-Gruppe und  $D(G) = \{D(g), g \in G\}$  eine Darstellung dieser Gruppe, mit

$$D(g) = \hat{U}(\vec{\alpha}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \alpha_j \hat{X}_j\right) .$$

Die Hilbert-Raumzustände des Systems erfüllen die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle . \quad (2.84)$$

Der unter  $G$  transformierte Zustand ist

$$|\psi'(t)\rangle = D(g) |\psi(t)\rangle = \hat{U}(\vec{\alpha}) |\psi(t)\rangle . \quad (2.85)$$

Wir wenden die Transformation  $\hat{U}(\vec{\alpha})$  auf die Schrödinger-Gleichung (2.84) an,

$$\begin{aligned} \hat{U} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U} |\psi(t)\rangle \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi'(t)\rangle \\ &= \hat{U} \hat{H} |\psi(t)\rangle = \hat{U} \hat{H} \hat{U}^{-1} \hat{U} |\psi(t)\rangle \equiv \hat{U} \hat{H} \hat{U}^{-1} |\psi'(t)\rangle , \end{aligned}$$

wobei wir mehrfach die Definition (2.85) des transformierten Hilbert-Raumzustands benutzt haben. Falls das System **invariant** unter der Lie-Gruppe  $G$  ist,  $G$  also eine **Symmetriegruppe** des Systems ist, erfüllt der transformierte Zustand ebenfalls die Schrödinger-Gleichung, mit **demselben** Hamilton-Operator,  $\hat{H}' = \hat{H}$ , also

$$\begin{aligned} i\hbar |\psi'(t)\rangle &= \hat{U} \hat{H} \hat{U}^{-1} |\psi'(t)\rangle \equiv \hat{H} |\psi'(t)\rangle \\ \iff \hat{U} \hat{H} \hat{U}^{-1} &= \hat{H} \iff \hat{U} \hat{H} = \hat{H} \hat{U} \\ \iff [\hat{U}, \hat{H}] &= 0 , \end{aligned}$$

oder, für **infinitesimale** Transformationen,

$$[\hat{X}_j, \hat{H}] = 0 \quad \forall j = 1, \dots, N . \quad (2.86)$$

Weil die Casimir-Operatoren aber **Funktionen** der Generatoren sind, s. Gl. (2.79), ist es offensichtlich, dass auch diese Operatoren mit dem Hamilton-Operator vertauschen,

$$[\hat{C}_i, \hat{H}] = 0 \quad \forall i = 1, \dots, r , \quad (2.87)$$

wobei  $r$  die **Gesamtzahl** der Casimir-Operatoren angibt ( $r$  ist nach dem Racah-Theorem für halbeinfache Lie-Gruppen identisch mit deren Rang). Per Definition vertauschen auch alle Casimir-Operatoren untereinander,

$$[\hat{C}_i, \hat{C}_j] = 0 \quad \forall i, j = 1, \dots, r . \quad (2.88)$$

Der maximale Satz von vertauschenden Operatoren ist damit zunächst

$$\left\{ \hat{C}_1, \dots, \hat{C}_r, \hat{H} \right\} .$$

Weil  $\hat{H}$  alle Voraussetzungen für einen Casimir-Operator des Systems erfüllt, aber gleichzeitig **kein neuer**, d.h. von den anderen  $\hat{C}_i$  **linear unabhängiger** Casimir-Operator sein kann (da  $r$  schon die maximale Anzahl von Casimir-Operatoren angibt), muss  $\hat{H}$  eine **Funktion** der Casimir-Operatoren des Systems sein,

$$\hat{H} = \hat{H}(\hat{C}_1, \dots, \hat{C}_r) .$$

Falls diese Funktion in eine Taylor-Reihe entwickelt werden kann, so ist  $\hat{H}$  (in führender Ordnung in den Casimir-Operatoren) einfach als **Linearkombination** der Casimir-Operatoren des Systems, plus der Einheitsmatrix  $\mathbb{1}$ , die immer mit allen  $D(g) \in D(G)$  vertauscht, darstellbar,

$$\hat{H} = c_0 \mathbb{1} + \sum_{i=1}^r c_i \hat{C}_i + O(\hat{C}_i^2) . \quad (2.89)$$

**Beispiel:** Wasserstoffatom. Aufgrund des Zentralpotentials ist das System invariant unter **Raumdrehungen**, d.h. unter der Gruppe  $G_R$ . Der einzige Casimir-Operator dieser Gruppe ist, wie wir schon wissen, das Quadrat des Drehimpuls-Operators,  $\hat{L}^2$ . In der Tat lautet der Hamilton-Operator in Kugelkoordinaten

$$\hat{H}(\vec{r}) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r) \right] \mathbb{1} + \frac{1}{2mr^2} \hat{L}^2,$$

vgl. Gl. (5.46) der Vorlesung ‘‘Quantenmechanik I’’. Wir identifizieren also

$$\begin{aligned} c_0 &\equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r), \\ c_1 &\equiv \frac{1}{2mr^2}. \end{aligned}$$

Die Koeffizienten  $c_0, c_1$  sind noch (operatorwertige) Funktionen des radialen Abstands  $r$ , welcher unter  $G_R$  aber eine Invariante darstellt.

Der maximale, **linear unabhängige** Satz von miteinander vertauschenden Operatoren ist also zunächst lediglich der Satz der Casimir-Operatoren des Systems,

$$\{ \hat{C}_1, \dots, \hat{C}_r \}.$$

Wir können also ein System von Zuständen wählen, welche gleichzeitig **Eigenfunktionen zu allen Casimir-Operatoren** sind. Diese Zustände werden durch die Angabe der zugehörigen **Eigenwerte** charakterisiert,

$$|C_1, \dots, C_r\rangle.$$

Dies ist aber noch **kein reiner** Zustand, also ein Zustand, bei dem **alle möglichen meßbaren** Quantenzahlen festgelegt sind. Es kann nämlich noch weitere Operatoren  $\hat{A}_j, j = 1, \dots, s$ , geben, die **keine** Casimir-Operatoren sind, aber **dennoch** mit dem Hamilton-Operator und mit allen Casimir-Operatoren des Systems vertauschen.

**Beispiel:** Im Wasserstoffatom ist der Generator  $\hat{L}^z$  ein solcher Operator. Er vertauscht sowohl mit  $\hat{H}$  als auch mit  $\hat{L}^2$ . (Wir haben den Spin aus dieser Betrachtung ausgeschlossen. Im Prinzip gäbe es mit  $\hat{S}^2$  einen weiteren Casimir-Operator, der aber nicht in  $\hat{H}$  auftritt, und mit  $\hat{S}^z$  einen weiteren Operator, der mit  $\hat{H}$  vertauscht.)

**Reine** Zustände können also durch die Eigenwerte  $C_i$  der Casimir-Operatoren  $\hat{C}_i$  und die Eigenwerte  $\alpha_j$  der Operatoren  $\hat{A}_j$  charakterisiert werden,

$$|\psi\rangle \equiv |C_1, \dots, C_r, \alpha_1, \dots, \alpha_s\rangle. \quad (2.90)$$

**Satz:** Die Zustände eines Multipletts sind bezüglich **aller** Casimir-Operatoren **entartet**.

**Beweis:** Wir betrachten einen reinen Zustand (2.90), der zu einem bestimmten Multiplett



gehöre. Wir kürzen im folgenden die Menge der Eigenwerte  $\{\alpha_1, \dots, \alpha_s\}$  mit  $\alpha$  ab. Nach Definition eines Multipletts ist auch

$$|\psi'\rangle = \hat{U} |\psi\rangle = \hat{U} |C_1, \dots, C_r, \alpha\rangle \equiv |C'_1, \dots, C'_r, \alpha'\rangle$$

ein Zustand des **gleichen** Multipletts. Es ist zu zeigen, dass

$$C'_i \equiv C_i \quad \forall i = 1, \dots, r .$$

Dazu berechnen wir unter Benutzung von  $[\hat{C}_i, \hat{U}] = 0$

$$\begin{aligned} \hat{C}_i |C'_1, \dots, C'_r, \alpha'\rangle &\equiv C'_i |C'_1, \dots, C'_r, \alpha'\rangle \\ &= \hat{C}_i \hat{U} |C_1, \dots, C_r, \alpha\rangle = \hat{U} \hat{C}_i |C_1, \dots, C_r, \alpha\rangle \\ &= \hat{U} C_i |C_1, \dots, C_r, \alpha\rangle = C_i \hat{U} |C_1, \dots, C_r, \alpha\rangle \\ &= C_i |C'_1, \dots, C'_r, \alpha'\rangle , \end{aligned}$$

also in der Tat  $C'_i = C_i$ , q.e.d.

Dieser Satz bedeutet, dass die verschiedenen Multipletts durch die Angabe der Eigenwerte  $C_i$  der Casimir-Operatoren **eindeutig** charakterisiert werden können.

**Beispiel:** Die verschiedenen Multipletts zum Drehimpuls werden durch die Angabe von  $\ell$  charakterisiert;  $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$  ist der Eigenwert von  $\hat{L}^2$  auf dem durch  $\ell$  charakterisierten Multiplett.

**Corollar:** Da  $\hat{H} = \hat{H}(\hat{C}_1, \dots, \hat{C}_r)$ , sind alle Zustände eines Multipletts auch **energetisch entartet**. 14.6.2012

Zum Schluss dieses Abschnitts beweisen wir noch einen weiteren wichtigen Satz, der aus zwei Teilen besteht:

**Das Schur'sche Lemma (I):** Gegeben sei eine halbeinfache unitäre Lie-Gruppe  $G$  und ein durch den Hamilton-Operator  $\hat{H}$  beschriebenes System. Falls  $G$  eine Symmetriegruppe des Systems ist, also die Dynamik invariant unter Transformationen  $D(g) \in D(G)$  ist,

$$[D(g), \hat{H}] = 0 \quad \forall g \in G ,$$

dann sind Übergänge zwischen verschiedenen Multipletts verboten.

**Beweis:** Aufgrund von Gl. (2.87) gilt für Zustände

$$|C_1, \dots, C_r, \alpha\rangle \in M , \quad |C'_1, \dots, C'_r, \alpha'\rangle \in M' ,$$

die zu **verschiedenen** Multipletts  $M, M', M \neq M'$ , gehören

$$\begin{aligned} 0 &= \langle C'_1, \dots, C'_r, \alpha' | [\hat{C}_i, \hat{H}] |C_1, \dots, C_r, \alpha\rangle \\ &= \langle C'_1, \dots, C'_r, \alpha' | \hat{C}_i \hat{H} - \hat{H} \hat{C}_i |C_1, \dots, C_r, \alpha\rangle \\ &= \langle C'_1, \dots, C'_r, \alpha' | \hat{C}_i^\dagger \hat{H} - \hat{H} \hat{C}_i |C_1, \dots, C_r, \alpha\rangle \\ &= (C'_i - C_i) \langle C'_1, \dots, C'_r, \alpha' | \hat{H} |C_1, \dots, C_r, \alpha\rangle \\ &= (C'_i - C_i) E(C_1, \dots, C_r) \langle C'_1, \dots, C'_r, \alpha' |C_1, \dots, C_r, \alpha\rangle , \end{aligned}$$

wobei wir von der zweiten zur dritten Zeile die Hermitezität der Casimir-Operatoren ausgenutzt haben. Diese Gleichung kann nur erfüllt werden, falls (i)  $C'_i = C_i$  oder falls (ii)

$$\langle C'_1, \dots, C'_r, \alpha' | C_1, \dots, C_r, \alpha \rangle = 0 .$$

Weil aber nach Voraussetzung die beiden Zustände zu **verschiedenen** Multipletts gehören, und diese durch die Eigenwerte der Casimir-Operatoren **eindeutig** charakterisiert werden, muss **wenigstens für einen** Casimir-Operator, z.B.  $\hat{C}_j, C'_j \neq C_j$  sein. Für diesen kann dann aber nur Fall (ii) eintreten, um die Gleichung zu erfüllen, d.h. das **Übergangsmatrixelement** zwischen den beiden Zuständen verschwindet, q.e.d.

**Bemerkung:** Betrachten wir die vorletzte Zeile des vorangegangenen Beweises, so können wir diesen Sachverhalt auch noch anders formulieren. Offenbar besitzt der Hamilton-Operator  $\hat{H}$  **keinen** Anteil, der einen **Übergang** zwischen Zuständen verschiedener Multipletts induziert. Gäbe es einen solchen Anteil, dann wäre  $\langle C'_1, \dots, C'_r, \alpha' | C_1, \dots, C_r, \alpha \rangle \neq 0$ . Dies kann wiederum nur passieren, wenn  $\hat{H}$  Anteile enthält, die die Symmetrie **explizit brechen**.

**Das Schursche Lemma (II):** Die irreduziblen Darstellungen der Casimir-Operatoren sind proportional zur Einheitsmatrix.

**Beweis:** Wir betrachten ein Multiplett  $M$  von  $d$  Zuständen,

$$M \equiv \{ |C_1, \dots, C_r, j\rangle, j = 1, \dots, d \} ,$$

wobei wir die Zustände des Multipletts (die sich noch in den Quantenzahlen  $\alpha \equiv \{\alpha_1, \dots, \alpha_s\}$  unterscheiden) mit dem Index  $j$  durchnummeriert haben. Offensichtlich ist  $\dim M = d$ . Eine irreduzible Darstellung eines Operators  $D(g)$  hat die Matrixdarstellung

$$[D(G)]_{jk} = \langle C_1, \dots, C_r, j | D(g) | C_1, \dots, C_r, k \rangle .$$

Die irreduzible Darstellung des Casimir-Operators  $\hat{C}_i$  ist also

$$\begin{aligned} [\hat{C}_i]_{jk} &= \langle C_1, \dots, C_r, j | \hat{C}_i | C_1, \dots, C_r, k \rangle \\ &= C_i \langle C_1, \dots, C_r, j | C_1, \dots, C_r, k \rangle \equiv C_i \delta_{jk} , \end{aligned}$$

wobei wir die Orthonormalität der Zustände des Multipletts ausgenutzt haben. Also ist

$$[\hat{C}_i] = C_i \mathbb{1}_d , \quad \text{q.e.d. .}$$

## 2.3 Addition von Drehimpulsen

### 2.3.1 Konstruktion von Eigenzuständen zum Gesamtdrehimpuls

Dieser Abschnitt ist der Fragestellung gewidmet, wie sich einzelne Drehimpulse, z.B. Bahndrehimpuls  $\hat{L}$  und Spin  $\hat{S}$ , zu einem Gesamtdrehimpuls  $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$  kombinieren lassen. Dies kam bereits in der Behandlung der Dirac-Gleichung in Abschnitt 1.2 zur Anwendung.

Gegeben seien zwei Drehimpulse  $\hat{J}_1$  und  $\hat{J}_2$ . Sie sollen in verschiedenen Räumen wirken (wie es beispielsweise bei  $\hat{L}$  und  $\hat{S}$  der Fall ist), so dass

$$[\hat{J}_1^a, \hat{J}_2^b] = 0, \quad a, b = x, y, z. \quad (2.91)$$

In jedem Raum existiert ein vollständiges Funktionensystem von Eigenzuständen zum Casimir-Operator  $\hat{J}_i^2$ , dessen Eigenwerte die Multipletts eindeutig festlegen, und zu  $\hat{J}_i^z$ , einem der Generatoren der Drehgruppe, dessen Eigenwerte die Zustände innerhalb eines Multipletts charakterisieren,

$$\begin{aligned} \hat{J}_i^2 |j_i m_i\rangle &= \hbar^2 j_i (j_i + 1) |j_i m_i\rangle, \\ \hat{J}_i^z |j_i m_i\rangle &= \hbar m_i |j_i m_i\rangle, \quad i = 1, 2. \end{aligned}$$

Zustände im **Produktraum** sind, wie schon in der Vorlesung ‘‘Quantenmechanik I’’, Abschnitt 6.3.3, diskutiert, **direkte Produkte** von Zuständen aus den beiden Unterräumen,

$$|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \equiv |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle. \quad (2.92)$$

Wir sind aber eigentlich an Zuständen interessiert, die Eigenzustände zum **Gesamtdrehimpuls**

$$\hat{J} \equiv \hat{J}_1 + \hat{J}_2$$

sind. Es ist klar, dass  $\hat{J}$  wieder ein Drehimpuls ist. Man rechnet nämlich leicht nach, dass

$$[\hat{J}^a, \hat{J}^b] = [\hat{J}_1^a + \hat{J}_2^a, \hat{J}_1^b + \hat{J}_2^b] = [\hat{J}_1^a, \hat{J}_1^b] + [\hat{J}_2^a, \hat{J}_2^b],$$

weil Kommutatoren von Komponenten unterschiedlicher Drehimpulse aufgrund von Gl. (2.91) verschwinden. Benutzen wir die Vertauschungsrelationen für die einzelnen Drehimpulse, so erhalten wir

$$[\hat{J}^a, \hat{J}^b] = i\hbar \epsilon^{abc} \hat{J}_1^c + i\hbar \epsilon^{abc} \hat{J}_2^c = i\hbar \epsilon^{abc} (\hat{J}_1^c + \hat{J}_2^c) \equiv i\hbar \epsilon^{abc} \hat{J}^c, \quad (2.93)$$

also die Vertauschungsrelation für den Gesamtdrehimpuls. Demnach gibt es Eigenzustände  $|j m\rangle$  zu  $\hat{J}^2$  und  $\hat{J}^z$ , welche folgende Eigenwertgleichungen erfüllen,

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 |j m\rangle &= \hbar^2 j (j + 1) |j m\rangle, \\ \hat{J}^z |j m\rangle &= \hbar m |j m\rangle. \end{aligned}$$

Diese Eigenzustände lassen sich in Multipletts zu gegebenem  $j$  zusammenfassen. Die Frage ist nun, wie sie mit den Produktzuständen (2.92) zusammenhängen. Mit anderen Worten, wir versuchen nun, die Produktzustände auf Zustände von Multipletts zu gegebenem  $j$  zu **reduzieren**.

Zunächst müssen wir uns fragen, wieviel Information beim Übergang von den Produktzuständen  $|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$  zu den  $|j m\rangle$  verlorengeht. Die Produktzustände sind Eigenzustände zu **vier** miteinander vertauschenden Observablen,

$$\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2, \hat{J}_1^z, \hat{J}_2^z.$$

## 2 Symmetrien

Die Zustände  $|j m\rangle$  dagegen sind lediglich Eigenzustände zu  $\hat{J}^2$  und  $\hat{J}^z$ . Damit diese die gleiche Information wie die Produktzustände enthalten, müssen wir also zwei weitere, mit  $\hat{J}^2$  und  $\hat{J}^z$  vertauschende Observable festlegen. Dies sind die beiden Casimir-Operatoren  $\hat{J}_1^2$  und  $\hat{J}_2^2$ , denn es gilt

$$\begin{aligned} [\hat{J}^2, \hat{J}_1^2] &= [\hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + 2\hat{J}_1 \cdot \hat{J}_2, \hat{J}_1^2] = 2\hat{J}_2 \cdot [\hat{J}_1, \hat{J}_1^2] \equiv 0, \\ [\hat{J}^2, \hat{J}_2^2] &= [\hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + 2\hat{J}_1 \cdot \hat{J}_2, \hat{J}_2^2] = 2\hat{J}_1 \cdot [\hat{J}_2, \hat{J}_2^2] \equiv 0, \\ [\hat{J}^z, \hat{J}_1^2] &= [\hat{J}_1^z + \hat{J}_2^z, \hat{J}_1^2] = [\hat{J}_1^z, \hat{J}_1^2] \equiv 0, \\ [\hat{J}^z, \hat{J}_2^2] &= [\hat{J}_1^z + \hat{J}_2^z, \hat{J}_2^2] = [\hat{J}_2^z, \hat{J}_2^2] \equiv 0. \end{aligned}$$

Ohne Information gegenüber den Produktzuständen zu verlieren, können wir also eine Basis von Eigenzuständen zu  $\hat{J}^2$ ,  $\hat{J}^z$ ,  $\hat{J}_1^2$ ,  $\hat{J}_2^2$  festlegen,

$$|j_1 j_2; j m\rangle. \quad (2.94)$$

Dies sind nach wie vor Eigenzustände zu  $\hat{J}^2$  und  $\hat{J}^z$ , aber die möglichen Werte von  $j$  und  $m$  werden durch Vorgabe von  $j_1$  und  $j_2$  eingeschränkt. Wie dies im einzelnen geschieht, machen wir uns im folgenden klar.

Zunächst erfüllen die Zustände (2.94) die Eigenwertgleichungen

$$\hat{J}^2 |j_1 j_2; j m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j_1 j_2; j m\rangle, \quad (2.95)$$

$$\hat{J}^z |j_1 j_2; j m\rangle = \hbar m |j_1 j_2; j m\rangle, \quad (2.96)$$

$$\hat{J}_i^2 |j_1 j_2; j m\rangle = \hbar^2 j_i(j_i+1) |j_1 j_2; j m\rangle, \quad i = 1, 2. \quad (2.97)$$

Da die Produktzustände (2.92) eine Orthonormalbasis des Produktraums bilden, kann man die Zustände (2.94) nach den Produktzuständen entwickeln,

$$|j_1 j_2; j m\rangle = \sum_{j'_1, j'_2, m'_1, m'_2} |j'_1 j'_2; m'_1 m'_2\rangle \langle j'_1 j'_2; m'_1 m'_2 | j_1 j_2; j m\rangle. \quad (2.98)$$

In dieser Entwicklung sind gewisse Vereinfachungen möglich. Aufgrund der Hermitizität von  $\hat{J}_i^2$  gilt

$$\begin{aligned} 0 &= \langle j'_1 j'_2; m'_1 m'_2 | \hat{J}_i^2 - \hat{J}_i^2 | j_1 j_2; j m\rangle \\ &= \langle j'_1 j'_2; m'_1 m'_2 | \hat{J}_i^{2\dagger} - \hat{J}_i^2 | j_1 j_2; j m\rangle \\ &= \hbar^2 [j'_i(j'_i+1) - j_i(j_i+1)] \langle j'_1 j'_2; m'_1 m'_2 | j_1 j_2; j m\rangle, \quad i = 1, 2. \end{aligned}$$

Das Matrixelement auf der rechten Seite ist aber gewiß nicht null, denn sonst wäre die Entwicklung (2.98) nicht möglich. Also muss  $j'_1 = j_1$  und  $j'_2 = j_2$  sein. Benutzen wir dies in der Entwicklung (2.98), so vereinfacht sich diese zu

$$|j_1 j_2; j m\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m\rangle. \quad (2.99)$$

Die Entwicklungskoeffizienten

$$\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle$$

nennt man, wie wir schon aus Abschnitt 1.2.16 wissen, **Clebsch-Gordan-Koeffizienten**. Dort hatten wir allerdings eine einfachere Schreibweise gefunden. Wir werden im folgenden sehen, dass sich Gl. (2.99) in der Tat noch weiter vereinfachen lässt.

Tatsächlich sind nicht nur die Zustände (2.94) Eigenzustände zu  $\hat{J}^z$ , s. Gl. (2.96), sondern auch die ursprünglichen Produktzustände,

$$\begin{aligned} \hat{J}^z |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle &= (\hat{J}_1^z + \hat{J}_2^z) |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle \\ &= \hbar(m_1 + m_2) |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle. \end{aligned} \quad (2.100)$$

Wir berechnen nun mit Hilfe der Hermitezität von  $\hat{J}^z$

$$\begin{aligned} 0 &= \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | \hat{J}^z - \hat{J}^z |j_1 j_2; j m\rangle \\ &= \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | \hat{J}^{z\dagger} - \hat{J}^z |j_1 j_2; j m\rangle \\ &= \hbar(m_1 + m_2 - m) \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle, \end{aligned}$$

wobei wir  $\hat{J}^z$  nach rechts haben wirken lassen und dabei die Eigenwertgleichung (2.96) benutzt haben, sowie  $\hat{J}^{z\dagger}$  nach links haben wirken lassen und dabei Gl. (2.100) benutzt haben. Da der Clebsch-Gordan-Koeffizient  $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle$  nicht verschwindet, muss

$$m = m_1 + m_2 \quad \text{bzw.} \quad m_2 = m - m_1 \quad (2.101)$$

sein. Die Entwicklung (2.99) vereinfacht sich also zu

$$|j_1 j_2; j m\rangle = \sum_{m_1} |j_1 j_2; m_1 m - m_1\rangle \langle j_1 j_2; m_1 m - m_1 | j_1 j_2; j m \rangle. \quad (2.102)$$

### 2.3.2 Multipletts zum Gesamtdrehimpuls

Die Frage, die sich nun stellt, ist, welche Werte  $j$  bei gegebenem  $j_1, j_2$  annehmen darf, also welche Multipletts zum Gesamtdrehimpuls  $j$  erlaubt sind. Wir beantworten dies, indem wir aus den möglichen Werten für  $m_1, m_2$  die zugehörigen Werte von  $m$  bestimmen. Dies legt den maximal möglichen Wert von  $j$  fest. Aus der Forderung, dass die Zahl der Zustände (2.92) und (2.94) gleich sein müssen, und weil es zu gegebenem  $j$  genau  $2j + 1$  mögliche Werte von  $m$  gibt, können wir auch den minimal möglichen Wert von  $j$  bestimmen. Weil die dazwischen liegenden Werte sich jeweils um eins unterscheiden, sind damit alle Multipletts zu gegebenem  $j$  identifiziert.

Abbildung 2.1 zeigt als Beispiel den Fall  $j_1 = 3 = 6/2$  und  $j_2 = 5/2$ . Zunächst zeichnen wir alle möglichen Zustände zu gegebenem  $j_1, j_2$  in die  $(m_1, m_2)$ -Ebene ein. Dies sind  $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$  Zustände, also in unserem Fall  $(2 \cdot 3 + 1)(2 \cdot 5/2 + 1) = 7 \cdot 6 = 42$ . Sodann erinnern wir uns daran, dass zu gegebenem  $m$  die möglichen Werte von  $m_2$  die Bedingung (2.101) erfüllen müssen. Zu gegebenem  $m$  sind also nur die Zustände auf den roten Linien erlaubt. Jede dieser Linien gehört zu einem bestimmten Wert von  $m$ . Der

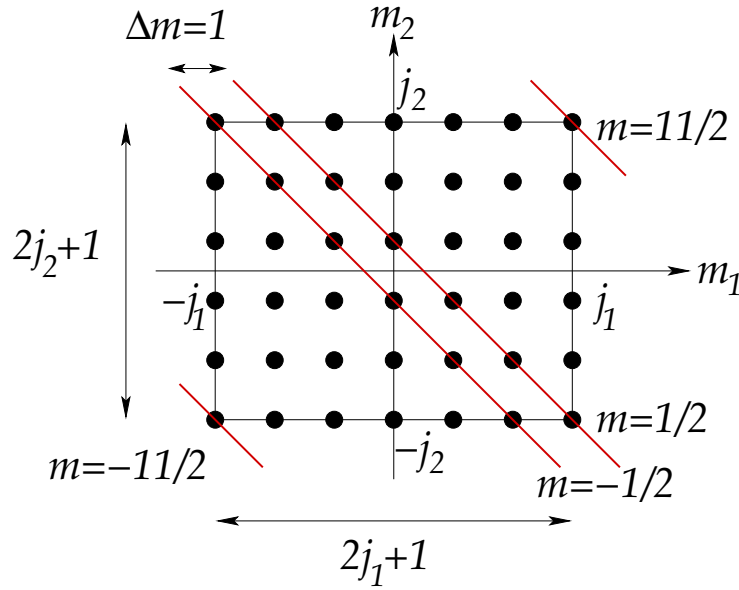


Abbildung 2.1: Bestimmung der möglichen Multipletts zu gegebenem  $j$  bei vorgegebenem  $j_1, j_2$ .

maximal mögliche Wert (entsprechend der roten Linie, die gerade die rechte obere Ecke berührt) ist durch

$$m_2 = j_2 = m^{\max} - m_1 = m^{\max} - j_1 \implies m^{\max} = j_1 + j_2 \quad (2.103)$$

gegeben, also in unserem Fall  $m^{\max} = 3 + 5/2 = 11/2$ . Der minimal mögliche Wert (entsprechend der roten Linie, die gerade die linke untere Ecke berührt) ist durch

$$m_2 = -j_2 = m^{\min} - m_1 = m^{\min} + j_1 \implies m^{\min} = -(j_1 + j_2) \quad (2.104)$$

gegeben, also in unserem Fall gerade  $m^{\min} = -11/2$ . Der Abstand  $\Delta m$  zwischen den roten Linien beträgt jeweils eine Einheit,  $\Delta m = 1$ .

Es ist klar, dass sowohl der maximale wie der minimale Wert von  $m$  zum Multiplett  $j = j_1 + j_2$  gehören. Da kein größerer (oder kleinerer) Wert von  $m$  auftritt, ist der maximale Wert von  $j$  gerade

$$j^{\max} = j_1 + j_2. \quad (2.105)$$

Was aber ist der minimale Wert von  $j$ ? Zunächst ist klar, dass  $j \geq 0$  sein muss, sonst wäre  $j$  keine vernünftige Drehimpulsquantenzahl. Ferner ist der Hilbert-Unterraum, welcher von den Zuständen  $|j_1 j_2; j m\rangle$  aufgespannt wird, identisch mit dem, welcher von den Produktzuständen  $|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$  aufgespannt wird (es handelt sich ja nur um unterschiedliche Basen des gleichen Unterraums). Also muss in beiden Fällen die **Dimension** des Hilbert-Unterraums, also die **Anzahl** der Zustände die gleiche sein. Die Zahl der Produktzustände hatten wir schon bestimmt,

$$N_1 = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1). \quad (2.106)$$

Die Zahl der Zustände  $|j_1 j_2; j m\rangle$  ist gegeben durch die Zahl der Zustände in einem Multiplett zu gegebenem  $j$ , also gerade  $2j + 1$ , summiert über alle möglichen Werte von  $j$ , d.h. über alle Multipletts,

$$N_2 = \sum_{j=j^{\min}}^{j^{\max}} (2j + 1), \quad (2.107)$$

wobei wir  $j^{\max} = j_1 + j_2$  schon bestimmt hatten. Setzen wir  $N_1 \equiv N_2$ , so läßt sich  $j^{\min}$  bestimmen. Es ist

$$\begin{aligned} N_2 &= \sum_{j=j^{\min}}^{j^{\max}} (2j + 1) = \sum_{j=0}^{j^{\max}} (2j + 1) - \sum_{j=0}^{j^{\min}-1} (2j + 1) \\ &= (j^{\max} + 1)^2 - (j^{\min})^2 = (j_1 + j_2)^2 + 2(j_1 + j_2) + 1 - (j^{\min})^2 \\ &\equiv N_1 = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) = 4j_1 j_2 + 2(j_1 + j_2) + 1 \\ \iff (j^{\min})^2 &= (j_1 - j_2)^2 \\ \iff j^{\min} &= |j_1 - j_2|, \end{aligned}$$

wobei wir die Bedingung  $j \geq 0$  ausgenutzt haben. Kombinieren wir dieses Ergebnis mit Gl. (2.105), so ergeben sich die möglichen Werte von  $j$  zu

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2, \quad (2.108)$$

wobei  $j$  sich ausgehend von  $|j_1 - j_2|$  jeweils um eins erhöht. Dies ist das quantenmechanische Analogon zur **Dreiecksungleichung** der Vektoraddition für klassische Vektoren,

$$|J_1 - J_2| \leq |\vec{J}| = |\vec{J}_1 + \vec{J}_2| \leq J_1 + J_2.$$

Der minimale Wert ergibt sich, wenn die Vektoren  $\vec{J}_1$  und  $\vec{J}_2$  **antiparallel** zueinander stehen, der maximale, wenn sie **parallel** zueinander stehen. Damit sind die möglichen Multipletts zu gegebenem  $j$  festgelegt.

### 2.3.3 Berechnung der Clebsch-Gordan-Koeffizienten

Zuguterletzt stellt sich die Frage, wie man die Clebsch-Gordan-Koeffizienten berechnet. Dies geschieht mit Hilfe eines **Rekursionsverfahrens**, welches auf der Wirkung der **Stufenoperatoren** auf einem Multiplett zu gegebenem  $j$  beruht. Wir beginnen mit Gl. (2.99). Da  $j_1, j_2$  immer von vorneherein fest vorgegeben sind, lassen wir der Einfachheit halber die Argumente  $j_1, j_2$  in den Zuständen weg,

$$|j m\rangle = \sum_{m_1, m_2} |m_1 m_2\rangle \langle m_1 m_2 | j m\rangle. \quad (2.109)$$

Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten sind Elemente einer **unitären Matrix**  $C$  mit der Dimension des Hilbert-Unterraums, der durch die Produktzustände (2.92) aufgespannt wird,

## 2 Symmetrien

also der Dimension  $N_1 = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ , vgl. Gl. (2.106). Die Unitarität von  $C$  zeigt man wie folgt. Es ist

$$\begin{aligned} \delta_{jj'} \delta_{mm'} &= \langle j' m' | j m \rangle = \sum_{m_1 m_2} \langle j' m' | m_1 m_2 \rangle \langle m_1 m_2 | j m \rangle \\ &= \sum_{m_1 m_2} \langle m_1 m_2 | j' m' \rangle^* \langle m_1 m_2 | j m \rangle \equiv \sum_{m_1 m_2} C_{m_1 m_2, j' m'}^* C_{m_1 m_2, j m} \\ &\equiv \sum_c C_{ca}^* C_{cb} = \sum_c C_{ac}^\dagger C_{cb} = (C^\dagger C)_{ab} \equiv (C^\dagger C)_{j' m', j m} , \end{aligned}$$

wobei wir, um die Operation der Matrix-Multiplikation besser erkennen zu können, in den Zwischenschritten die Index-Paare folgendermaßen abgekürzt haben:  $(m_1, m_2) \equiv c$ ,  $(j', m') \equiv b$ ,  $(j, m) \equiv a$ . In Matrix-Schreibweise lautet diese Gleichung

$$\mathbb{1} = C^\dagger C \iff C^\dagger = C^{-1} , \quad \text{q.e.d. .}$$

Durch eine geeignete Wahl der Phasen der Produktzustände (2.92) kann man  $C$  sogar **reell** machen,  $C^T = C^{-1}$ , oder

$$\langle m_1 m_2 | j m \rangle^* = \langle j m | m_1 m_2 \rangle \equiv \langle m_1 m_2 | j m \rangle .$$

Wir betrachten nun den zu gegebenem  $j_1, j_2$  maximal möglichen Wert von  $j$ ,  $j^{\max} = j_1 + j_2$ , und den maximal möglichen Wert von  $m$ ,  $m = j_1 + j_2$ . Die Bedingungen

$$\begin{aligned} m_2 &= m - m_1 = j_1 + j_2 - m_1 \leq j_2 \iff j_1 \leq m_1 , \\ m_1 &\leq j_1 , \end{aligned}$$

können nur durch die Wahl  $m_1 = j_1$ ,  $m_2 = j_2$  erfüllt werden. Also enthält die Summe über  $m_1, m_2$  in Gl. (2.109) nur einen einzigen Term,

$$|j_1 + j_2 j_1 + j_2\rangle = |j_1 j_2\rangle \langle j_1 j_2 | j_1 + j_2 j_1 + j_2 \rangle . \quad (2.110)$$

Multiplikation von links mit  $\langle j_1 + j_2 j_1 + j_2 |$  ergibt

$$1 = \langle j_1 + j_2 j_1 + j_2 | j_1 j_2 \rangle \langle j_1 j_2 | j_1 + j_2 j_1 + j_2 \rangle \equiv (\langle j_1 j_2 | j_1 + j_2 j_1 + j_2 \rangle)^2 ,$$

weil die Clebsch-Gordan-Koeffizienten reell gewählt werden können. Wir wählen die positive Lösung dieser Gleichung,

$$\langle j_1 j_2 | j_1 + j_2 j_1 + j_2 \rangle \equiv 1 . \quad (2.111)$$

Dies ist der erste berechnete Clebsch-Gordan-Koeffizient. Eingesetzt in Gl. (2.110) erhalten wir also

$$|j_1 + j_2 j_1 + j_2\rangle = |j_1 j_2\rangle . \quad (2.112)$$

19.6.2012

Wir bleiben nun im Multiplett zu  $j = j^{\max} = j_1 + j_2$  und erniedrigen  $m$  um eine Einheit durch Anwenden des **Stufenoperators**

$$\hat{J}_- = \hat{J}_{1,-} + \hat{J}_{2,-} .$$



Dieser Stufenoperator wird auf die linke und rechte Seite von Gl. (2.112) angewendet, mit dem Resultat (vgl. Gl. (1.196))

$$\begin{aligned} \hat{J}_- |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle &= \hbar \sqrt{2(j_1 + j_2)} |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle, \\ (\hat{J}_{1,-} + \hat{J}_{2,-}) |j_1, j_2\rangle &= \hbar \sqrt{2j_1} |j_1 - 1, j_2\rangle + \hbar \sqrt{2j_2} |j_1, j_2 - 1\rangle, \\ \Rightarrow |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle &= \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1 - 1, j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_2 - 1\rangle. \end{aligned} \quad (2.113)$$

Wir vergleichen dies mit der Entwicklung (2.102) für  $j = j_1 + j_2$ ,  $m = j_1 + j_2 - 1$ , die in der abgekürzten Notation die Form

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle = \sum_{m_1} |m_1, j_1 + j_2 - 1 - m_1\rangle \langle m_1, j_1 + j_2 - 1 - m_1 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle \quad (2.114)$$

annimmt. Die Bedingungen

$$m_2 = m - m_1 = j_1 + j_2 - 1 - m_1 \leq j_2, \quad m_1 \leq j_1,$$

führen nun auf zwei mögliche Werte von  $m_1$ , (i)  $m_1 = j_1$  und (ii)  $m_1 = j_1 - 1$ . Kleinere Werte kann  $m_1$  nicht annehmen, da sonst  $m_2 > j_2$  wird. In Fall (i) ist  $m_2 = j_2 - 1$  und in Fall (ii)  $m_2 = j_2$ . Also lautet Gl. (2.114) explizit

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle = |j_1, j_2 - 1\rangle \langle j_1, j_2 - 1 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle + |j_1 - 1, j_2\rangle \langle j_1 - 1, j_2 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle.$$

Durch Vergleich mit Gl. (2.113) identifizieren wir die folgenden Clebsch-Gordan-Koeffizienten

$$\langle j_1, j_2 - 1 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle = \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}}, \quad (2.115)$$

$$\langle j_1 - 1, j_2 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}}. \quad (2.116)$$

Durch wiederholtes Anwenden von  $\hat{J}_-$  kann man sich so durch das gesamte Multiplett zu  $j^{\max} = j_1 + j_2$  "hangeln" und die zugehörigen Clebsch-Gordan-Koeffizienten bestimmen.

Dann betrachtet man das Multiplett zum nächstniedrigeren Wert  $j = j_1 + j_2 - 1$  und beginnt wieder mit dem maximalen Wert  $m = j_1 + j_2 - 1$ . Für diese Kombination gibt es zwei Terme in der Entwicklung (2.102),

$$|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle = \alpha |j_1 - 1, j_2\rangle + \beta |j_1, j_2 - 1\rangle,$$

wobei wir die Clebsch-Gordan-Koeffizienten mit  $\alpha, \beta$  abgekürzt haben. Diese können aus der Orthonormalität zum oben berechneten Zustand  $|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$  und aus der Normierung von  $|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle$  eindeutig berechnet werden. Die Orthonormalität zum Zustand  $|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$  liefert mit den Clebsch-Gordan-Koeffizienten (2.115) und

(2.116)

$$\begin{aligned}
0 &= \langle j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1 | j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1 \rangle \\
&= \alpha \langle j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1 | j_1 - 1, j_2 \rangle + \beta \langle j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1 | j_1, j_2 - 1 \rangle \\
&= \alpha \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} + \beta \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}},
\end{aligned}$$

also  $-\beta \sqrt{j_2} \equiv \alpha \sqrt{j_1} \equiv \gamma \sqrt{j_1 j_2}$  und damit

$$|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle = \gamma \left( \sqrt{j_2} |j_1 - 1, j_2\rangle - \sqrt{j_1} |j_1, j_2 - 1\rangle \right).$$

Normierung wir diesen Zustand,

$$\begin{aligned}
1 &= \langle j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1 | j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1 \rangle \\
&= \gamma^2 (j_1 + j_2) \quad \Longrightarrow \quad \gamma = \sqrt{\frac{1}{j_1 + j_2}},
\end{aligned}$$

so identifizieren wir die Clebsch-Gordan-Koeffizienten

$$\alpha \equiv \langle j_1 - 1, j_2 | j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1 \rangle = \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}}, \quad (2.117)$$

$$\beta \equiv \langle j_1, j_2 - 1 | j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1 \rangle = -\sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}}. \quad (2.118)$$

Danach “hangelt” man sich wieder durch Anwenden von  $\hat{J}_-$  durch das Multipllett zu  $j = j_1 + j_2 - 1$ .

Das Verfahren läßt sich dann für die Multipletts zu kleinerem  $j$  fortführen, ist aber zugegebenerweise recht mühsam. Entweder man entwickelt einen entsprechenden numerischen Algorithmus aus der oben erläuterten Vorschrift oder man schlägt in einschlägigen Tabellenwerken nach.

## 2.4 Die Gruppe $SU(3)$

Aufgrund der besonderen Bedeutung der Gruppe  $SU(3)$ , d.h. der speziellen unitären Symmetrien in drei Dimensionen, für die Theorie der Starken Wechselwirkung, eine der fundamentalen Naturkräfte, behandeln wir diese Gruppe in diesem Abschnitt gesondert und mit größerer Ausführlichkeit.

### 2.4.1 Generatoren

Wir hatten die Gruppe  $SU(N)$  der speziellen unitären Transformationen in  $N$  Dimensionen schon in den Übungsaufgaben 6.3 und 7.2 kennengelernt. Die Gruppe  $SU(N)$  besitzt  $N^2 - 1$  Generatoren.

**Beispiel:** Die Gruppe  $SU(2)$  besitzt  $N^2 - 1 = 3$  Generatoren. Es handelt sich um die Komponenten  $\hat{S}^a$  des **Spin-Operators**. In der **fundamentalen Darstellung** lauten diese

$$\hat{S}^a = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_a, \quad a = 1, 2, 3, \quad (2.119)$$

mit den **Pauli-Matrizen** (1.66). Offenbar sind die Generatoren in der fundamentalen Darstellung  **$(2 \times 2)$ -Matrizen**, d.h. sie wirken auf Objekte (Hilbertraum-Zustände), welche **zweidimensional** sind.

Wir konstruieren nun die  $N^2 - 1 = 8$  Generatoren der  $SU(3)$  in der **fundamentalen Darstellung**, d.h. in der Darstellung, in der sie  **$(3 \times 3)$ -Matrizen** sind, also auf **drei-dimensionale** Zustandsvektoren wirken. Dabei nehmen wir uns die Pauli-Matrizen zum Vorbild und verallgemeinern sie auf drei Dimensionen. Zunächst schreiben wir in Analogie zur  $SU(2)$ , vgl. Gl. (2.119), für die Generatoren der  $SU(3)$

$$\hat{T}_a \equiv \frac{\hbar}{2} \hat{\lambda}_a, \quad a = 1, \dots, 8. \quad (2.120)$$

Man beachte, dass sowohl  $\hat{T}_a$  wie auch  $\hat{\lambda}_a$  **hermitesch** sein müssen,

$$\hat{T}_a = \hat{T}_a^\dagger, \quad \hat{\lambda}_a = \hat{\lambda}_a^\dagger, \quad (2.121)$$

da es sich bei  $SU(3)$  um eine **unitäre** Lie-Gruppe handelt. Die  $(3 \times 3)$ -Matrizen  $\hat{\lambda}_a$  für die  $SU(3)$  entsprechen den Pauli-Matrizen  $\hat{\sigma}_a$  für die  $SU(2)$ . Die ersten drei  $\hat{\lambda}_a$  sind einfach die triviale Erweiterung der Pauli-Matrizen auf drei Dimensionen,

$$\hat{\lambda}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\lambda}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\lambda}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.122)$$

Aufgrund der Hermitezität der Pauli-Matrizen ist die Hermitezität der  $\hat{\lambda}_a$  damit garantiert.

Für die nächsten vier  $\hat{\lambda}_a$  nehmen wir uns die Struktur der ersten beiden Pauli-Matrizen zum Vorbild und verschieben die nichttrivialen Elemente jeweils um eine Zeile bzw. eine Spalte,

$$\hat{\lambda}_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\lambda}_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\lambda}_6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\lambda}_7 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.123)$$

Auch diese Matrizen sind offenbar hermitesch.

Für den letzten Generator benötigen wir eine Matrix, die ein nichtverschwindendes  $(33)$ -Element hat, weil man ansonsten mit den Generatoren keine beliebigen  $SU(3)$ -Matrizen konstruieren könnte, also insbesondere solche, die nichtverschwindende  $(33)$ -Elemente besitzen. Wir machen den Ansatz

$$\hat{\lambda}_8 = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & \beta \end{pmatrix}, \quad (2.124)$$

## 2 Symmetrien

mit **reellen** Konstanten  $\alpha, \beta$ , weil  $\hat{\lambda}_8$  hermitesch sein muss. Elemente der Gruppe  $SU(N)$  zeichnen sich dadurch aus, dass ihre Determinante den Wert  $+1$  annimmt, also

$$0 = \ln \det \hat{U} = \text{Tr} \ln \hat{U} = -\frac{i}{\hbar} \alpha_a \text{Tr} \hat{T}_a, \quad (2.125)$$

d.h. die Generatoren der  $SU(N)$  sind **spurfrei**. Damit dies auch für  $\hat{T}_8 = \frac{\hbar}{2} \hat{\lambda}_8$  gilt, muss in unserem Ansatz (2.124)  $\beta = -2\alpha$  sein. Die Konstante  $\alpha$  bestimmen wir aus der **Orthogonalität** (2.69) der Generatoren,

$$\text{Tr} \left( \hat{T}_a \hat{T}_b \right) = \frac{\hbar^2}{2} \delta_{ab}, \quad (2.126)$$

bzw. für die  $\hat{\lambda}_a$

$$\text{Tr} \left( \hat{\lambda}_a \hat{\lambda}_b \right) = 2 \delta_{ab}. \quad (2.127)$$

Man prüft leicht nach, dass diese Relation für  $a = 8$  und  $b = 1, \dots, 7$  mit unserem Ansatz (2.124) erfüllt ist. Die Konstante  $\alpha$  bestimmen wir aus dieser Relation für  $a = b = 8$ ,

$$\text{Tr} \left( \hat{\lambda}_8 \hat{\lambda}_8 \right) = \text{Tr} \begin{pmatrix} \alpha^2 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha^2 & 0 \\ 0 & 0 & 4\alpha^2 \end{pmatrix} = 6\alpha^2 \equiv 2 \quad \implies \quad \alpha = \frac{1}{\sqrt{3}}.$$

Das endgültige Resultat für  $\hat{\lambda}_8$  lautet also

$$\hat{\lambda}_8 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}. \quad (2.128)$$

Die auf diese Weise, d.h. durch die Glgen. (2.122), (2.123) und (2.128) festgelegten Matrizen heißen **Gell-Mann-Matrizen** (nach ihrem Urheber Murray Gell-Mann). Aufgrund ihrer Orthogonalität sind sie linear unabhängig und bilden somit eine Basis im Raum der spurfreien hermiteschen  $(3 \times 3)$ -Matrizen.

### 2.4.2 Strukturkonstanten

Die **Lie-Algebra** der  $SU(3)$  ist

$$[\hat{T}_a, \hat{T}_b] = i\hbar f_{abc} \hat{T}_c, \quad (2.129)$$

bzw. für die Gell-Mann-Matrizen,

$$[\hat{\lambda}_a, \hat{\lambda}_b] = 2i f_{abc} \hat{\lambda}_c. \quad (2.130)$$

Aus der expliziten Form der Gell-Mann-Matrizen bestimmt man nun die Strukturkonstanten über die Relation (2.70), die für die Gell-Mann-Matrizen lautet

$$f_{abc} = \frac{2}{i\hbar^3} \text{Tr} \left\{ [\hat{T}_a, \hat{T}_b] \hat{T}_c \right\} \equiv \frac{1}{4i} \text{Tr} \left\{ [\hat{\lambda}_a, \hat{\lambda}_b] \hat{\lambda}_c \right\}. \quad (2.131)$$

Per Definition sind die Strukturkonstanten dann **vollständig antisymmetrisch**. Sie lauten explizit:

$abc$	123	147	156	246	257	345	367	458	678
$f_{abc}$	1	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$

Für alle anderen Kombinationen der Indizes  $abc$  verschwinden die Strukturkonstanten.

Die Generatoren der  $SU(3)$  (oder allgemein der  $SU(N)$ ) erfüllen auch **Antivertauschungsrelationen**,

$$\{\hat{T}_a, \hat{T}_b\} = \frac{\hbar^2}{3} \delta_{ab} \mathbb{1}_3 + \hbar d_{abc} \hat{T}_c, \quad (2.132)$$

bzw. für die Gell-Mann-Matrizen

$$\{\hat{\lambda}_a, \hat{\lambda}_b\} = \frac{4}{3} \delta_{ab} \mathbb{1}_3 + 2 d_{abc} \hat{\lambda}_c. \quad (2.133)$$

Die **vollständig symmetrischen** Strukturkonstanten  $d_{abc}$  bestimmt man beispielsweise aus der in Übungsaufgabe 6.3.4 angegebenen Relation

$$d_{abc} = \frac{2}{\hbar^3} \text{Tr} \left( \{\hat{T}_a, \hat{T}_b\} \hat{T}_c \right) \equiv \frac{1}{4} \text{Tr} \left( \{\hat{\lambda}_a, \hat{\lambda}_b\} \hat{\lambda}_c \right). \quad (2.134)$$

Die nichtverschwindenden symmetrischen Strukturkonstanten lauten explizit:

$abc$	118	146	157	228	247	256	338	344	355	366	377
$d_{abc}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$

$abc$	448	558	668	778	888
$d_{abc}$	$-\frac{1}{2\sqrt{3}}$	$-\frac{1}{2\sqrt{3}}$	$-\frac{1}{2\sqrt{3}}$	$-\frac{1}{2\sqrt{3}}$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$

### 2.4.3 Unteralgebren und Untergruppen

Die Algebra der  $SU(3)$  besitzt **Unteralgebren**, die **Untergruppen** der  $SU(3)$  erzeugen:

(i) Offensichtlich erzeugt der Satz

$$\{\hat{T}_1, \hat{T}_2, \hat{T}_3\},$$

aufgrund der Tatsache, dass  $f_{123} = 1 \equiv \epsilon_{123}$  ist, eine  **$SU(2)$ -Unteralgebra**,

$$[\hat{T}_a, \hat{T}_b] = i\hbar f_{abc} \hat{T}_c \equiv i\hbar \epsilon_{abc} \hat{T}_c, \quad a, b, c = 1, 2, 3.$$

Diese Unter algebra erzeugt eine  **$SU(2)$ -Untergruppe** der  $SU(3)$ ,

$$SU(2) \subset SU(3).$$

(ii) Eine zweite Unteralgebra wird durch

$$\{\hat{T}_2, \hat{T}_5, \hat{T}_7\}$$

gebildet. Betrachten wir die explizite Form dieser Generatoren,

$$\begin{aligned}\hat{T}_2 &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (-i\hbar) \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \implies (\hat{T}_2)_{ij} = \frac{1}{2} (-i\hbar \epsilon_{3ij}), \\ \hat{T}_5 &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} (-i\hbar) \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \implies (\hat{T}_5)_{ij} = -\frac{1}{2} (-i\hbar \epsilon_{2ij}), \\ \hat{T}_7 &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (-i\hbar) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \implies (\hat{T}_7)_{ij} = \frac{1}{2} (-i\hbar \epsilon_{1ij}),\end{aligned}$$

so wird klar, dass es sich hierbei, bis auf einen Faktor  $1/2$  bei  $\hat{T}_2$  und  $\hat{T}_7$ , bzw.  $-1/2$  bei  $\hat{T}_5$  um die **Generatoren der  $SO(3)$  in der adjungierten Darstellung** handelt! Definieren wir

$$\hat{J}_3 \equiv 2\hat{T}_2, \quad \hat{J}_2 \equiv -2\hat{T}_5, \quad \hat{J}_1 \equiv 2\hat{T}_7, \quad (2.135)$$

so erhalten wir aus der Vertauschungsrelation

$$[\hat{T}_a, \hat{T}_b] = i\hbar f_{abc} \hat{T}_c, \quad a, b, c = 2, 5, 7,$$

mit dem Wert für die Strukturkonstante  $f_{257} = 1/2$  die folgende Vertauschungsrelation für die durch Gl. (2.135) definierten Generatoren  $\hat{J}_i$  der  $SO(3)$ ,

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{J}_k, \quad i, j, k = 1, 2, 3.$$

Wir haben also eine  **$SO(3)$ -Unteralgebra** der  $SU(3)$  identifiziert,

$$SO(3) \subset SU(3).$$

(iii) Die **Cartan-Unteralgebra** besteht aus

$$\{\hat{T}_3, \hat{T}_8\},$$

da  $[\hat{T}_3, \hat{T}_8] = 0$ . Daraus folgt, dass  $SU(3)$  vom **Rang 2** ist. Die einzigen beiden **Casimir-Operatoren** sind, wie in Übungsaufgabe 6.3.6 gezeigt,

$$\hat{C}_1 = f_{abc} \hat{T}_a \hat{T}_b \hat{T}_c, \quad \hat{C}_2 = d_{abc} \hat{T}_a \hat{T}_b \hat{T}_c. \quad (2.136)$$

### 2.4.4 Multipletts

Multipletts werden durch die Eigenwerte  $C_1, C_2$  der beiden Casimir-Operatoren (2.136) der  $SU(3)$  festgelegt. Die Frage ist, wieviele Zustände zu jedem Multiplett gehören und wie man sie voneinander unterscheidet. Dazu müssen wir weitere Quantenzahlen festlegen, die zu Operatoren gehören, die mit den Casimir-Operatoren (aber nicht mit den Generatoren) der  $SU(3)$  vertauschen.

Um dies für die  $SU(3)$  zu beantworten, gehen wir zunächst einen Schritt zurück und betrachten die Gruppe  $SU(2)$ . Der einzige Casimir-Operator war dort  $\hat{C}_1 = \hat{J}^2$  und die Multipletts werden durch die Eigenwerte von  $\hat{J}^2$ , also  $\hbar^2 j(j+1)$ , bzw. einfach durch  $j$  festgelegt. Ferner vertauscht  $\hat{J}^2$  mit  $\hat{J}_z$ , welcher die Eigenwerte  $\hbar m$  besitzt. Also kann man die Zustände eines Multipletts eindeutig durch die Angabe von  $j$  und  $m$  festlegen,  $|j m\rangle$ . Für gegebenes  $j$  gibt es  $2j+1$  Zustände, die sich durch den Wert von  $m$  unterscheiden,  $m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$ .

Offenbar ist  $\hat{J}_z$  der Generator der **Cartan-Unteralgebra** von  $SU(2)$ . Es liegt also nahe, für  $SU(3)$  ebenfalls die Cartan-Unteralgebra, bestehend aus den beiden Generatoren  $\hat{T}_3$  und  $\hat{T}_8$ , zur Unterscheidung der Zustände eines Multipletts zu verwenden. Da  $\hat{T}_3, \hat{T}_8$  untereinander und per Definition auch mit den beiden Casimir-Operatoren  $\hat{C}_1, \hat{C}_2$  vertauschen, erhalten wir also einen Satz von vier miteinander vertauschenden Operatoren, deren Eigenwerte die Zustände eines Multipletts eindeutig festlegen,

$$|C_1, C_2, T_3, T_8\rangle. \quad (2.137)$$

Bei der  $SU(2)$  hatten wir **Stufenoperatoren**

$$\hat{J}_\pm \equiv \hat{J}_x \pm i \hat{J}_y$$

definiert, die einem erlaubten, von einem Zustand eines Multipletts zum nächsten zu kommen,

$$\hat{J}_\pm |j m\rangle \sim |j m \pm 1\rangle.$$

Dies kann man graphisch so darstellen:

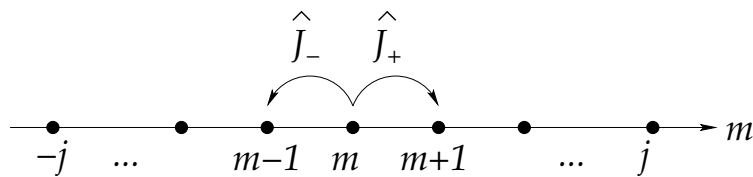


Abbildung 2.2: Wirkung der Stufenoperatoren  $\hat{J}_\pm$  auf  $SU(2)$ -Multipletts.

Etwas Analoges gibt es auch bei der  $SU(3)$ , allerdings unterscheiden sich die Zustände eines Multipletts hier durch **zwei** Quantenzahlen,  $T_3$  und  $T_8$ , und nicht durch eine,  $m$ . Wir können also nicht nur in einer Richtung Quantenzahlen erhöhen oder erniedrigen, sondern in zwei, wie es schematisch in Abb. 2.3 dargestellt ist.

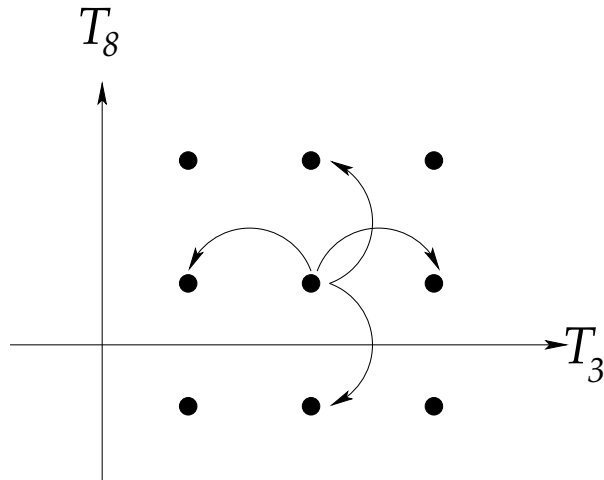


Abbildung 2.3: Schematische Wirkung von Stufenoperatoren auf  $SU(3)$ -Multipletts.

Um zu sehen, wie dies genau vor sich geht, definieren wir zunächst geeignete **Stufenoperatoren**:

$$\begin{aligned}\hat{T}_{\pm} &\equiv \hat{T}_1 \pm i\hat{T}_2, \\ \hat{V}_{\pm} &\equiv \hat{T}_4 \pm i\hat{T}_5, \\ \hat{U}_{\pm} &\equiv \hat{T}_6 \pm i\hat{T}_7.\end{aligned}\tag{2.138}$$

Außerdem definieren wir den sog. **Hyperladungoperator**

$$\hat{Y} \equiv \frac{2}{\sqrt{3}}\hat{T}_8 = \frac{\hbar}{3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}.\tag{2.139}$$

21.6.2012

Die Vertauschungsrelationen für die Stufenoperatoren lauten:

$$[\hat{T}_3, \hat{T}_{\pm}] = \pm\hbar\hat{T}_{\pm},\tag{2.140}$$

$$[\hat{T}_+, \hat{T}_-] = 2\hbar\hat{T}_3.\tag{2.141}$$

Diese Relationen sind die gleichen wie bei der Drehimpulsalgebra für  $\hat{L}^z$  und die Stufenoperatoren  $\hat{L}_{\pm}$ . Daraus folgt wiederum, dass die Operatoren  $\{\hat{T}_{\pm}, \hat{T}_3\}$  eine  $SU(2)$ -Unteralgebra definieren (was wir aber schon erwähnt hatten). Ferner gilt:

$$[\hat{T}_3, \hat{V}_{\pm}] = \pm\frac{\hbar}{2}\hat{V}_{\pm},\tag{2.142}$$

$$[\hat{T}_3, \hat{U}_{\pm}] = \mp\frac{\hbar}{2}\hat{U}_{\pm},\tag{2.143}$$

$$[\hat{V}_+, \hat{V}_-] = 2\hbar\left(\frac{1}{2}\hat{T}_3 + \frac{3}{4}\hat{Y}\right) \equiv 2\hbar\hat{V}_3,\tag{2.144}$$

$$[\hat{U}_+, \hat{U}_-] = 2\hbar\left(-\frac{1}{2}\hat{T}_3 + \frac{3}{4}\hat{Y}\right) \equiv 2\hbar\hat{U}_3,\tag{2.145}$$



wobei die jeweils rechten Seiten der letzten beiden Gleichungen die Definition der Operatoren  $\hat{V}_3$  und  $\hat{U}_3$  darstellen. Wir berechnen weiterhin:

$$[\hat{Y}, \hat{T}_\pm] = 0, \quad (2.146)$$

$$[\hat{Y}, \hat{V}_\pm] = \pm \hbar \hat{V}_\pm, \quad (2.147)$$

$$[\hat{Y}, \hat{U}_\pm] = \pm \hbar \hat{U}_\pm, \quad (2.148)$$

$$[\hat{T}_\pm, \hat{V}_\pm] = 0, \quad (2.149)$$

$$[\hat{T}_\pm, \hat{U}_\mp] = 0, \quad (2.150)$$

$$[\hat{U}_\pm, \hat{V}_\pm] = 0, \quad (2.151)$$

$$[\hat{T}_\pm, \hat{V}_\mp] = \mp \hbar \hat{U}_\mp, \quad (2.152)$$

$$[\hat{T}_\pm, \hat{U}_\pm] = \pm \hbar \hat{V}_\pm, \quad (2.153)$$

$$[\hat{U}_\pm, \hat{V}_\mp] = \pm \hbar \hat{T}_\mp, \quad (2.154)$$

$$[\hat{T}_3, \hat{Y}] = 0, \quad (2.155)$$

Den Beweis der Glgen. (2.140) – (2.155) lassen wir als Übungsaufgabe.

Mit Hilfe der Relationen (2.142), (2.143), (2.147) und (2.148) berechnen wir noch

$$[\hat{V}_3, \hat{V}_\pm] = \frac{1}{2} [\hat{T}_3, \hat{V}_\pm] + \frac{3}{4} [\hat{Y}, \hat{V}_\pm] = \pm \frac{\hbar}{4} \hat{V}_\pm \pm \frac{3}{4} \hbar \hat{V}_\pm \equiv \pm \hbar \hat{V}_\pm, \quad (2.156)$$

$$[\hat{U}_3, \hat{U}_\pm] = -\frac{1}{2} [\hat{T}_3, \hat{U}_\pm] + \frac{3}{4} [\hat{Y}, \hat{U}_\pm] = \pm \frac{\hbar}{4} \hat{U}_\pm \pm \frac{3}{4} \hbar \hat{U}_\pm \equiv \pm \hbar \hat{U}_\pm. \quad (2.157)$$

Zusammen mit den Glgen. (2.144) und (2.145) bedeuten diese Gleichungen, dass die Operatoren  $\{\hat{V}_\pm, \hat{V}_3\}$  und  $\{\hat{U}_\pm, \hat{U}_3\}$  **zwei weitere**  $SU(2)$ –Unteralgebren bilden, die aber wegen der Abhängigkeit von  $\hat{V}_3$  und  $\hat{U}_3$  von  $\hat{T}_3$  **nicht unabhängig** von der durch  $\{\hat{T}_\pm, \hat{T}_3\}$  gebildeten  $SU(2)$ –Unteralgebra sind. Es ist, wie wir bereits wissen, lediglich **eine einzige**  $SU(2)$ –Unteralgebra in  $SU(3)$  enthalten.

Wir müssen jetzt noch klären, welche Wirkung die Stufenoperatoren  $\hat{T}_\pm, \hat{V}_\pm$  und  $\hat{U}_\pm$  auf die Zustände eines Multipletts haben. Dazu betrachten wir die Eigenzustände (2.137), bzw. indem wir  $T_8$  durch  $Y \equiv \sqrt{3} T_8/2$  ersetzen, die Eigenzustände

$$|C_1, C_2, T_3, Y\rangle \equiv |T_3 Y\rangle,$$

wobei wir die Argumentliste um  $C_1, C_2$  kürzen konnten, da diese Eigenwerte sich für ein gegebenes  $SU(3)$ –Multipletts natürlich nicht ändern. Es ist per Definition

$$\begin{aligned} \hat{T}_3 |T_3 Y\rangle &= T_3 |T_3 Y\rangle, \\ \hat{Y} |T_3 Y\rangle &= Y |T_3 Y\rangle. \end{aligned}$$

Wir schließen nun, dass

(i) aufgrund von Gl. (2.142) gilt

$$\begin{aligned} [\hat{T}_3, \hat{V}_\pm] |T_3 Y\rangle &= \hat{T}_3 \hat{V}_\pm |T_3 Y\rangle - \hat{V}_\pm T_3 |T_3 Y\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} \hat{V}_\pm |T_3 Y\rangle \\ \iff \hat{T}_3 \hat{V}_\pm |T_3 Y\rangle &= \left( T_3 \pm \frac{\hbar}{2} \right) \hat{V}_\pm |T_3 Y\rangle. \end{aligned} \quad (2.158)$$

Diese Gleichung bedeutet, dass  $\hat{V}_{\pm}$  den Eigenwert  $T_3$  eines Zustands  $|T_3 Y\rangle$  um den Wert  $\hbar/2$  erhöht bzw. erniedrigt.

(ii) aufgrund von Gl. (2.143) gilt

$$\begin{aligned} [\hat{T}_3, \hat{U}_{\pm}] |T_3 Y\rangle &= \hat{T}_3 \hat{U}_{\pm} |T_3 Y\rangle - \hat{U}_{\pm} T_3 |T_3 Y\rangle = \mp \frac{\hbar}{2} \hat{U}_{\pm} |T_3 Y\rangle \\ \iff \hat{T}_3 \hat{U}_{\pm} |T_3 Y\rangle &= \left( T_3 \mp \frac{\hbar}{2} \right) \hat{U}_{\pm} |T_3 Y\rangle. \end{aligned} \quad (2.159)$$

Diese Gleichung bedeutet, dass  $\hat{U}_{\pm}$  den Eigenwert  $T_3$  eines Zustands  $|T_3 Y\rangle$  um den Wert  $\hbar/2$  erniedrigt bzw. erhöht.

(iii) aufgrund von Gl. (2.147) gilt

$$\begin{aligned} [\hat{Y}, \hat{V}_{\pm}] |T_3 Y\rangle &= \hat{T}_3 \hat{V}_{\pm} |T_3 Y\rangle - \hat{V}_{\pm} Y |T_3 Y\rangle = \pm \hbar \hat{V}_{\pm} |T_3 Y\rangle \\ \iff \hat{Y} \hat{V}_{\pm} |T_3 Y\rangle &= (Y \pm \hbar) \hat{V}_{\pm} |T_3 Y\rangle. \end{aligned} \quad (2.160)$$

Dies bedeutet wiederum, dass  $\hat{V}_{\pm}$  den Eigenwert  $Y$  eines Zustands  $|T_3 Y\rangle$  um den Wert  $\hbar$  erhöht bzw. erniedrigt.

(iv) aufgrund von Gl. (2.148) gilt

$$\begin{aligned} [\hat{Y}, \hat{U}_{\pm}] |T_3 Y\rangle &= \hat{T}_3 \hat{U}_{\pm} |T_3 Y\rangle - \hat{U}_{\pm} Y |T_3 Y\rangle = \pm \hbar \hat{U}_{\pm} |T_3 Y\rangle \\ \iff \hat{Y} \hat{U}_{\pm} |T_3 Y\rangle &= (Y \pm \hbar) \hat{U}_{\pm} |T_3 Y\rangle. \end{aligned} \quad (2.161)$$

Dies bedeutet, dass  $\hat{U}_{\pm}$  den Eigenwert  $Y$  eines Zustands  $|T_3 Y\rangle$  um den Wert  $\hbar$  erhöht bzw. erniedrigt.

(v)  $\hat{T}_{\pm}$  den Eigenwert  $T_3$  eines Zustands  $|T_3 Y\rangle$  um den Wert  $\hbar$  erhöht bzw. erniedrigt.

(vi) dass aufgrund von Gl. (2.146) gilt, dass  $\hat{T}_{\pm}$  den Eigenwert  $Y$  eines Zustands  $|T_3 Y\rangle$  unverändert läßt.

Zusammengefaßt lassen sich diese Befunde wie folgt schreiben:

- (i)  $\hat{T}_{\pm}$  erhöht/erniedrigt  $T_3$  um  $\hbar$  und läßt  $Y$  unverändert.
- (ii)  $\hat{V}_{\pm}$  erhöht/erniedrigt  $T_3$  um  $\hbar/2$  und  $Y$  um  $\hbar$ .
- (iii)  $\hat{U}_{\pm}$  erniedrigt/erhöht  $T_3$  um  $\hbar/2$  und erhöht/erniedrigt  $Y$  um  $\hbar$ .

Dies läßt sich graphisch wie in Abb. 2.4 gezeigt darstellen.

Die rote Linie ist die sog. **T-Linie**, auf der die Stufenoperatoren  $\hat{T}_{\pm}$  wirken. Diese ändern den Wert von  $T_3$  um  $\pm\hbar$  und lassen den Wert von  $Y$  unverändert. Die blaue Linie ist die sog. **V-Linie**, auf der die Stufenoperatoren  $\hat{V}_{\pm}$  wirken. Sie ändern  $T_3$  um  $\pm\hbar/2$  und gleichzeitig  $Y$  um  $\pm\hbar$ . Schließlich ist die grüne Linie die sog. **U-Linie**, auf der die Stufenoperatoren  $\hat{U}_{\pm}$  wirken. Diese ändern den Wert von  $T_3$  um  $\mp\hbar/2$  und gleichzeitig  $Y$  um  $\pm\hbar$ . Die Wirkung der Stufenoperatoren hat zur Folge, dass die Zustände

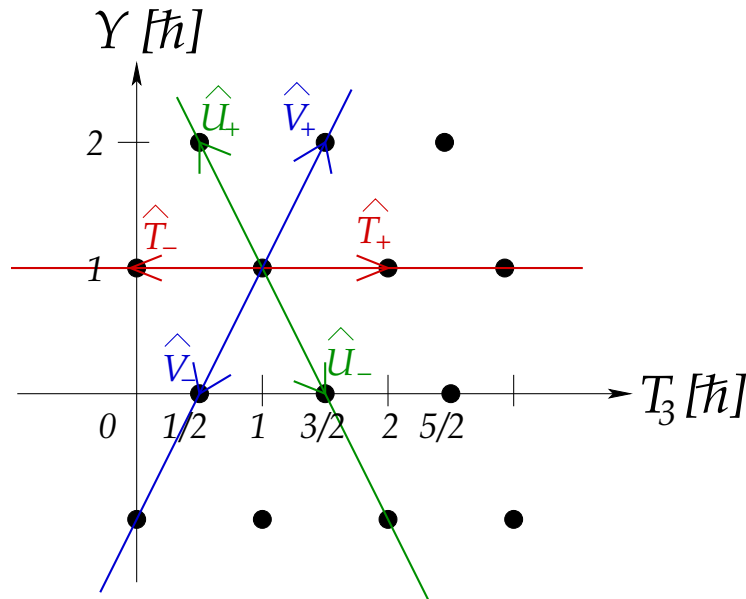


Abbildung 2.4: Wirkung der Stufenoperatoren  $\hat{T}_\pm$ ,  $\hat{V}_\pm$  und  $\hat{U}_\pm$  auf Zustände eines  $SU(3)$ -Multipletts.

eines  $SU(3)$ -Multipletts nicht wie in Abb. 2.3 gezeigt ein reguläres Gitter in der  $(T_3 - Y)$ -Ebene bilden, sondern eines, wo wie in Abb. 2.4 gezeigt Zustände von  $T_3$ -Ebenen, die sich im Wert von  $Y$  um  $\hbar$  unterscheiden, jeweils um  $\hbar/2$  gegeneinander versetzt sind.

Diese Information genügt, um die **Form von  $SU(3)$ -Multipletts** in der  $(T_3 - Y)$ -Ebene festzulegen. Dazu erinnern wir uns zunächst daran, dass

- (i)  $\{\hat{T}_+, \hat{T}_-, \hat{T}_3\}$  eine  $SU(2)$ -Unteralgebra der  $SU(3)$  bilden, die Zustände von  $SU(2)$ -Multipletts (als Teil von  $SU(3)$ -Multipletts) untereinander transformiert. Bildlich gesprochen liegen diese  $SU(2)$ -Multipletts auf den (roten)  $T$ -Linien in Abb. 2.4 und die Stufenoperatoren  $\hat{T}_\pm$  führen von einem Zustand auf einer  $T$ -Linie zum nächsten. Während der Wert von  $Y$  bei diesen  $SU(2)$ -Multipletts immer konstant bleibt, variiert der Wert von  $T_3$  zwischen  $-T_3^{\max}$  und  $+T_3^{\max}$ . Dies bedeutet wiederum, dass diese  $SU(2)$ -Multipletts **spiegelsymmetrisch** zur  $Y$ -Achse (also zur Linie  $T_3 = 0$ ) liegen müssen.
- (ii)  $\{\hat{V}_+, \hat{V}_-, \hat{V}_3\}$  ebenfalls eine  $SU(2)$ -Unteralgebra der  $SU(3)$  bilden, die Zustände von  $SU(2)$ -Multipletts (als Teil von  $SU(3)$ -Multipletts) untereinander transformiert. Diese  $SU(2)$ -Multipletts liegen aber nun auf den (blauen)  $V$ -Linien in Abb. 2.4 und bei der Transformation von Zuständen mit Hilfe der Stufenoperatoren  $\hat{V}_\pm$  variiert der Wert von  $V_3$  zwischen  $-V_3^{\max}$  und  $+V_3^{\max}$ . Dies wiederum bedeutet, dass diese  $SU(2)$ -Multipletts **genauso viele Zustände links wie rechts** der Linie  $V_3 = 0$  oder, wenn wir die Definition (2.144) von  $\hat{V}_3$  benutzen, der Geraden  $Y = -\frac{2}{3}T_3$  haben müssen.
- (iii)  $\{\hat{U}_+, \hat{U}_-, \hat{U}_3\}$  ebenfalls eine  $SU(2)$ -Unteralgebra der  $SU(3)$  bilden, die Zustände

## 2 Symmetrien

von  $SU(2)$ -Multipletts (als Teil von  $SU(3)$ -Multipletts) untereinander transformiert. Diese  $SU(2)$ -Multipletts liegen nun auf den (grünen)  $U$ -Linien in Abb. 2.4 und bei der Transformation von Zuständen mit Hilfe der Stufenoperatoren  $\hat{U}_{\pm}$  variiert der Wert von  $U_3$  zwischen  $-U_3^{\max}$  und  $+U_3^{\max}$ . Dies wiederum bedeutet, dass diese  $SU(2)$ -Multipletts **genauso viele Zustände links wie rechts** der Linie  $U_3 = 0$  oder, wenn wir die Definition (2.145) von  $\hat{V}_3$  benutzen, der Geraden  $Y = \frac{2}{3}T_3$  haben müssen.

Die so identifizierten Symmetrieachsen sind in Abb. 2.5 dargestellt.

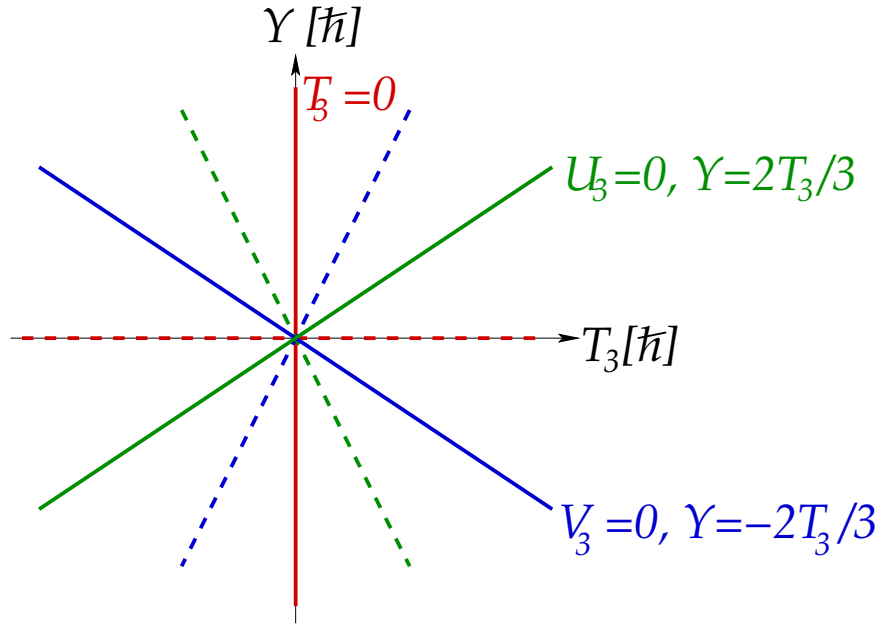


Abbildung 2.5: Symmetrieachsen der  $SU(3)$ -Multipletts in der  $(T_3 - Y)$ -Ebene (durchgezogene Linien), sowie  $T$ -,  $V$ - und  $U$ -Linien (gestrichelt).

Die dreizählige Symmetrie läßt nur noch **drei mögliche geometrische Formen** für  $SU(3)$ -Multipletts in der  $(T_3 - Y)$ -Ebene zu:

- (a) einen einzelnen Zustand, das sog. **Singlett** im **Ursprung** der  $(T_3 - Y)$ -Ebene, also für  $T_3 = Y = 0$ ,
- (b) **Dreiecke** mit Mittelpunkt im Ursprung der  $(T_3 - Y)$ -Ebene,
- (c) **Sechsecke** mit Mittelpunkt im Ursprung der  $(T_3 - Y)$ -Ebene.

Die einfachsten Multipletts, die den Kriterien (a) und (b) genügen, also (mit Ausnahme des Singletts) Dreiecke in der  $(T_3 - Y)$ -Ebene bilden, sind in den Abbildungen 2.6 (a–g) dargestellt.

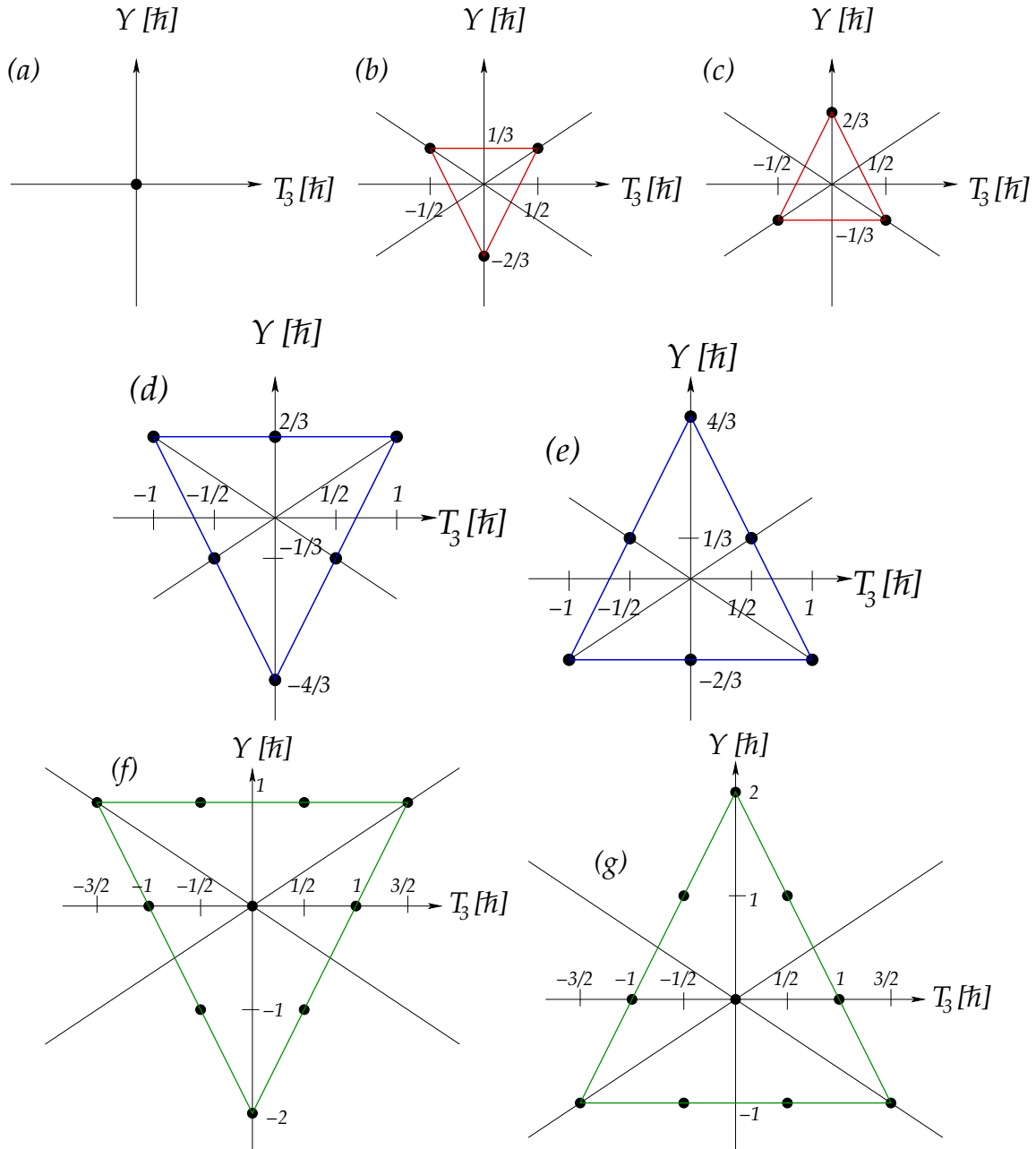


Abbildung 2.6: (a) Singlett  $[1]$ , (b) Triplet  $[3]$ , (c) Anti-Triplet  $[\bar{3}]$ , (d) Sextett  $[6]$ , (e) Anti-Sextett  $[\bar{6}]$ , (f) Dekuplett  $[10]$  und (g) Anti-Dekuplett  $[\bar{10}]$ .

**Bemerkungen:**

- (i) Die Zahl der Zustände eines jeweiligen Multipletts (Anti-Multipletts) ergibt sich daraus, dass man beginnend von der rechten oberen (linken unteren) Ecke mit den Stufenoperatoren  $\hat{T}_-$  ( $\hat{T}_+$ ) bzw.  $\hat{V}_-$  ( $\hat{V}_+$ ) zum jeweils benachbarten Zustand voranschreitet. Von dort kann man mit  $\hat{T}_-$  ( $\hat{T}_+$ ),  $\hat{V}_-$  ( $\hat{V}_+$ ) oder  $\hat{U}_+$  ( $\hat{U}_-$ ) zum nächstmöglichen Zustand innerhalb des vorgegebenen Dreiecks weiterkommen. Das Dreieck darf zwar

nicht verlassen werden, aber man kann so auch Zustände im Inneren des Dreiecks erreichen. Letztlich definiert diese Vorschrift ein Gitter von Zuständen auf den Seiten und innerhalb des Dreiecks. Zählt man die Zustände ab, so erhält man die Gesamtzahl der Zustände im jeweiligen Multipllett.

- (ii) Das **Triplet** [3] enthält jeweils ein  $T$ -Singlett und ein  $T$ -Dublett, oder ein  $V$ -Singlett und ein  $V$ -Dublett, oder ein  $U$ -Singlett und ein  $U$ -Dublett. Entsprechendes gilt für das zum Triplet **adjungierte** Multipllett, das sog. **Anti-Triplet**  $[\bar{3}]$ .
- (iii) Das **Sextett** [6] enthält jeweils ein  $T$ -Singlett, ein  $T$ -Dublett und ein  $T$ -Triplet, oder ein  $V$ -Singlett, ein  $V$ -Dublett und ein  $V$ -Triplet, oder ein  $U$ -Singlett, ein  $U$ -Dublett und ein  $U$ -Triplet. Entsprechendes gilt für das **Anti-Sextett**  $[\bar{6}]$ .
- (iv) Das **Dekuplett** [10] enthält jeweils ein  $T$ -Singlett, ein  $T$ -Dublett, ein  $T$ -Triplet und ein  $T$ -Quadruplett, oder ein  $V$ -Singlett, ein  $V$ -Dublett, ein  $V$ -Triplet und ein  $V$ -Quadruplett, oder ein  $U$ -Singlett, ein  $U$ -Dublett, ein  $U$ -Triplet und ein  $U$ -Quadruplett. Entsprechendes gilt für das **Anti-Dekuplett**  $[\bar{10}]$ .
- (v) Das Triplet [3] mit drei möglichen Zuständen entspricht der **fundamentalen Darstellung** der  $SU(3)$ . Wir werden im nächsten Abschnitt sehen, dass wir das Singlett, das Anti-Triplet, sowie **alle höheren** Multipletts aus der Kopplung von Triplets (ähnlich der in Abschnitt 2.3 besprochenen Addition von Drehimpulsen für die Gruppe  $SU(2)$ ) durch **Ausreduzieren** konstruieren können.

Das einfachste Multipllett, das dem Kriterium (c) genügt ist das in Abb. 2.7 dargestellte **Oktett** [8]. Es handelt sich hierbei um die **adjungierte Darstellung** der  $SU(3)$ .

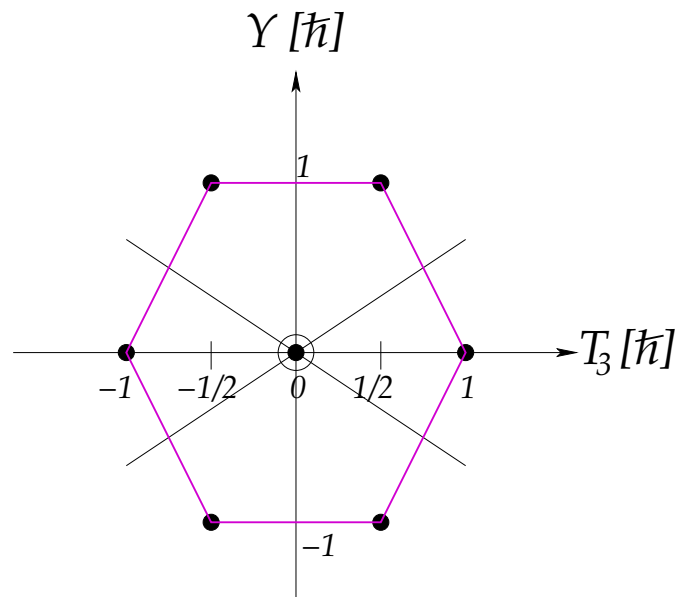


Abbildung 2.7: Oktett [8].

**Bemerkungen:**

- (i) Das **Anti-Oktett**  $[\bar{8}]$  hat die **gleiche** Form wie das Oktett. Man sagt,  $[\bar{8}]$  und  $[8]$  sind **selbstadjungiert**.
- (ii) Aus Abb. 2.7 ist ersichtlich, dass das Oktett jeweils zwei  $T$ -Dubletts und ein  $T$ -Triplet, oder zwei  $V$ -Dubletts und ein  $V$ -Triplet, oder zwei  $U$ -Dubletts und ein  $U$ -Triplet enthält.
- (iii) Dies ergibt jedoch nur eine Zahl von **sieben** Zuständen. Warum spricht man dann vom "Oktett", also einem Multipllett mit **acht** Zuständen? Der Grund ist, dass der Ursprung des Koordinatensystems **doppelt** mit zwei **unterschiedlichen** Zuständen belegt ist, nämlich mit einem Zustand der jeweiligen Triplets und einem **zusätzlichen** Singlett. Dies ist in Abb. 2.7 durch den zusätzlichen Kreis um den Ursprung gekennzeichnet.

Was ist der Grund für diese **Doppelbelegung**? Man kann zum Ursprung, ausgehend vom Zustand  $|T_3 = 1, Y = 0\rangle$ , auf drei unterschiedlichen Wegen gelangen:

$$\begin{aligned} |00\rangle_{\text{I}} &\sim \hat{T}_- |10\rangle, \\ |00\rangle_{\text{II}} &\sim \hat{V}_- \hat{U}_+ |10\rangle \sim \hat{V}_- \left| \frac{1}{2}, 1 \right\rangle, \\ |00\rangle_{\text{III}} &\sim \hat{U}_+ \hat{V}_- |10\rangle \sim \hat{U}_+ \left| \frac{1}{2}, -1 \right\rangle. \end{aligned}$$

Diese unterschiedlichen Wege sind in Abb. 2.8 graphisch dargestellt.

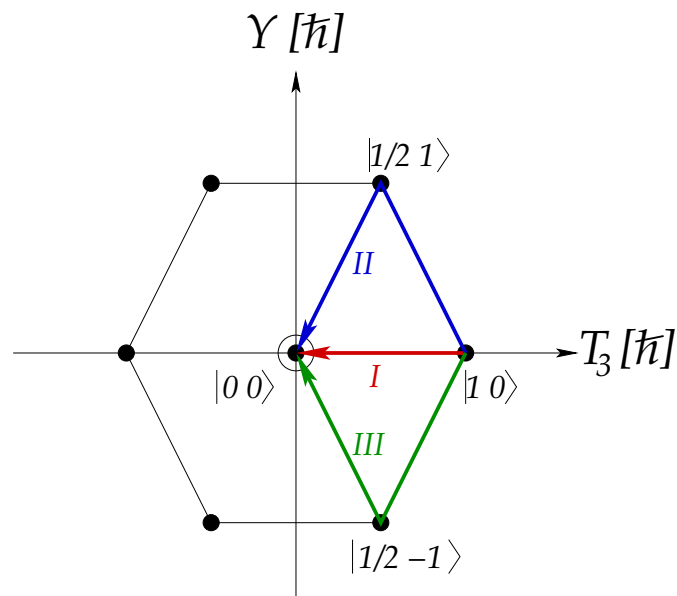


Abbildung 2.8: Die drei unterschiedlichen Wege, ausgehend von  $|10\rangle$  den Ursprung  $|00\rangle$  zu erreichen.

## 2 Symmetrien

Weil aber aufgrund von Gl. (2.154)  $\hat{U}_+ \hat{V}_- = \hat{V}_- \hat{U}_+ + \hbar \hat{T}_-$ , ist der Weg III nicht linear unabhängig von Weg I und Weg II,

$$|00\rangle_{\text{III}} \sim \hat{U}_+ \hat{V}_- |10\rangle = \hat{V}_- \hat{U}_+ |10\rangle + \hbar \hat{T}_- |10\rangle = \alpha |00\rangle_{\text{II}} + \beta |00\rangle_{\text{I}}.$$

Es gibt also beim Oktett **zwei linear unabhängige Zustände**,  $|00\rangle_{\text{I}}$  und  $|00\rangle_{\text{II}}$ , die am Koordinatenursprung angesiedelt sind.

Die Regel der Mehrfachbelegung oder **Entartung** von Zuständen mit den gleichen Quantenzahlen  $T_3$  und  $Y$  kann für beliebige Multipletts verallgemeinert werden. Generell gilt, dass die Entartung von Zuständen jeder **inneren** Schale um eins größer ist als die der Zustände der nächstäußeren Schale. Die Entartung der äußersten Schale ist immer gleich eins. Ein Beispiel ist in Abb. 2.9 gezeigt.

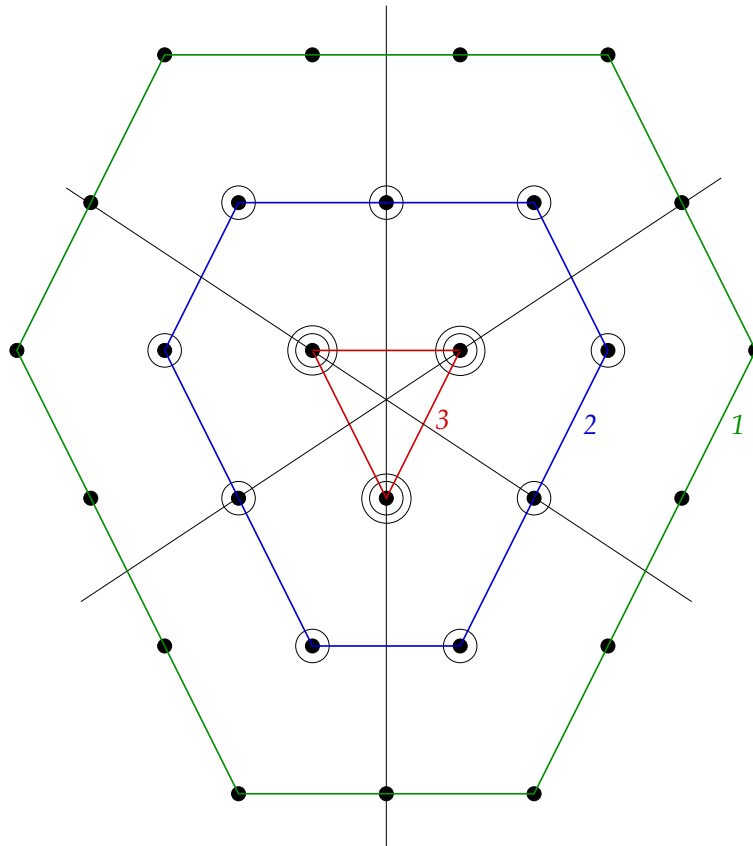


Abbildung 2.9: Die Entartung der Zustände auf inneren Schalen nimmt ausgehend von der äußersten jeweils um eins zu.

Diese Regel gilt, solange eine Schale nicht aus einem Dreieck besteht. Innerhalb eines Dreiecks erhöht sich die Entartung nicht mehr, sondern bleibt konstant. Der Grund ist, dass es jetzt nur noch **einen** linear unabhängigen Weg gibt, einen Punkt im Inneren des Dreiecks zu erreichen. Um uns dies klarzumachen, betrachten wir das Dekuplett, Abb. 2.10.



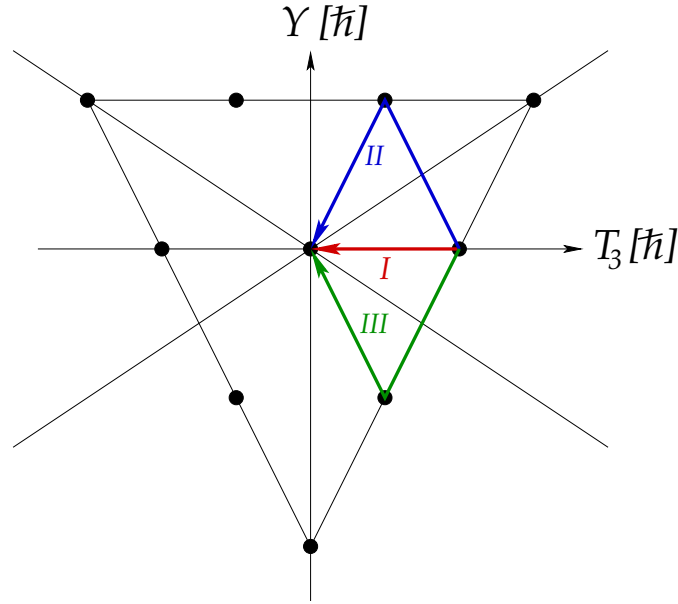


Abbildung 2.10: Die drei Wege, ausgehend vom Zustand  $|10\rangle$  den Ursprung  $|00\rangle$  zu erreichen.

Man würde zunächst glauben, dass es wie beim Oktett drei unterschiedliche Wege gibt, ausgehend vom Zustand  $|10\rangle$  den Ursprung  $|00\rangle$  zu erreichen. Aus den gleichen Gründen wie beim Oktett sollten davon wenigstens zwei **linear unabhängig** sein, z.B.

$$|00\rangle_I \sim \hat{T}_- |10\rangle \quad \text{und} \quad |00\rangle_{II} \sim \hat{V}_- \hat{U}_+ |10\rangle,$$

so dass der Ursprung wieder **doppelt** besetzt ist. Es gilt jedoch

$$|10\rangle \sim \hat{V}_- \left| \frac{3}{2} 1 \right\rangle$$

und damit

$$\begin{aligned} |00\rangle_{II} &\sim \hat{V}_- \hat{U}_+ \hat{V}_- \left| \frac{3}{2} 1 \right\rangle = \hat{V}_- \left( \hat{V}_- \hat{U}_+ + \hbar \hat{T}_- \right) \left| \frac{3}{2} 1 \right\rangle \\ &= (\hat{V}_-)^2 \hat{U}_+ \left| \frac{3}{2} 1 \right\rangle + \hbar \hat{V}_- \hat{T}_- \left| \frac{3}{2} 1 \right\rangle \equiv \hbar \hat{V}_- \hat{T}_- \left| \frac{3}{2} 1 \right\rangle \\ &= \hbar \hat{T}_- \hat{V}_- \left| \frac{3}{2} 1 \right\rangle = \hat{T}_- (\hbar \hat{V}_- \left| \frac{3}{2} 1 \right\rangle) \\ &\sim \hat{T}_- |10\rangle \sim |00\rangle_I. \end{aligned} \tag{2.162}$$

Hier haben wir von den Glgen. (2.149) und (2.154) Gebrauch gemacht, sowie ausgenutzt, dass der Zustand  $\left| \frac{3}{2} 1 \right\rangle$  schon der Zustand mit der maximalen Hyperladung  $Y = 1$  im Multiplett ist, also  $\hat{U}_+ \left| \frac{3}{2} 1 \right\rangle \equiv 0$  ist, weil diese Operation aus dem Multiplett hinausführen würde, was nicht der Fall sein darf. Mit Gl. (2.162) haben wir also gezeigt, dass  $|00\rangle_{II} \sim |00\rangle_I$ , also diese beiden Zustände **nicht linear unabhängig** voneinander sind, mithin also **nicht unterschiedlich**. Eine andere Möglichkeit, dies einzusehen, ist, von  $\left| \frac{3}{2} 1 \right\rangle$  ausgehend einmal  $\hat{T}_- \hat{V}_-$  und einmal  $\hat{V}_- \hat{T}_-$  anzuwenden, um nach  $|00\rangle$  zu kommen. Aufgrund von Gl. (2.149) ist dies aber das gleiche, mithin nicht linear unabhängig.

26.6.2012

### 2.4.5 Konstruktion der Multipletts durch Kopplung von fundamentalen Darstellungen (Ausreduzierung)

Wir hatten in Abschnitt 2.3 gesehen, dass wir bei der Addition bzw. **Kopplung** von zwei Drehimpulsen bzw. Spins den Produktraum nach **Multipletts** zum **Gesamtdrehimpuls** bzw. **-spin** zerlegen können. Diesen Prozeß nennt man **Ausreduzierung**.

Dies legt die Vermutung nahe, dass es möglich sein sollte, durch Kopplung des **kleinsten nicht-trivialen** Drehimpulses bzw. Spins **alle höheren Multipletts** zu erzeugen. Dies ist in der Tat der Fall: durch Kopplung der **fundamentalen Darstellung** der  $SU(2)$ , dem **Dublett**, lassen sich alle höheren Drehimpuls- bzw. Spin-Multipletts erzeugen. Wir zeigen dies exemplarisch an zwei Beispielen:

$$(i) \quad j_1 = \frac{1}{2} \quad \text{mit} \quad j_2 = \frac{1}{2} \quad \Longrightarrow \quad j = 0 \quad \text{und} \quad j = 1 \quad (2.163)$$

$$\quad \quad \quad \uparrow \quad \otimes \quad \uparrow \quad \Longrightarrow \quad \uparrow \downarrow \quad \text{und} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ \uparrow \end{array} .$$

Für diese Relation schreiben wir mit der Notation “Dublett = [2]”, “Singlett = [1]” und “Triplet = [3]” kurz

$$[2] \otimes [2] = [1] \oplus [3] . \quad (2.164)$$

Diesen Prozeß kann man fortführen, indem man nun das Dublett an ein Triplet koppelt:

$$(ii) \quad j_1 = \frac{1}{2} \quad \text{mit} \quad j_2 = 1 \quad \Longrightarrow \quad j = \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad j = \frac{3}{2} \quad (2.165)$$

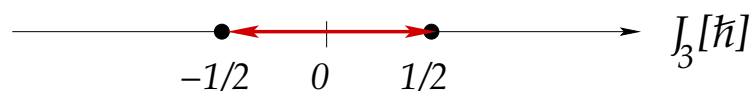
$$\quad \quad \quad \uparrow \quad \otimes \quad \uparrow \quad \Longrightarrow \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ \downarrow \end{array} \quad \text{und} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ \uparrow \\ \uparrow \end{array} .$$

Für diese Relation schreiben wir mit der Notation “Quadruplett = [4]”

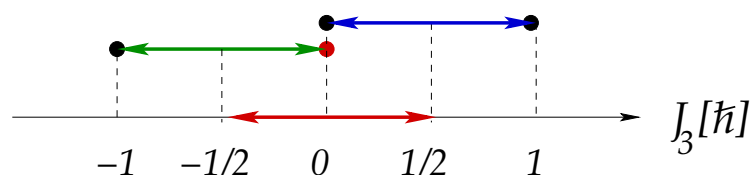
$$[2] \otimes [3] = [2] \oplus [4] . \quad (2.166)$$

Durch Kopplung von Dublett oder Triplet an Quadruplett, kann man diesen Prozeß fortführen und so alle höheren Multipletts generieren.

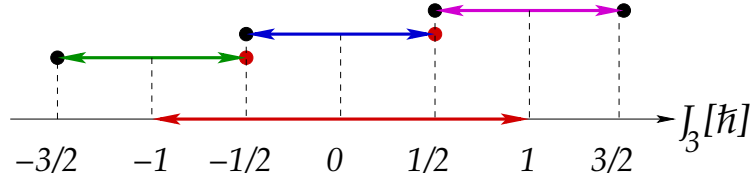
Es gibt nun eine **graphische Methode**, diese Ausreduzierung durchzuführen. Dazu zeichnen wir das Dublett auf die  $J_3$ -Achse:



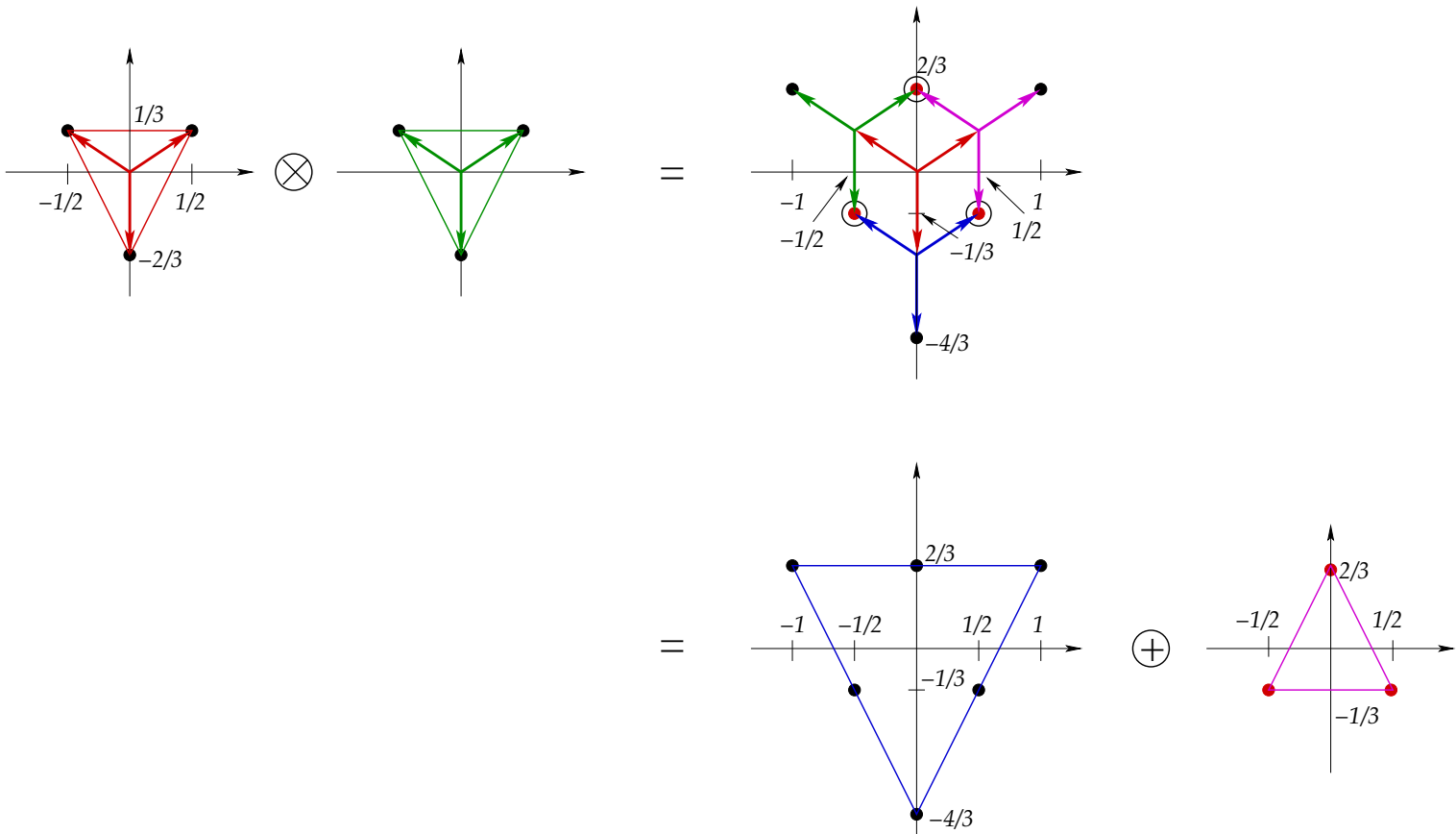
Nun legt man das zweite Dublett mit seinem **Schwerpunkt** ( $J_3 = 0$ ) jeweils einmal auf einen der beiden Zustände  $J_3 = 1/2$  und  $J_3 = -1/2$  (in Einheiten von  $\hbar$ ) des ersten Dubletts:



Dies erzeugt jeweils **einmal** die Zustände  $J_3 = 1$  und  $J_3 = -1$ , sowie **zweimal** den Zustand  $J_3 = 0$ . Dies entspricht gerade **einmal** dem Singlett,  $J = 0$  bzw. [1] (roter Punkt), und **einmal** dem Triplett,  $J = 1$  bzw. [3] (schwarze Punkte). Wiederholt man dies mit einem weiteren Dublett und dem Triplett, so erhält man ein Dublett,  $J = 1/2$  bzw. [2] (rote Punkte), und ein Quadruplett,  $J = 3/2$  bzw. [4] (schwarze Punkte):



Alle  $SU(3)$ -Multipletts lassen sich ganz analog, aufbauend auf der fundamentalen Darstellung, dem Triplett, durch Kopplung erzeugen. Wir zeigen dies zunächst am Beispiel der Kopplung von zwei Triplets:

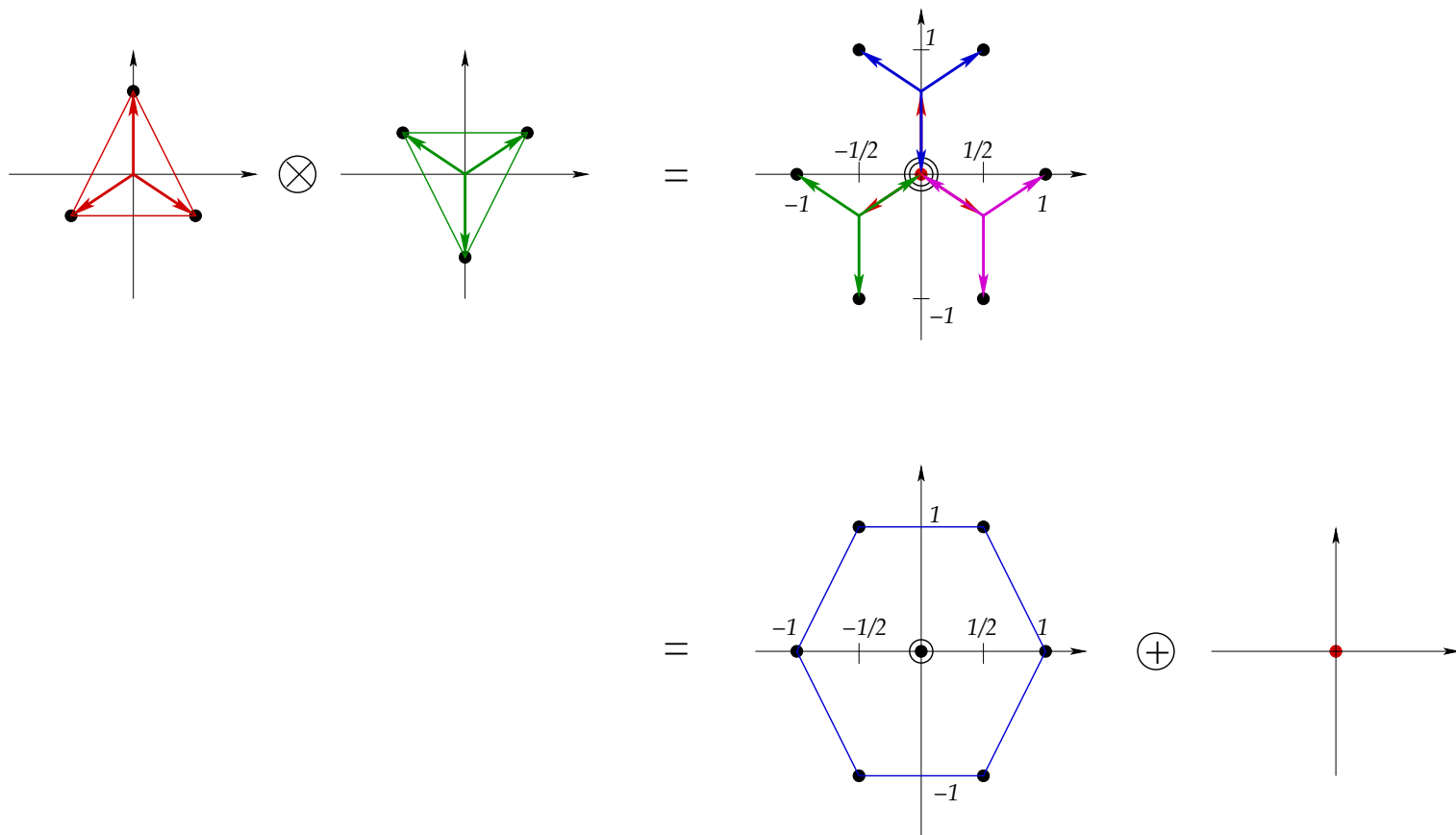


Dies ergibt ein Sextett und ein Anti-Triplett,

$$[3] \otimes [3] = [\bar{3}] \oplus [6]. \tag{2.167}$$

## 2 Symmetrien

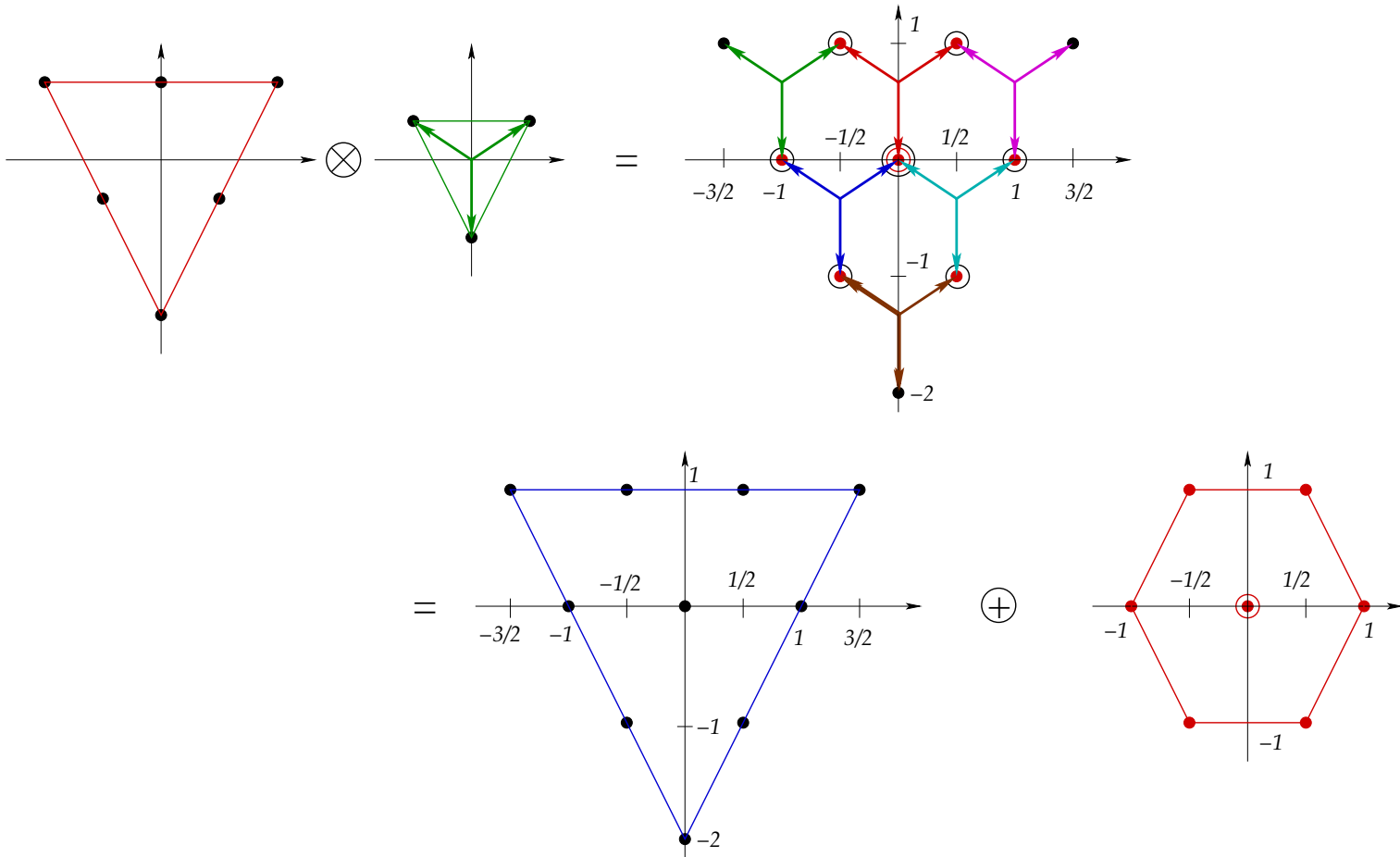
Nun koppeln wir das Anti-Triplett mit einem weiteren Triplett:



Dies ergibt ein Oktett und ein Singlett,

$$[\bar{3}] \otimes [3] = [1] \oplus [8]. \quad (2.168)$$

Ausgehend vom Sextett erhalten wir durch weitere Kopplung eines Triplett:



Dies ergibt ein Dekuplett und ein Oktett,

$$[3] \otimes [6] = [8] \oplus [10] . \quad (2.169)$$

Wir können die Regeln (2.167), (2.168) und (2.169) zusammen mit dem Assoziativgesetz nutzen, um kompliziertere Kopplungen zu bestimmen, z.B.

$$[3] \otimes [3] \otimes [3] = [3] \otimes ([\bar{3}] \oplus [6]) = ([3] \otimes [\bar{3}]) \oplus ([3] \otimes [6]) = [1] \oplus [8] \oplus [8] \oplus [10] . \quad (2.170)$$

## 2.5 Unitäre Symmetrien der Starke Wechselwirkung

### 2.5.1 $U(1)$ -Symmetrie der Quantenelektrodynamik

Symmetrien spielen in den modernen Theorien der Naturkräfte eine prominente Rolle. Dies gilt im besonderen Maße für die Theorie der Starke Wechselwirkung. Wir betrachten zunächst jedoch als Beispiel die (einfachere) Theorie des Elektromagnetismus, die **Quantenelektrodynamik (QED)**, welche Wechselwirkungen zwischen **Elektronen** und **Photonen** beschreibt. Die zugehörige **Lagrangedichte** lautet (in natürlichen Einheiten,  $\hbar = c = 1$ )

$$\mathcal{L}_{\text{QED}} = -\frac{1}{4} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} + \bar{\psi}(i \not{D} - m)\psi , \quad (2.171)$$

## 2 Symmetrien

wobei  $F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu$  der **Feldstärketensor** des elektromagnetischen Feldes, mit dem 4-Vektorpotential bzw. dem sog. **Eichfeld**  $A^\mu$ , ist und

$$D_\mu = \partial_\mu - ieA_\mu \quad (2.172)$$

die **kovariante Ableitung**, vgl. Gl. (1.35).  $\psi$  ist der 4-Spinor des Elektrons und  $m$  dessen Masse. Der erste Term in der Lagrangedichte (2.171) ist der sog. **Eichfeld-Term**, der die Dynamik des Eichfeldes  $A^\mu$ , in diesem Fall des Photonenfeldes, beschreibt. Der zweite Term ist der sog. **Materie-Term**, der die Dynamik der Materiefelder, in diesem Fall des Elektrons, beschreibt.

Die Lagrangedichte (2.171) ist **invariant** unter sog.  **$U(1)$ -Eichtransformationen**,

$$\psi \longrightarrow \psi' = \hat{U} \psi, \quad (2.173)$$

$$A^\mu \longrightarrow A'^\mu = \hat{U} A^\mu \hat{U}^{-1} - \frac{i}{e} (\partial^\mu \hat{U}) \hat{U}^{-1}, \quad (2.174)$$

wobei

$$\hat{U} \equiv e^{ie\Lambda(X)} \in U(1) \quad (2.175)$$

ein **raum-zeitabhängiger** Phasenfaktor ist, der gleichzeitig eine **Darstellung eines Elementes der Gruppe  $U(1)$**  ist. Für Elemente der  $U(1)$  vereinfacht sich Gl. (2.174) wie folgt:

$$A^\mu \longrightarrow A'^\mu = A^\mu + \partial^\mu \Lambda.$$

Die Invarianz der Lagrangedichte (2.171) unter den Transformationen (2.173), (2.174) sieht man wie folgt:

- (i) Der Feldstärketensor ist invariant unter der Symmetrietransformation (2.174),

$$F^{\mu\nu} \longrightarrow F'^{\mu\nu} = \partial^\mu (A^\nu + \partial^\nu \Lambda) - \partial^\nu (A^\mu + \partial^\mu \Lambda) = F^{\mu\nu},$$

sofern  $\Lambda(X)$  zweimal stetig differenzierbar ist,  $\partial^\mu \partial^\nu \Lambda = \partial^\nu \partial^\mu \Lambda$ . Damit ist auch der Eichfeld-Term in Gl. (2.171) invariant.

- (ii) Die kovariante Ableitung des Materiefeldes transformiert sich wie das Materiefeld selbst,

$$\begin{aligned} D_\mu \psi \longrightarrow D'_\mu \psi' &= (\partial_\mu - ie A'_\mu) \psi' = [\partial_\mu - ie A_\mu - ie (\partial_\mu \Lambda)] e^{ie\Lambda} \psi \\ &= e^{ie\Lambda} [\partial_\mu + ie (\partial_\mu \Lambda) - ie A_\mu - ie (\partial_\mu \Lambda)] \psi \\ &= e^{ie\Lambda} (\partial_\mu - ie A_\mu) \psi \equiv e^{ie\Lambda} D_\mu \psi. \end{aligned}$$

Also ist auch der Materie-Term in Gl. (2.171) invariant,

$$\bar{\psi}(i\mathcal{D} - m)\psi \longrightarrow \bar{\psi}'(i\mathcal{D}' - m)\psi' = \bar{\psi} e^{-ie\Lambda} e^{ie\Lambda} (i\mathcal{D} - m)\psi = \bar{\psi}(i\mathcal{D} - m)\psi.$$

Anstelle von Eichtransformationen spricht man auch von **lokalen Symmetrietransformationen** und von **lokaler Invarianz** unter diesen Transformationen oder kurz **lokaler Symmetrie**. Für den speziellen Fall  $\Lambda(X) = const.$  spricht man von **globalen Symmetrietransformationen** bzw. **globaler Invarianz** oder **globaler Symmetrie**.

### 2.5.2 $SU(3)$ –Farbsymmetrie der Quantenchromodynamik

Die Theorie der Starke Wechselwirkung ist die sog. **Quantenchromodynamik (QCD)** (griech.:  $\chi\rho\tilde{\omega}\mu\alpha = \text{Farbe}$ ). Sie beschreibt die Wechselwirkung zwischen **Quarks** und **Gluonen**. Die Lagrangedichte der QCD sieht ganz ähnlich aus wie die der QED, Gl. (2.171),

$$\mathcal{L}_{\text{QCD}} = -\frac{1}{2} \text{Tr} (\mathcal{F}^{\mu\nu} \mathcal{F}_{\mu\nu}) + \bar{\Psi} (i\mathcal{D} - \hat{m}) \Psi . \quad (2.176)$$

Hierbei ist

$$\mathcal{F}^{\mu\nu} \equiv F_a^{\mu\nu} \hat{T}_a \quad (2.177)$$

der **matrixwertige Feldstärketensor**, mit den acht **Generatoren**  $\hat{T}_a$  der  $SU(3)$  in der **fundamentalen Darstellung**, d.h. als  $(3 \times 3)$ –Matrizen, vgl. Gl. (2.120).  $\Psi$  ist das Quarkfeld und  $\hat{m}$  dessen Masse.

Mit Hilfe von Gl. (2.69) kann der Eichfeld-Term der QCD in eine ganz ähnliche Form wie der der QED gebracht werden,

$$\frac{1}{2} \text{Tr} (\mathcal{F}^{\mu\nu} \mathcal{F}_{\mu\nu}) = F_a^{\mu\nu} F_{\mu\nu}^b \frac{1}{2} \text{Tr} (\hat{T}_a \hat{T}_b) = \frac{1}{4} F_a^{\mu\nu} F_{\mu\nu}^b \delta_{ab} = \frac{1}{4} F_a^{\mu\nu} F_{\mu\nu}^a .$$

Der erkennbare Unterschied zur QED ist, dass es jetzt **acht** verschiedene Feldstärketensoren  $F_a^{\mu\nu}$  gibt, entsprechend den **acht Farben** der Gluonenfelder. Es gibt jedoch beim Feldstärketensor der QCD noch einen wichtigen, weniger offensichtlichen Unterschied zu dem der QED. Der Feldstärketensor ist bis auf einen Faktor  $i/g$ , wobei  $g$  die **Kopplungskonstante** der Starke Wechselwirkung ist, definiert als der **Kommutator**,

$$\mathcal{F}^{\mu\nu} \equiv \frac{i}{g} [D^\mu, D^\nu] , \quad (2.178)$$

zweier kovarianter Ableitungen

$$D_\mu = \partial_\mu - ig \mathcal{A}_\mu , \quad (2.179)$$

wobei die kovariante Ableitung, wie schon der Feldstärketensor, **matrixwertig** ist, mit dem **matrixwertigen 4-Potential** bzw. **Eichfeld**

$$\mathcal{A}^\mu \equiv A_a^\mu \hat{T}_a . \quad (2.180)$$

Die acht 4-Vektorpotentiale  $A_a^\mu$  entsprechen den acht Gluonenfeldern. Wir berechnen den Kommutator (2.178) explizit,

$$\begin{aligned} \frac{i}{g} [D^\mu, D^\nu] &= \frac{i}{g} [(\partial^\mu - ig \mathcal{A}^\mu) (\partial^\nu - ig \mathcal{A}^\nu) - (\partial^\nu - ig \mathcal{A}^\nu) (\partial^\mu - ig \mathcal{A}^\mu)] \\ &= \frac{i}{g} [\partial^\mu \partial^\nu - ig (\partial^\mu \mathcal{A}^\nu) - ig \mathcal{A}^\nu \partial^\mu - ig \mathcal{A}^\mu \partial^\nu - g^2 \mathcal{A}^\mu \mathcal{A}^\nu \\ &\quad - \partial^\nu \partial^\mu + ig (\partial^\nu \mathcal{A}^\mu) + ig \mathcal{A}^\mu \partial^\nu + ig \mathcal{A}^\nu \partial^\mu + g^2 \mathcal{A}^\nu \mathcal{A}^\mu] \\ &= \partial^\mu \mathcal{A}^\nu - \partial^\nu \mathcal{A}^\mu - ig [\mathcal{A}^\mu, \mathcal{A}^\nu] \\ &= \partial^\mu \mathcal{A}^\nu - \partial^\nu \mathcal{A}^\mu - ig A_b^\mu A_c^\nu [\hat{T}^b, \hat{T}^c] \\ &= (\partial^\mu A_a^\nu - \partial^\nu A_a^\mu + g f_{abc} A_b^\mu A_c^\nu) \hat{T}_a , \end{aligned}$$

wobei wir im letzten Schritt die Lie-Algebra (2.129) der  $SU(3)$  benutzt haben. Vergleichen wir dieses Ergebnis mit Gl. (2.177), so erkennen wir, dass

$$F_a^{\mu\nu} \equiv \partial^\mu A_a^\nu - \partial^\nu A_a^\mu + g f_{abc} A_b^\mu A_c^\nu . \quad (2.181)$$

Die **nicht-abelsche** Natur der Gruppe  $SU(3)$  bedingt, dass zusätzliche Terme im Feldstärketensor des  $a$ -ten Gluons auftreten, die von Gluonenfelder der Farben  $b$  und  $c$  abhängen. Diese **nicht-abelschen Terme** führen im Eichfeld-Term der Lagrangedichte der QCD zu **3- und 4-Gluon-Wechselwirkungstermen**,

$$\begin{aligned} -\frac{1}{4} F_a^{\mu\nu} F_{\mu\nu}^a &= -\frac{1}{2} \partial^\mu A_a^\nu (\partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a) \\ &\quad -g f_{abc} \partial^\mu A_a^\nu A_\mu^b A_\nu^c - \frac{g^2}{4} f_{abc} f_{ade} A_a^\mu A_b^\nu A_\mu^d A_\nu^e , \end{aligned} \quad (2.182)$$

wobei wir die Antisymmetrie der Strukturkonstanten  $f_{abc}$  ausgenutzt haben. Diese **Selbstwechselwirkungen** der Gluonenfelder bedingt, dass die QCD physikalisch ganz andere Eigenschaften hat wie die QED. Wir können hier aber nicht näher darauf eingehen, dies ist Thema der Vorlesung “Quantenfeldtheorie”.

Eine Anmerkung hinsichtlich des Materie-Terms in der QCD-Lagrangedichte ist an dieser Stelle angebracht: die matrixwertige kovariante Ableitung bedingt, dass die Quarkspinoren  $\Psi$  nicht nur Diracsche 4-Spinoren sind, sondern gleichzeitig **3-er Vektoren** im sog. **Farb-Raum**. Die drei Komponenten dieser Vektoren symbolisieren die **Quarkfarben**, üblicherweise mit **rot**, **grün** und **blau** bezeichnet. Außerdem gibt es **sechs verschiedene Quark-Flavors: up, down, strange, charm, bottom und top**. Daher haben die Quarkspinoren  $4 \cdot 3 \cdot 6 \equiv 4N_c N_f = 72$  Komponenten, wobei wir die Zahl der (fundamentalen) Quark-Farben als  $N_c$  und die Zahl der Flavors als  $N_f$  geschrieben haben. Die Quarkmasse  $\hat{m}$  in der QCD-Lagrangedichte ist kein Parameter, sondern eine  $[(4N_c N_f) \times (4N_c N_f)]$ -Matrix im Dirac-, Farb- und Flavor-Raum,

$$\hat{m} = \begin{pmatrix} \hat{m}_u & 0 & \cdots & & & & \\ 0 & \hat{m}_d & 0 & \cdots & & & \\ \vdots & 0 & \hat{m}_s & 0 & \cdots & & \\ & \vdots & 0 & \hat{m}_c & 0 & \cdots & \\ & & \vdots & 0 & \hat{m}_b & 0 & \\ & & & \vdots & 0 & \hat{m}_t & \end{pmatrix} ,$$

wobei die einzelnen Flavor-Massenmatrizen  $\hat{m}_i$   $[(4N_c) \times (4N_c)]$ -Diagonalmatrizen sind, mit der jeweiligen Quarkmasse  $m_i$  in der Hauptdiagonalen.

Ganz analog zur QED ist die QCD-Lagrangedichte (2.176) **invariant** unter **lokalen**  $SU(N_c)$ -Transformationen im Farbraum,

$$\Psi \longrightarrow \Psi' = \hat{U} \Psi , \quad (2.183)$$

$$\mathcal{A}^\mu \longrightarrow \mathcal{A}'^\mu = \hat{U} \mathcal{A}^\mu \hat{U}^{-1} - \frac{i}{g} (\partial^\mu \hat{U}) \hat{U}^{-1} , \quad (2.184)$$



wobei

$$\hat{U} = \exp \left[ ig \Lambda_a(X) \hat{T}_a \right] \in SU(3) \quad (2.185)$$

eine Darstellung eines Elementes der Gruppe  $SU(3)$  ist. Die Invarianz sieht man folgendermaßen:

- (i) Die kovariante Ableitung transformiert sich unter Eichtransformationen wie folgt:

$$\begin{aligned} D_\mu = \partial_\mu - ig \mathcal{A}_\mu &\longrightarrow \partial_\mu - ig \left[ \hat{U} \mathcal{A}_\mu \hat{U}^{-1} - \frac{i}{g} \left( \partial_\mu \hat{U} \right) \hat{U}^{-1} \right] \\ &= \partial_\mu + \left[ \partial_\mu \left( \hat{U} \hat{U}^{-1} \right) \right] - ig \hat{U} \mathcal{A}_\mu \hat{U}^{-1} - \left( \partial_\mu \hat{U} \right) \hat{U}^{-1} \\ &= \partial_\mu + \hat{U} \left( \partial_\mu \hat{U}^{-1} \right) + \left( \partial_\mu \hat{U} \right) \hat{U}^{-1} - ig \hat{U} \mathcal{A}_\mu \hat{U}^{-1} - \left( \partial_\mu \hat{U} \right) \hat{U}^{-1} \\ &= \hat{U} \left[ \hat{U}^{-1} \partial_\mu + \left( \partial_\mu \hat{U}^{-1} \right) - ig \mathcal{A}^\mu \hat{U}^{-1} \right] \\ &= \hat{U} \left( \partial_\mu - ig \mathcal{A}_\mu \right) \hat{U}^{-1} \equiv \hat{U} D_\mu \hat{U}^{-1} . \end{aligned} \quad (2.186)$$

Also transformiert sich auch der matrixwertige Feldstärketensor wie

$$\mathcal{F}_{\mu\nu} \equiv \frac{i}{g} [D_\mu, D_\nu] \longrightarrow \frac{i}{g} [D'_\mu, D'_\nu] = \frac{i}{g} \hat{U} [D_\mu, D_\nu] \hat{U}^{-1} \equiv \hat{U} \mathcal{F}_{\mu\nu} \hat{U}^{-1} = \mathcal{F}'^{\mu\nu} . \quad (2.187)$$

Damit ist der Eichfeld-Term in der QCD-Lagrangedichte **invariant** unter lokalen  $SU(N_c)$ -Transformationen,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \text{Tr} (\mathcal{F}^{\mu\nu} \mathcal{F}_{\mu\nu}) &\longrightarrow \frac{1}{2} \text{Tr} (\mathcal{F}'^{\mu\nu} \mathcal{F}'_{\mu\nu}) \\ &= \frac{1}{2} \text{Tr} \left( \hat{U} \mathcal{F}^{\mu\nu} \hat{U}^{-1} \hat{U} \mathcal{F}_{\mu\nu} \hat{U}^{-1} \right) \equiv \frac{1}{2} \text{Tr} (\mathcal{F}^{\mu\nu} \mathcal{F}_{\mu\nu}) \end{aligned} \quad (2.188)$$

wegen der zyklischen Vertauschbarkeit unter der Spur.

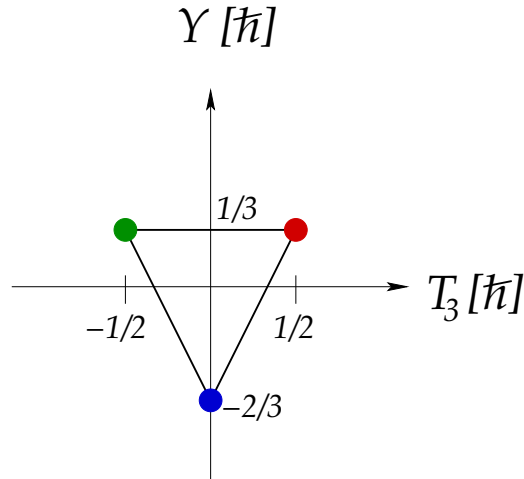
- (ii) Der Materie-Term ist ebenfalls invariant unter lokalen  $SU(N_c)$ -Transformationen, denn die kovariante Ableitung des Quarkspinors transformiert sich unter Zuhilfenahme von Gl. (2.186) wie

$$D_\mu \Psi \longrightarrow D'_\mu \Psi' = \hat{U} D_\mu \hat{U}^{-1} \hat{U} \Psi = \hat{U} D_\mu \Psi , \quad (2.189)$$

und damit

$$\bar{\Psi} (i \not{D} - \hat{m}) \Psi \longrightarrow \bar{\Psi}' (i \not{D}' - \hat{m}) \Psi' = \bar{\Psi} \hat{U}^{-1} \hat{U} (i \not{D} - \hat{m}) \Psi \equiv \bar{\Psi} (i \not{D} - \hat{m}) \Psi . \quad (2.190)$$

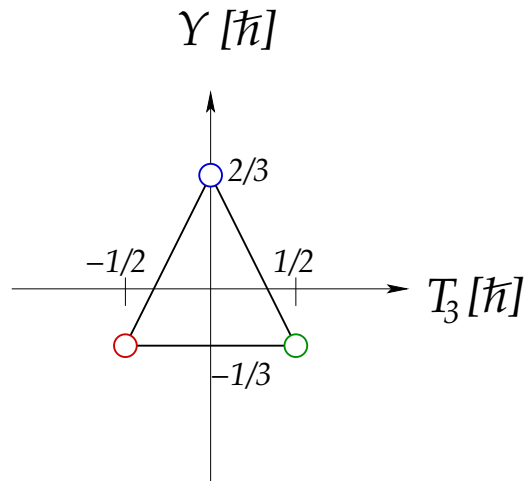
Die **Eichinvarianz** der QCD, also die **Symmetrie** unter **lokalen**  $SU(N_c)$ -**Transformationen** bedingt, dass sowohl Quarks wie auch Gluonen in **Multipletts** der Gruppe  $SU(N_c)$  fallen. Dies kann nicht anders sein, da Quarks nur untereinander, aber niemals in Gluonen oder andere Objekte transformiert werden. Gleiches gilt für Gluonen. Die  $N_c = 3$  Quark-Farben sind Zustände der fundamentalen Darstellung, des **Tripletts**:



Die Farben werden wie folgt Eigenzuständen  $|T_3 Y\rangle$  zum "Farb-Spin"  $T_3$  und zur "Farb-Hyperladung"  $Y$  zugeordnet:

$$\begin{aligned}
 |r\rangle \equiv |\text{"rot"}\rangle &\equiv \left| \frac{1}{2} \frac{1}{3} \right\rangle, \\
 |g\rangle \equiv |\text{"grün"}\rangle &\equiv \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{3} \right\rangle, \\
 |b\rangle \equiv |\text{"blau"}\rangle &\equiv \left| 0 -\frac{2}{3} \right\rangle.
 \end{aligned}$$

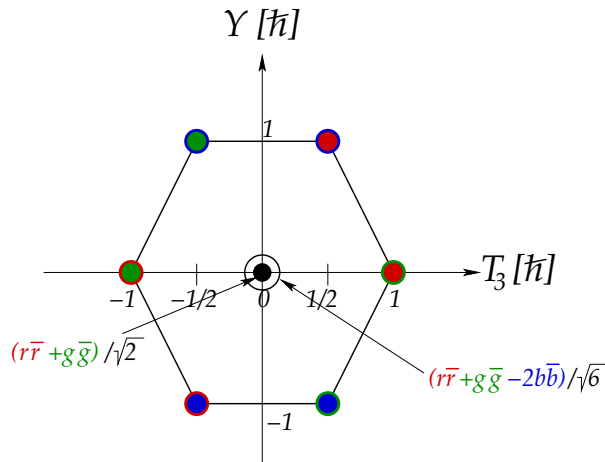
**Anti-Quarks** unterscheiden sich von Quarks in **allen** Ladungsquantenzahlen, also auch in der **Farbe**. Deshalb müssen Anti-Quarks Zustände des **Anti-Tripletts** besetzen,



Die Zuordnung der Farben zu  $|T_3 Y\rangle$ -Eigenzuständen ist wie folgt:

$$\begin{aligned}
 |\bar{r}\rangle \equiv |\text{"anti-rot"}\rangle &\equiv \left| -\frac{1}{2} -\frac{1}{3} \right\rangle, \\
 |\bar{g}\rangle \equiv |\text{"anti-grün"}\rangle &\equiv \left| \frac{1}{2} -\frac{1}{3} \right\rangle, \\
 |\bar{b}\rangle \equiv |\text{"anti-blau"}\rangle &\equiv \left| 0 \frac{2}{3} \right\rangle.
 \end{aligned}$$

Die acht **Gluonen** besetzen Zustände der adjungierten Darstellung, des **Oktetts**. Da das Oktett aus der Kopplung eines Triplets und eines Anti-Triplets generiert werden kann, vgl. Gl. (2.168), kann man sich Gluonen als Kombination von Farben und Anti-Farben vorstellen.



Eine Besonderheit der QCD ist das sog. **Farb-Confinement**: Teilchen, die der Starken Wechselwirkung unterliegen, sog. **Hadronen**, treten in der Natur stets als **Singletts** (“weiße” Objekte) der  $SU(N_c)$ -Farbsymmetrie auf, **farbgeladene** Objekte wie Quarks und Gluonen werden dagegen **nie** als isolierte Teilchen beobachtet. Das Confinement der Farbladungen ist eine experimentell beobachtete Tatsache, konnte aber rigoros auf der Basis der QCD bislang noch nicht gezeigt werden.

Die Tatsache, dass Hadronen stets Farb-Singletts sind, bedeutet, dass sie aus **mehreren** Quarks bzw. Gluonen bestehen müssen, und zwar stets aus solchen Kopplungen, die ein Singlett erlauben, z.B. wie in Gln. (2.168) und (2.170). Farb-Singletts, die aus einem Quark und einem Anti-Quark bestehen, nennt man **Mesonen**, Farb-Singletts, die aus drei Quarks bestehen, heißen **Baryonen**. Wir werden konkrete Beispiele dafür in den nächsten Abschnitten besprechen, sobald wir eine weitere Symmetrie der QCD diskutiert haben, die sog. **Flavor-Symmetrie**.

### 2.5.3 $SU(N_f)$ -Flavor-Symmetrie

28.6.2012

In Übungsaufgabe 4.3 hatten wir gesehen, dass links- und rechtshändige Dirac-Felder,

$$\psi_{r,\ell} = \frac{1 \pm \gamma_5}{2} \psi, \quad \bar{\psi}_{r,\ell} = \bar{\psi} \frac{1 \mp \gamma_5}{2}, \quad (2.191)$$

im Fall verschwindender Masse in der Dirac-Lagrangedichte entkoppeln,

$$\bar{\psi} i \not{\partial} \psi = \bar{\psi}_r i \not{\partial} \psi_r + \bar{\psi}_\ell i \not{\partial} \psi_\ell. \quad (2.192)$$

Dies gilt auch für die QCD-Lagrangedichte (2.176), welche dann **invariant** ist unter **globalen, unitären Transformationen** der rechts- und linkshändigen Quark-Felder,

$$\begin{aligned} \Psi_{r,\ell} &\longrightarrow \Psi'_{r,\ell} = \hat{U}_{r,\ell} \Psi_{r,\ell}, \\ \hat{U}_{r,\ell} &= \exp\left(-i\alpha_{r,\ell}^a \hat{T}_a\right) \in U(N_f)_{r,\ell}, \quad \alpha_{r,\ell}^a = \text{const.}, \quad a = 0, \dots, N_f^2 - 1. \end{aligned} \quad (2.193)$$

## 2 Symmetrien

Da man rechts- und linkshändige Felder **separat** transformieren kann, ist die volle Symmetriegruppe  $U(N_f)_r \times U(N_f)_\ell$ , die sog. **chirale Symmetrie** der QCD.

Ein Massenterm bricht diese Symmetrie **explizit**, wie man sich leicht überzeugt:

$$\bar{\psi} m \psi = \bar{\psi}_\ell m \psi_r + \bar{\psi}_r m \psi_\ell . \quad (2.194)$$

Dieser Term ist nur symmetrisch unter denjenigen chiralen Transformationen, für die  $\hat{U}_\ell^\dagger = \hat{U}_r^{-1} = \hat{U}_r^{-1}$  ist, oder  $\alpha_r^a = \alpha_\ell^a$ . Diese Symmetrie ist die der **Vektor-Transformationen**  $V = r + \ell$ ,

$$\hat{U}_V = \exp \left( -i\alpha_V^a \hat{T}_a \right) \in U(N_f)_V , \quad \alpha_V^a \equiv \alpha_{r+\ell}^a = \alpha_r^a + \alpha_\ell^a , \quad (2.195)$$

welche die diagonale Untergruppe  $U(N_f)_V$  der chiralen Symmetrie  $U(N_f)_r \times U(N_f)_\ell$  bilden. Die Symmetrie der **Axialvektor-Transformationen**  $A = r - \ell$ ,

$$\hat{U}_A = \exp \left( -i\alpha_A^a \hat{T}_a \right) \in U(N_f)_A , \quad \alpha_A^a \equiv \alpha_{r-\ell}^a = \alpha_r^a - \alpha_\ell^a , \quad (2.196)$$

ist dagegen **explizit** gebrochen. (Es gibt keine solche Symmetriegruppe, weil der Massenterm erzwingt, dass  $\alpha_r^a = \alpha_\ell^a$  sein muss, also die Parameter der  $U(N_f)_A$ -Symmetriegruppe verschwinden müssen.)

Da die einzelnen Quarkmassen nicht verschwinden,

$$\begin{aligned} m_u &\simeq 2.5 \text{ MeV} , & m_d &\simeq 5 \text{ MeV} , \\ m_s &\simeq 105 \text{ MeV} , & m_c &\simeq 1.266 \text{ GeV} , \\ m_b &\simeq 4.198 \text{ GeV} , & m_t &\simeq 173.1 \text{ GeV} , \end{aligned} \quad (2.197)$$

ist die chirale Symmetrie der QCD explizit gebrochen. Wären alle Quarkmassen gleich groß, dann wäre die residuale Symmetrie der QCD die der Vektor-Transformationen  $U(N_f)_V$ . Da  $U(N) = SU(N) \otimes U(1)$ , vgl. Übungsaufgabe 6.3, und  $U(1)_V$  nach dem Noether-Theorem einfach die (triviale) Erhaltung der Quarkzahl darstellt, betrachtet man üblicherweise die Gruppe  $SU(N_f)$  der **speziellen unitären Vektor-Transformationen** oder kurz, die  **$SU(N_f)$ -Flavor-Symmetrie**.

Die Brechung dieser Symmetrie durch die voneinander verschiedenen Quarkmassen (2.197) ist unterschiedlich stark. Z.B. ist der Massenunterschied zwischen up- und down-Quark, gemessen auf einer typischen hadronischen Massenskala von  $M_h \sim 1 \text{ GeV}$ , verschwindend gering. Dies bedingt, dass die QCD und damit die Starke Wechselwirkung eine approximative  $SU(2)$ -Flavor-Symmetrie besitzt, die sog. **Isospin-Symmetrie**, die wir im nächsten Abschnitt besprechen. Auch die Massendifferenz zwischen strange- und up- sowie down-Quark ist auf einer hadronischen Massenskala klein, so dass man in guter Näherung auch von einer approximativen  $SU(3)$ -Flavor-Symmetrie der Starken Wechselwirkung ausgehen kann. Diese besprechen wir dann im darauffolgenden Abschnitt. Stärker verletzt ist die  $SU(4)$ -Flavor-Symmetrie, die noch das charm-Quark mit berücksichtigt. Dennoch ist es sinnvoll, auch diese Symmetrie zu betrachten, um Hadronen mit Quantenzahl Charm zu klassifizieren.

### 2.5.4 Isospin–Symmetrie

Die Massen von up- und down-Quarks sind, gemessen auf der hadronischen Massenskala  $M_h \sim 1 \text{ GeV}$  nahezu gleich groß (und zudem verschwindend klein),

$$m_u \simeq 2.5 \text{ MeV} < m_d \simeq 5 \text{ MeV} \ll M_h \sim 1 \text{ GeV} .$$

Daher kann man in guter Näherung annehmen, dass QCD eine  $SU(2)$ –Flavor-Symmetrie besitzt. (Die gegenüber  $M_h$  verschwindend kleinen Quarkmassen legen die Vermutung nahe, dass die Symmetriegruppe sogar größer sein könnte, nämlich die der chiralen Symmetrie für  $N_f = 2$  Flavors,  $U(2)_r \times U(2)_\ell$ . Dies ist aber aus einem anderen Grund, nämlich der sog. **spontanen Brechung** der chiralen Symmetrie durch ein nichtverschwindendes Quarkkondensat  $\langle \bar{\Psi}\Psi \rangle \neq 0$ , nicht der Fall.)

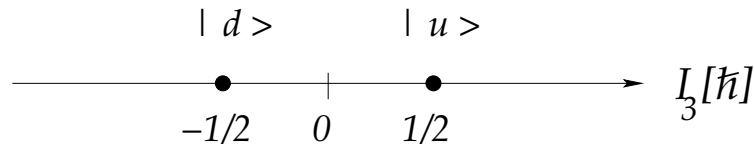
Wir schreiben

$$\bar{m} \equiv \frac{1}{2} (m_u + m_d) , \quad \delta m \equiv m_d - m_u , \quad (2.198)$$

so dass

$$m_u = \bar{m} - \frac{\delta m}{2} , \quad m_d = \bar{m} + \frac{\delta m}{2} , \quad (2.199)$$

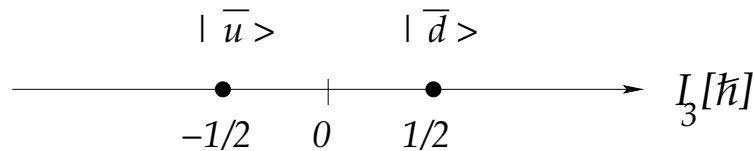
und vernachlässigen im folgenden den Massenunterschied  $\delta m$ . Dann ist die  $SU(2)$ –Flavor-Symmetrie der QCD sogar eine **exakte** Symmetrie. Up- und down-Quark bilden ein  **$SU(2)$ –Dublett**, [2],



Bezeichnen wir die Zustände mit  $|I I_3\rangle$ , so ist

$$\begin{aligned} |u\rangle &\equiv | \text{“up”} \rangle = \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle , \\ |d\rangle &\equiv | \text{“down”} \rangle = \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle . \end{aligned}$$

Das entsprechende **Anti-Dublett** [2] besteht aus den jeweiligen Anti-Teilchen zu up- und down-Quark, dem Anti-up-  $\bar{u}$  und Anti-down-Quark  $\bar{d}$ . Es hat formal die gleiche Gestalt wie das Dublett,



Die Zuordnung der Zustände lautet

$$\begin{aligned} |\bar{u}\rangle &\equiv | \text{“anti-up”} \rangle = \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle , \\ |\bar{d}\rangle &\equiv | \text{“anti-down”} \rangle = \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle . \end{aligned}$$

Wegen der formalen Ähnlichkeit mit [2] sind die Kopplungsregeln für das Anti-Dublett identisch mit denen des Dubletts, also gilt in Analogie zu Gl. (2.164)

$$[2] \otimes [\bar{2}] = [1] \oplus [3]. \quad (2.200)$$

Aufgrund der  $SU(2)$ -Symmetrie müssen alle Hadronen, die aus up- und down-Quarks (bzw. ihren Anti-Quarks) zusammengesetzt sind, ebenfalls in  $SU(2)$ -Multipletts angeordnet sein. Die Zuordnung folgt dabei den Kopplungsregeln für  $SU(2)$ , die wir in Abschnitt 2.4.5 besprochen haben. Weil die Eigenwerte von des Hamilton-Operators  $\hat{H}(\hat{C}_1)$  auf einem Multiplett entartet sind, müssen im Fall **exakter**  $SU(2)$ -Flavor-Symmetrie alle Hadronen eines Multipletts die **gleiche Masse** besitzen. Man bezeichnet die  $SU(2)$ -Flavor-Symmetrie daher auch als **Isobarens핀-Symmetrie** oder kurz **Isospin-Symmetrie** (griech.: ἴσος βάρους = gleich schwer). Daher stammen auch die Bezeichnungen  $I$  und  $I_3$  für den Betrag des Isospins und dessen 3-Komponente.

**Mesonen** sind farblose **Quark-Anti-Quark-Zustände**. Die möglichen  $SU(2)$ -Flavor-Multipletts errechnen sich aus Gl. (2.200), d.h. es gibt ein **Flavor-Singlett** und ein **Flavor-Triplett**. Unter Berücksichtigung der in Frage kommenden Clebsch-Gordan-Koeffizienten ergibt sich



Es gibt allerdings verschiedene Arten von Mesonen, die den gleichen Flavor-Inhalt haben, aber sich in ihrem Verhalten unter Lorentz-Transformationen, d.h. in ihrem Spin  $J$  unterscheiden. Die Klassifikation erfolgt gewöhnlich nach Isospin  $I$  und nach Spin  $J$ , Parität  $P$  und Ladungskonjugation  $C$  mit dem Kürzel  $J^{PC}$ . Einige davon sind, für  $N_f = 2$ , in Tabelle 2.2 aufgeführt.

Mesonen	[1] ( $I = 0$ )	[3] ( $I = 1$ )	
Skalare ( $J^{PC} = 0^{++}$ )	$f_0(1370)$	$a_0^\pm(1450)$	$a_0^0(1450)$
Masse [MeV]	$1350 \pm 150$	$1474 \pm 19$	
Pseudoskalare ( $J^{PC} = 0^{-+}$ )	$\eta$	$\pi^\pm$	$\pi^0$
Masse [MeV]	$547.853 \pm 0.024$	$139.57018 \pm 0.00035$	$134.9766 \pm 0.0006$
Vektor- ( $J^{PC} = 1^{--}$ )	$\omega$	$\rho^\pm$	$\rho^0$
Masse [MeV]	$782.65 \pm 0.12$	$775.49 \pm 0.34$	
Axialvektor- ( $J^{PC} = 1^{++}$ )	$f_1(1285)$	$a_1^\pm(1260)$	$a_1^0(1260)$
Masse [MeV]	$1281.8 \pm 0.6$	$1230 \pm 40$	

Tabelle 2.2: Mesonen, die aus einem Quark und einem Anti-Quark bestehen.

Die Zustände des Triplets unterscheiden sich in ihrer elektrischen Ladung, welche sich nach der Formel

$$Q = e I_3 \quad (\text{Mesonen}) \quad (2.201)$$

berechnen läßt.

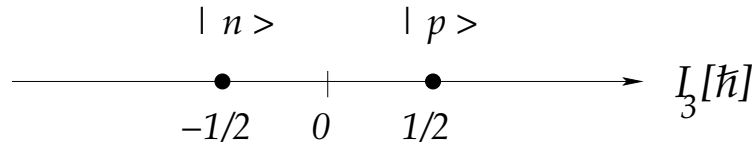
Wie man sieht, ist die Isospin-Symmetrie nahezu exakt, einzig die verschiedenen Zustände des Pionen-Tripletts unterscheiden sich geringfügig in ihrer Masse,

$$\delta m_\pi = m_{\pi^\pm} - m_{\pi^0} = 4.59358 \text{ MeV} \ll m_{\pi^\pm}, m_{\pi^0} .$$

**Baryonen** sind farblose Zustände aus **drei Quarks**. Die möglichen Flavor-Multipletts errechnen sich aus

$$[2] \otimes [2] \otimes [2] = [2] \otimes ([1] \oplus [3]) = [2] \oplus [2] \oplus [4] . \quad (2.202)$$

Eines der beiden Dubletts ist das **Nukleonen-Dublett**, bestehend aus **Proton** und **Neutron**:



Unter Berücksichtigung der Clebsch-Gordan-Koeffizienten lautet der Flavor-Inhalt von Proton und Neutron

$$|p\rangle \equiv |\text{“Proton”}\rangle = \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (|uud\rangle + |udu\rangle - 2|duu\rangle) ,$$

$$|n\rangle \equiv |\text{“Neutron”}\rangle = \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (2|udd\rangle - |dud\rangle - |ddu\rangle) ,$$

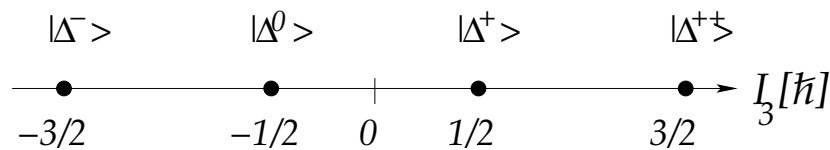
Die Quantenzahlen des Nukleonen-Dubletts sind  $I(J^P) = \frac{1}{2}(\frac{1}{2}^+)$  und die Massen betragen

$$m_n = 939.565346 \pm 0.000023 \text{ MeV} , \quad m_p = 938.272013 \pm 0.000023 \text{ MeV} ,$$

so dass die Massendifferenz (und damit die Isospin-Verletzung) wieder klein gegenüber den Nukleonenmassen ist,

$$\delta m_N = m_n - m_p = 1.293333 \text{ MeV} \ll m_n, m_p .$$

Das Quadruplett in Gl. (2.202) ist das der sog. **Delta-Resonanzen**:



Unter Berücksichtigung der Clebsch-Gordan-Koeffizienten lautet der Flavor-Inhalt der  $\Delta$ -Resonanzen

$$|\Delta^{++}\rangle = \left| \frac{3}{2} \frac{3}{2} \right\rangle = |uuu\rangle ,$$

$$|\Delta^+\rangle = \left| \frac{3}{2} \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|uud\rangle + |udu\rangle + |duu\rangle) ,$$

$$|\Delta^0\rangle = \left| \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|udd\rangle + |dud\rangle + |ddu\rangle) ,$$

$$|\Delta^-\rangle = \left| \frac{3}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle = |ddd\rangle .$$

Die Quantenzahlen des  $\Delta$ -Quadrupletts sind  $I(J^P) = \frac{3}{2}(\frac{3}{2}^+)$  und die Masse beträgt  $m_\Delta = 1232 \text{ MeV}$ .

Zur Berechnung der elektrischen Ladung der Baryonen muss Gl. (2.201) modifiziert werden:

$$Q = e \left( I_3 + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{Baryonen}) . \quad (2.203)$$

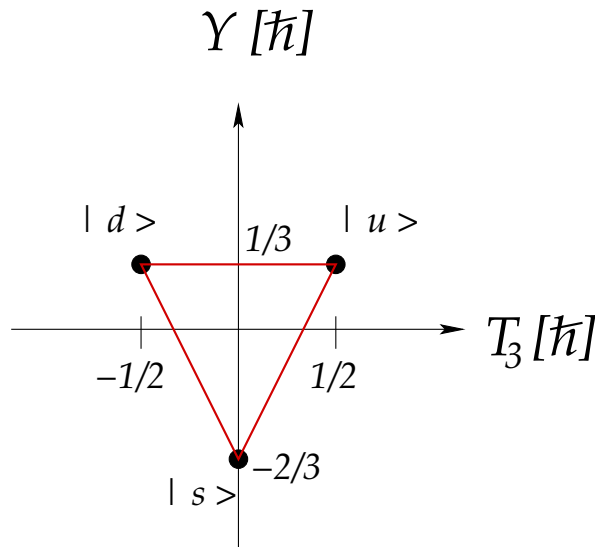
### 2.5.5 Seltsamkeit und $SU(3)$ -Flavor-Symmetrie

Der Unterschied zwischen up-, down- und strange-Quark-Masse ist, verglichen mit der typischen hadronischen Massenskala  $M_h \sim 1 \text{ GeV}$ , noch relativ klein,

$$\begin{aligned} \delta m_{ud} &= m_d - m_u \simeq 2.5 \text{ MeV} \\ &< \delta m_{ds} &= m_s - m_d \simeq 100 \text{ MeV} \\ &\simeq \delta m_{us} &= m_s - m_u \simeq 102.5 \text{ MeV} \\ &\ll M_h \sim 1 \text{ GeV} , \end{aligned}$$

so dass man näherungsweise von einer  $SU(3)$ -Flavor-Symmetrie der Starken Wechselwirkung sprechen kann. Im folgenden vernachlässigen wir die Massenunterschiede  $\delta m_{ud}$ ,  $\delta m_{ds}$  und  $\delta m_{us}$  und gehen von einer **exakten**  $SU(3)$ -Flavor-Symmetrie aus.

Die drei Quark-Flavors bilden dann ein  $SU(3)$ -Triplett:



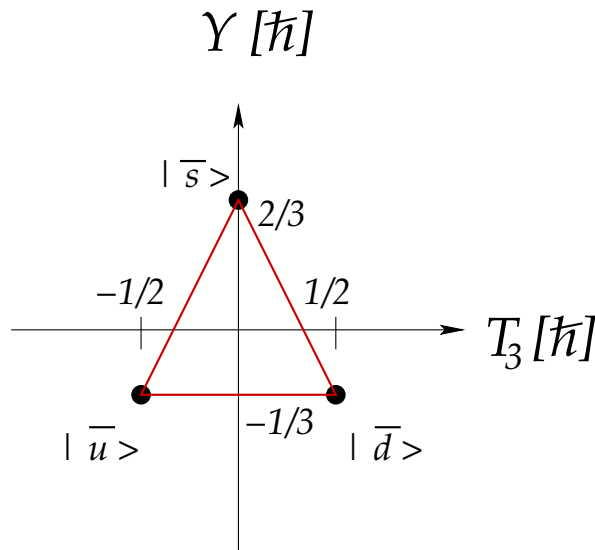
Die Rolle der 3-Komponente des Isospins aus dem vorangegangenen Abschnitt übernimmt nun  $T_3$ . Die Zuordnung der Zustände ist

$$\begin{aligned} |u\rangle &\equiv | \text{''up''} \rangle \equiv \left| \frac{1}{2} \frac{1}{3} \right\rangle , \\ |d\rangle &\equiv | \text{''down''} \rangle \equiv \left| -\frac{1}{2} \frac{1}{3} \right\rangle , \\ |s\rangle &\equiv | \text{''strange''} \rangle \equiv \left| 0 -\frac{2}{3} \right\rangle . \end{aligned}$$



Man beachte die Analogie zur Zuordnung der drei Farben rot, grün und blau bei der  $SU(3)$ -Farb-Symmetrie der QCD.

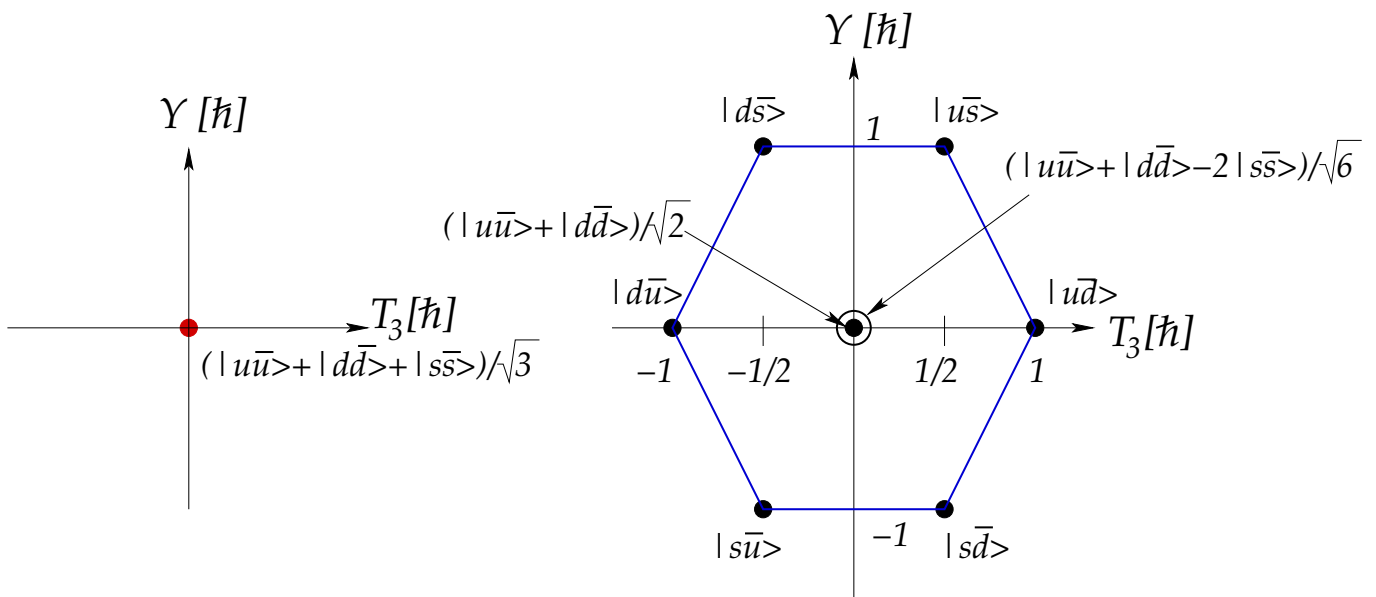
Anti-Quarks bilden das Anti-Triplett:



Die Zuordnung der Zustände ist

$$\begin{aligned}
 |\bar{u}\rangle &\equiv |\text{''Anti-up''}\rangle \equiv \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{3} \right\rangle, \\
 |\bar{d}\rangle &\equiv |\text{''Anti-down''}\rangle \equiv \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{3} \right\rangle, \\
 |\bar{s}\rangle &\equiv |\text{''Anti-strange''}\rangle \equiv \left| 0 \frac{2}{3} \right\rangle.
 \end{aligned}$$

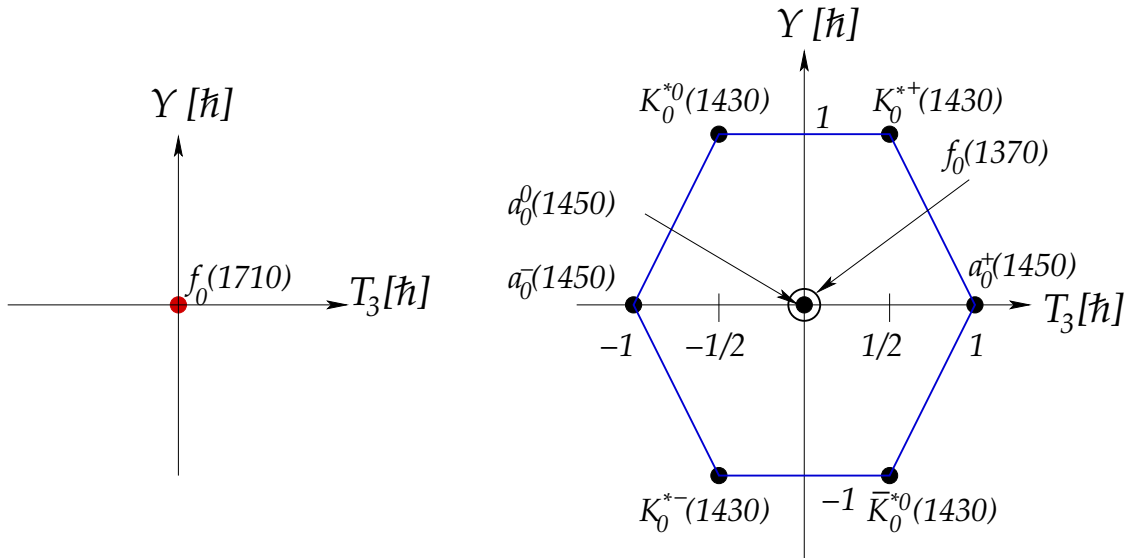
Mesonen bilden gemäß der Kopplungsregel (2.168) ein **Singlett** und ein **Oktett**:



## 2 Symmetrien

Wir unterscheiden

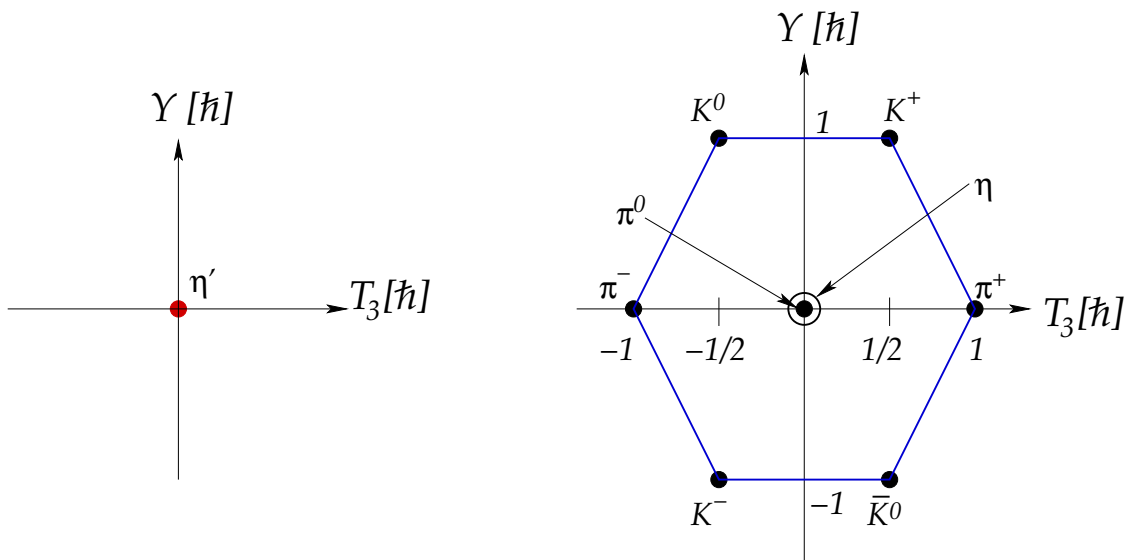
(i) **Skalare Mesonen**,  $J^{PC} = 0^{++}$ :



Wie wir sehen, fügen sich das Isosinglett  $f_0(1370)$  und das Isotriplett der  $a_0(1260)$ -Mesonen aus dem Fall  $N_f = 2$  in das Oktett ein. Die gegenüber diesem Fall neu hinzugekommenen vier skalaren  $K_0^*$ -Mesonen bilden zwei Isospin-Dubletts im Oktett. Das neue isoskalare Meson  $f_0(1710)$  bildet das Singlett. Die Massen und Isospin-Quantenzahlen dieser Mesonen sind:

$$\begin{aligned} f_0(1710) &: I = 0, & m_{f_0(1710)} &= 1720 \pm 6 \text{ MeV}, \\ K_0^*(1430) &: I = \frac{1}{2}, & m_{K_0^*} &= 1425 \pm 50 \text{ MeV}. \end{aligned}$$

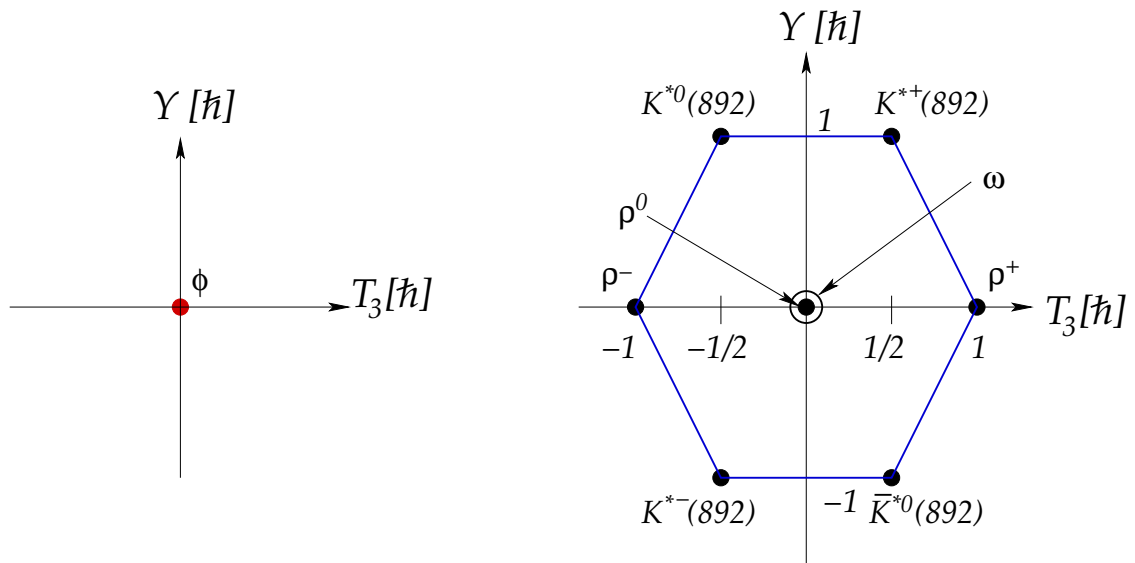
(ii) **Pseudoskalare Mesonen**,  $J^{PC} = 0^{-+}$ :



Wie wir sehen, fügen sich das Isosinglett  $\eta$  und das Isotriplett der Pionen aus dem Fall  $N_f = 2$  in das Oktett ein. Die gegenüber dem Fall  $N_f = 2$  neu hinzugekommenen vier pseudoskalaren  $K$ -Mesonen, oder kurz **Kaonen**, bilden zwei Isospin-Dubletts im Oktett. Das neue isoskalare  $\eta'$ -Meson bildet das Singlett. Die Massen und Isospin-Quantenzahlen dieser Mesonen sind:

$$\begin{aligned} \eta' & : I = 0 , & m_{\eta'} & = 957.78 \pm 0.06 \text{ MeV} , \\ K & : I = \frac{1}{2} , & m_{K^\pm} & = 493.677 \pm 0.013 \text{ MeV} , \\ & & m_{K^0} & = 497.614 \pm 0.022 \text{ MeV} . \end{aligned}$$

(iii) **Vektor-Mesonen**,  $J^{PC} = 1^{--}$ :

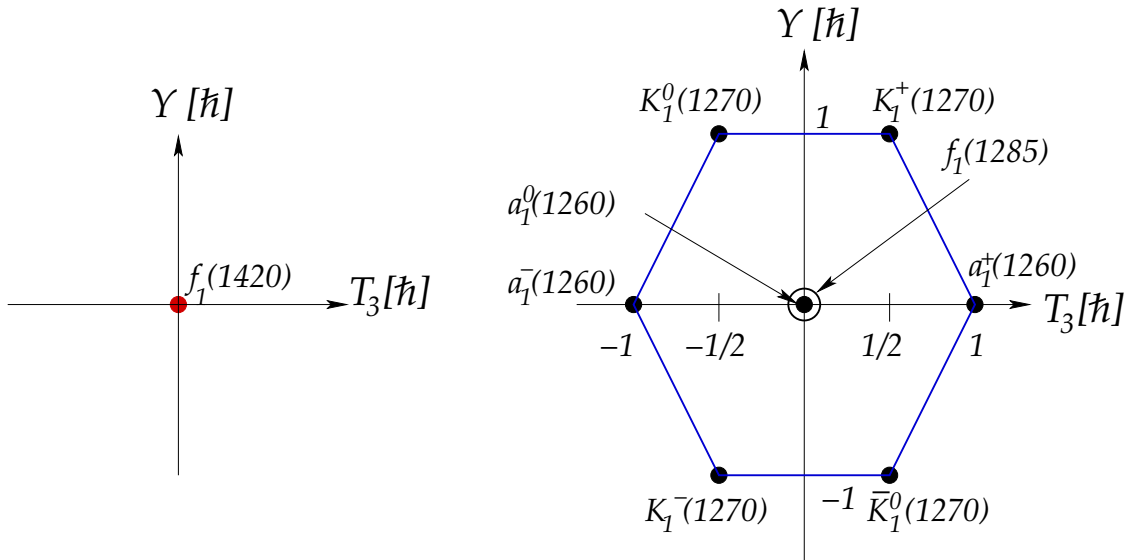


Wie wir sehen, fügen sich das Isosinglett  $\omega$  und das Isotriplett der  $\rho$ -Mesonen aus dem Fall  $N_f = 2$  in das Oktett ein. Die gegenüber diesem Fall neu hinzugekommenen vier vektoriellen  $K^*$ -Mesonen bilden zwei Isospin-Dubletts im Oktett. Das neue isoskalare  $\phi$ -Meson bildet das Singlett. Die Massen und Isospin-Quantenzahlen dieser Mesonen sind:

$$\begin{aligned} \phi & : I = 0 , & m_{\phi} & = 1019.455 \pm 0.020 \text{ MeV} , \\ K^* & : I = \frac{1}{2} , & m_{K^*} & = 891.66 \pm 0.26 \text{ MeV} . \end{aligned}$$

2 Symmetrien

(iv) **Axialvektor-Mesonen**,  $J^{PC} = 1^{++}$ :

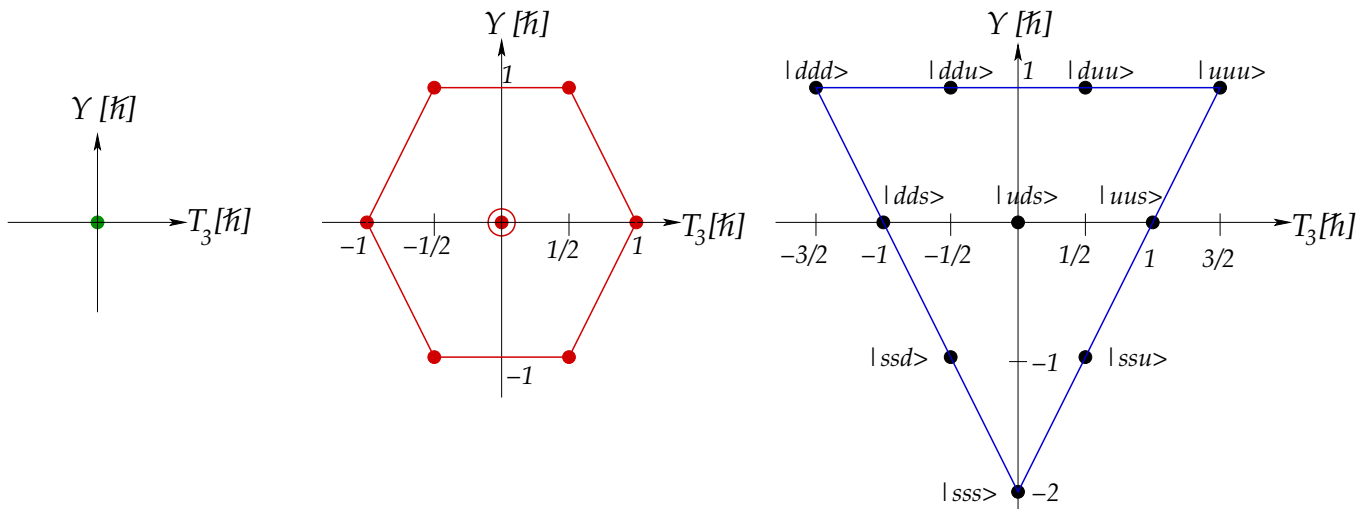


Das Isosinglett  $f_1(1285)$  und das Isotriplett der  $a_1$ -Mesonen aus dem Fall  $N_f = 2$  fügen sich in das Oktett ein. Die gegenüber dem Fall  $N_f = 2$  neu hinzugekommenen vier axialvektoriellen  $K_1$ -Mesonen bilden zwei Isospin-Dubletts im Oktett. Das neue isoskalare  $f_1(1420)$ -Meson bildet das Singlett. Die Massen und Isospin-Quantenzahlen dieser Mesonen sind:

$$f_1(1420) : I = 0, \quad m_{f_1(1420)} = 1426.4 \pm 0.9 \text{ MeV},$$

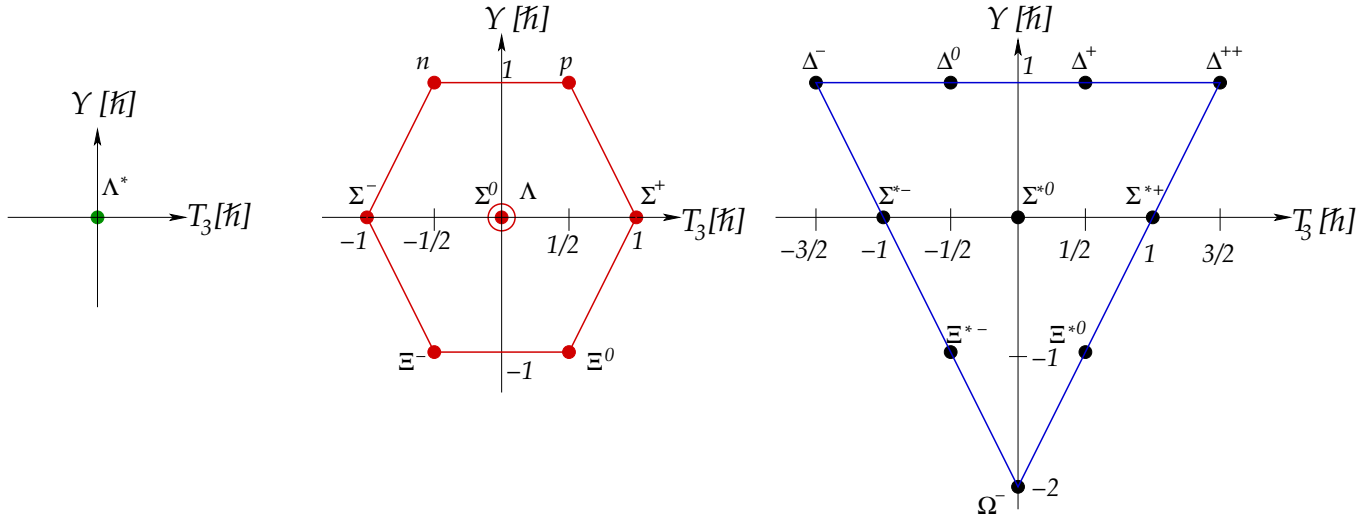
$$K_1 : I = \frac{1}{2}, \quad m_{K_1} = 1272 \pm 7 \text{ MeV}.$$

**Baryonen** bilden gemäß der Kopplungsregel (2.170) ein **Singlett**, zwei **Oktetts** und ein **Dekuplett**:



Es ist hier nur eins der beiden Oktetts gezeigt und es sind lediglich die Flavor-Inhalte der Zustände des Dekupletts angedeutet, ohne auf Symmetrisierung zu achten. Der Flavorinhalt der Zustände des Singletts und der beiden Oktetts ist im Prinzip der gleiche wie der der entsprechenden Zustände des Dekupletts, allerdings tauchen die Quarks in anderen Kombinationen auf, entsprechend der für diese Zustände erforderlichen Symmetrie unter Vertauschung. Wir können darauf an dieser Stelle nicht näher eingehen.

Wir geben noch die Zuordnung physikalischer Baryonen zu diesen Multipletts an:



Wir sehen, dass sich das Nukleonen-Isodublett in das Oktett einreicht und das  $\Delta$ -Isoquadruplett in das Dekuplett. Die neu gegenüber dem Fall  $N_f = 2$  hinzugekommenen Baryonen sind

$\Lambda$	: $I(J^P) = 0(\frac{1}{2}^+)$ ,	$m_\Lambda = 1115.683 \pm 0.006$ MeV ,
$\Sigma^+$	: $I(J^P) = 1(\frac{1}{2}^+)$ ,	$m_{\Sigma^+} = 1189.37 \pm 0.06$ MeV ,
$\Sigma^0$	: $I(J^P) = 1(\frac{1}{2}^+)$ ,	$m_{\Sigma^0} = 1192.642 \pm 0.024$ MeV ,
$\Sigma^-$	: $I(J^P) = 1(\frac{1}{2}^+)$ ,	$m_{\Sigma^-} = 1197.45 \pm 0.04$ MeV ,
$\Xi^0$	: $I(J^P) = \frac{1}{2}(\frac{1}{2}^+)$ ,	$m_{\Xi^0} = 1314.86 \pm 0.20$ MeV ,
$\Xi^-$	: $I(J^P) = \frac{1}{2}(\frac{1}{2}^+)$ ,	$m_{\Xi^-} = 1321.71 \pm 0.07$ MeV ,
$\Lambda^*$	: $I(J^P) = 0(\frac{1}{2}^+)$ ,	$m_{\Lambda^*} = 1630 \pm 70$ MeV ,
$\Sigma^{*+}$	: $I(J^P) = 1(\frac{3}{2}^+)$ ,	$m_{\Sigma^{*+}} = 1382.8 \pm 0.4$ MeV ,
$\Sigma^{*0}$	: $I(J^P) = 1(\frac{3}{2}^+)$ ,	$m_{\Sigma^{*0}} = 1383.7 \pm 1.0$ MeV ,
$\Sigma^{*-}$	: $I(J^P) = 1(\frac{3}{2}^+)$ ,	$m_{\Sigma^{*-}} = 1387.2 \pm 0.5$ MeV ,
$\Xi^{*0}$	: $I(J^P) = \frac{1}{2}(\frac{3}{2}^+)$ ,	$m_{\Xi^{*0}} = 1531.78 \pm 0.34$ MeV ,
$\Xi^{*-}$	: $I(J^P) = \frac{1}{2}(\frac{3}{2}^+)$ ,	$m_{\Xi^{*-}} = 1535.2 \pm 0.8$ MeV ,
$\Omega^-$	: $I(J^P) = 0(\frac{3}{2}^+)$ ,	$m_{\Omega^-} = 1672.43 \pm 0.32$ MeV .

Die entsprechenden **Anti-Baryonen** ordnen sich in ein Singlett, zwei Anti-Oktetts (die aber dieselbe Form haben wie die Oktetts) und ein Anti-Dekuplett ein. Neben diesen

Baryonen gibt es eine Fülle weiterer angeregter Zustände sowie solcher mit negativer Parität. Aufgrund der identischen Flavor-Zusammensetzung müssen sich jedoch auch diese Zustände in Singlett, zwei Oktetts und einem Dekuplett wiederfinden. Details findet man in den Tabellenwerken der Particle Data Group [10].

Die vormals empirisch gefundenen Ladungsformeln (2.201) und (2.203) lassen sich jetzt mit Hilfe der Hyperladung auf **alle**  $SU(3)$ -Multipletts verallgemeinern,

$$Q = e \left( T_3 + \frac{1}{2} Y \right) . \quad (2.204)$$

Dies ist die sog. **Gell-Mann–Nishijima–Formel**. Man prüft nach, dass sie **sowohl für Mesonen- als auch für Baryonen-Multipletts** Gültigkeit besitzt. Wenn sie für alle  $SU(3)$ -Multipletts gilt, sollte sie auch für das Triplett gelten. Daraus folgt

$$\begin{aligned} Q_u &= e \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{3} \right) = \frac{2}{3} e , \\ Q_d &= e \left( -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{3} \right) = -\frac{1}{3} e , \\ Q_s &= e \left( 0 - \frac{1}{2} \cdot \frac{2}{3} \right) = -\frac{1}{3} e . \end{aligned} \quad (2.205)$$

Die systematische Anordnung der Hadronen in  $SU(3)$ -Flavor-Multipletts und ihre Interpretation als Quark-Anti-Quark- (Mesonen) bzw. Drei-Quark-Zustände (Baryonen) geht auf Murray Gell-Mann zurück. Aufgrund dieser Erkenntnisse schlug er die Existenz von Quarks als “Bausteine” der Hadronen vor.

Wäre die  $SU(3)$ -Flavor-Symmetrie **exakt**, so müßten alle Hadronen eines gegebenen Multipletts in ihrer Masse **entartet** sein. Dies ist offensichtlich nicht der Fall. Wir erkennen jedoch, dass die **Isospin-Symmetrie**, d.h. die Massenentartung innerhalb eines Isospin-Multipletts eines  $SU(3)$ -Flavor-Multipletts immer noch in sehr guter Näherung gegeben ist. Abweichungen hiervon sind von der Größenordnung der Massendifferenz zwischen up- und down-Quark. Ganz analog ist die Verletzung der  $SU(3)$ -Flavor-Symmetrie, d.h. die **Massendifferenz** zwischen verschiedenen Isospin-Multipletts innerhalb eines  $SU(3)$ -Flavor-Multipletts, von der Größenordnung der Massendifferenz zwischen up- bzw. down- und strange-Quark. Für die Baryonen gilt z.B.

$$\begin{aligned} m_\Lambda - m_N &\simeq 176.76 \text{ MeV} , \\ m_\Xi - m_\Lambda &\simeq 202.60 \text{ MeV} , \\ m_{\Sigma^*} - m_\Delta &\simeq 152.57 \text{ MeV} , \\ m_{\Xi^*} - m_{\Sigma^*} &\simeq 148.92 \text{ MeV} , \\ m_\Omega - m_{\Xi^*} &\simeq 138.94 \text{ MeV} , \end{aligned}$$

wobei wir innerhalb eines Isospin-Multipletts gemittelte Werte zugrunde gelegt haben. Offensichtlich steigt die Masse der Baryonen proportional zur Zahl der jeweils in ihnen enthaltenen strange-Quarks um einen Betrag von der Größenordnung der Masse des strange-Quarks.

Diese Systematik läßt sich auch in einer empirischen Formel ausdrücken. Dazu schreiben wir den Hamilton-Operator der QCD symbolisch in der Form

$$\hat{H}_{\text{QCD}} = \hat{H}_{SU(3)} + \hat{H}_{\text{FSB}} , \quad (2.206)$$

wobei der erste Anteil,  $\hat{H}_{SU(3)}$ , unter  $SU(3)$ -Flavor-Transformationen **invariant** sein soll, und der zweite Anteil,  $\hat{H}_{\text{FSB}}$ , die  $SU(3)$ -Flavor-Symmetrie **explizit** brechen soll. Falls  $\hat{H}_{\text{FSB}} = 0$  ist, müssen alle Hadronen eines  $SU(3)$ -Flavor-Multipletts **identische** Massen haben, da  $\hat{H}_{SU(3)}$  nur von den Casimir-Operatoren  $\hat{C}_1, \hat{C}_2$  der  $SU(3)$  abhängen kann, die auf einem gegebenen Multiplett stets den gleichen Eigenwert haben. Den Eigenwert von  $\hat{H}_{SU(3)}$  auf einem gegebenen Multiplett nennen wir im folgenden  $a = \text{const.}$

Die beobachtete Massenverletzung innerhalb eines  $SU(3)$ -Flavor-Multipletts ist proportional zur Zahl der strange-Quarks bzw. zur **Hyperladung** eines jeweiligen Isospin-Multipletts. Dagegen ist die Isospin-Invarianz auf diesem Isospin-Multiplett (näherungsweise) immer noch erfüllt. Der symmetriebrechende Anteil  $\hat{H}_{\text{FSB}}$  muss daher einerseits proportional zu  $\hat{Y}$  (oder höheren Potenzen von  $\hat{Y}$ ) sein, und kann andererseits vom Casimir-Operator  $\hat{T}^2$  der Isospin-Gruppe abhängen. Wir machen daher den Ansatz

$$\hat{H}_{\text{FSB}} = b\hat{Y} + c\left(\hat{T}^2 - \frac{1}{4}\hat{Y}^2\right). \quad (2.207)$$

Falls wir ebenfalls die Isospin-Verletzung berücksichtigen wollten, müßten wir noch einen Anteil  $\sim \hat{T}_3$  hinzunehmen. Die Glgen. (2.206) und (2.207) implizieren, dass die Masse eines Hadrons auf einem gegebenen  $SU(3)$ -Flavor-Multiplett sich (in natürlichen Einheiten) aus der Formel

$$m = a + bY + c\left[T(T+1) - \frac{1}{4}Y^2\right] \quad (2.208)$$

berechnen läßt, wobei die Konstanten  $a, b, c$  für jedes Multiplett verschiedene Werte annehmen. Gleichung (2.208) ist die sog. **Gell-Mann-Okubo-Massenformel**. Wir überprüfen ihre Gültigkeit am Baryonenoktett. Es gilt für die verschiedenen Isospin-Multipletts innerhalb des Baryonenoktetts

$$\begin{aligned} m_N &= a + b + c\left(\frac{3}{4} - \frac{1}{4}\right) = a + b + \frac{c}{2}, \\ m_\Lambda &= a, \\ m_\Sigma &= a + c(2 - 0) = a + 2c, \\ m_\Xi &= a - b + c\left(\frac{3}{4} - \frac{1}{4}\right) = a - b + \frac{c}{2}. \end{aligned}$$

Durch Bilden von Linearkombinationen kann man die Konstante  $b$  eliminieren,

$$\frac{1}{2}(m_N + m_\Xi) = a + \frac{c}{2} = \frac{3}{4}m_\Lambda + \frac{1}{4}m_\Sigma.$$

Diese Gleichung ist in guter Näherung erfüllt, denn es ist

$$\frac{1}{2}(m_N + m_\Xi) \simeq 1128.60 \text{ MeV} \simeq 1135.05 \text{ MeV} \simeq \frac{3}{4}m_\Lambda + \frac{1}{4}m_\Sigma.$$

Die Abweichung beträgt nur etwa 6.5 MeV, ist also in der Größenordnung der Isospin-Verletzung, die in der Gell-Mann–Okubo-Formel (2.208) nicht berücksichtigt ist.

Für das Dekuplett berechnen wir

$$\begin{aligned} m_{\Delta} &= a + b + c \left( \frac{3}{2} \cdot \frac{5}{2} - \frac{1}{4} \right) = a + b + \frac{7}{2} c, \\ m_{\Sigma^*} &= a + c(2 - 0) = a + 2c, \\ m_{\Xi^*} &= a - b + c \left( \frac{3}{4} - \frac{1}{4} \right) = a - b + \frac{c}{2}, \\ m_{\Omega} &= a - 2b + c(0 - 1) = a - 2b - c. \end{aligned}$$

Dies führt auf die Gleichungen

$$\frac{1}{2}(m_{\Delta} + m_{\Xi^*}) = a + 2c \equiv m_{\Sigma^*} \equiv 2m_{\Xi^*} - m_{\Omega},$$

die ebenfalls in sehr guter Näherung erfüllt sind:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(m_{\Delta} + m_{\Xi^*}) &\simeq 1382.75 \text{ MeV}, \\ m_{\Sigma^*} &\simeq 1384.57 \text{ MeV}, \\ 2m_{\Xi^*} - m_{\Omega} &\simeq 1394.55 \text{ MeV}. \end{aligned}$$

3.7.2012

### 2.5.6 Charm und $SU(4)$ –Flavor-Symmetrie

Die Überlegungen zur  $SU(3)$ –Flavor-Symmetrie der Starken Wechselwirkung lassen sich auch auf das charm-Quark (und im Prinzip auch auf bottom- und top-Quark) erweitern. Allerdings ist die  $SU(4)$ –Flavor-Symmetrie aufgrund der großen Masse des charm-Quarks,

$$m_c \simeq 1.266 \text{ GeV} \gg m_s \simeq 105 \text{ MeV},$$

noch stärker explizit gebrochen als die  $SU(3)$ . Die Massendifferenz  $\delta m_{cs} = m_c - m_s \simeq 1.161 \text{ GeV} \sim M_h$  ist jetzt sogar in der Größenordnung der hadronischen Massenskala.

Die Generatoren der  $SU(4)$  sind (in direkter Verallgemeinerung der Generatoren der  $SU(3)$  und in natürlichen Einheiten,  $\hbar = 1$ )

$$\hat{T}_a = \frac{1}{2} \hat{\lambda}_a, \quad a = 1, \dots, 15,$$

mit

$$\begin{aligned} \hat{\lambda}_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \hat{\lambda}_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \hat{\lambda}_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{\lambda}_4 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \hat{\lambda}_5 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \hat{\lambda}_6 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$



$$\hat{\lambda}_7 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\lambda}_8 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.209)$$

$$\hat{\lambda}_9 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\lambda}_{10} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\lambda}_{11} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{\lambda}_{12} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\lambda}_{13} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\lambda}_{14} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix},$$

sowie

$$\hat{\lambda}_{15} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}. \quad (2.210)$$

Die Strukturkonstanten der  $SU(4)$  lassen sich wieder aus den Glgen. (2.131) und (2.134) berechnen; wir überlassen dies als Übungsaufgabe.

Die Gruppe  $SU(4)$  hat drei Cartan-Generatoren,

$$\{\hat{T}_3, \hat{T}_8, \hat{T}_{15}\},$$

und, da sie eine halbeinfache Lie-Gruppe ist, ebenfalls drei Casimir-Operatoren,

$$\{\hat{C}_1, \hat{C}_2, \hat{C}_3\}.$$

Zustände von  $SU(4)$ -Multipletts sind daher durch die Eigenwerte der Casimir- und Cartan-Generatoren charakterisiert,

$$|C_1 C_2 C_3 T_3 T_8 T_{15}\rangle. \quad (2.211)$$

Aus historischen Gründen verfährt man zur Klassifizierung der Zustände allerdings ein wenig anders. Wir gehen dazu zunächst einen Schritt zurück und betrachten die Gruppe  $SU(3)$ . Man definiert den **Strangeness-Operator** durch die Relation

$$\hat{Y} \equiv \hat{B} + \hat{S}, \quad (2.212)$$

wobei  $\hat{Y}$  der Hyperladungs-Operator und  $\hat{B}$  der **Baryonenzahl-Operator** sind. Für Mesonen gilt  $B = 0$  und für Baryonen  $B = 1$  (Anti-Baryonen  $B = -1$ ). Quarks tragen daher  $B = 1/3$  und Anti-Quarks  $B = -1/3$ . Der Strangeness-Operator  $\hat{S} = \hat{Y} - \hat{B}$  lautet dann in der fundamentalen Darstellung (und in natürlichen Einheiten)

$$\hat{S} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} - \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Hierbei haben wir benutzt, dass die Baryonenzahl der fundamentalen Darstellung (also für Quarks)  $B = 1/3$  beträgt und dementsprechend  $\hat{B} = \frac{1}{3} \mathbb{1}_3$ . Damit gilt

$$\begin{aligned}\hat{S}|u\rangle &= \hat{S} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0, \\ \hat{S}|d\rangle &= \hat{S} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0, \\ \hat{S}|s\rangle &= \hat{S} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -1|s\rangle.\end{aligned}$$

Up- und down-Quarks haben also Strangeness  $S = 0$ , während strange-Quarks Strangeness  $S = -1$  tragen. Das Minuszeichen ist lediglich eine historisch bedingte Konvention. Der Strangeness-Operator mißt also ausschließlich die Zahl der strange-Quarks in einem hadronischen Zustand.  $SU(3)$ -Flavor-Zustände können also anstelle von  $Y$  bei Angabe von  $B$  auch durch ihre Strangeness-Quantenzahl  $S$  charakterisiert werden,

$$|C_1 C_2 T_3 Y\rangle \longrightarrow |C_1 C_2 B T_3 S\rangle.$$

Für  $SU(4)$  verfährt man ganz ähnlich. Wir verallgemeinern die Relation (2.212) durch Einführung des sog. **Charm-Operators**  $\hat{C}$ ,

$$\hat{Y} = \hat{B} + \hat{S} + \hat{C}, \quad (2.213)$$

wobei

$$\hat{C} = \frac{3}{4}\hat{B} - \sqrt{\frac{3}{2}}\hat{T}_{15}. \quad (2.214)$$

In fundamentaler Darstellung lautet dieser Operator

$$\hat{C} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.215)$$

Der Charm-Operator mißt die Anzahl von charm-Quarks in einem Zustand. Charm-Quarks selbst tragen wegen

$$\hat{C}|c\rangle = \hat{C} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 1|c\rangle$$

die Charm-Quantenzahl  $C = +1$ . (Man beachte das gegenüber der Strangeness-Quantenzahl umgekehrte Vorzeichen.)

Bei Vorgabe von  $B$  kann man also anstelle von  $T_8$  und  $T_{15}$  in Gl. (2.211) auch  $S$  und  $C$  zur Klassifizierung von  $SU(4)$ -Zuständen verwenden,

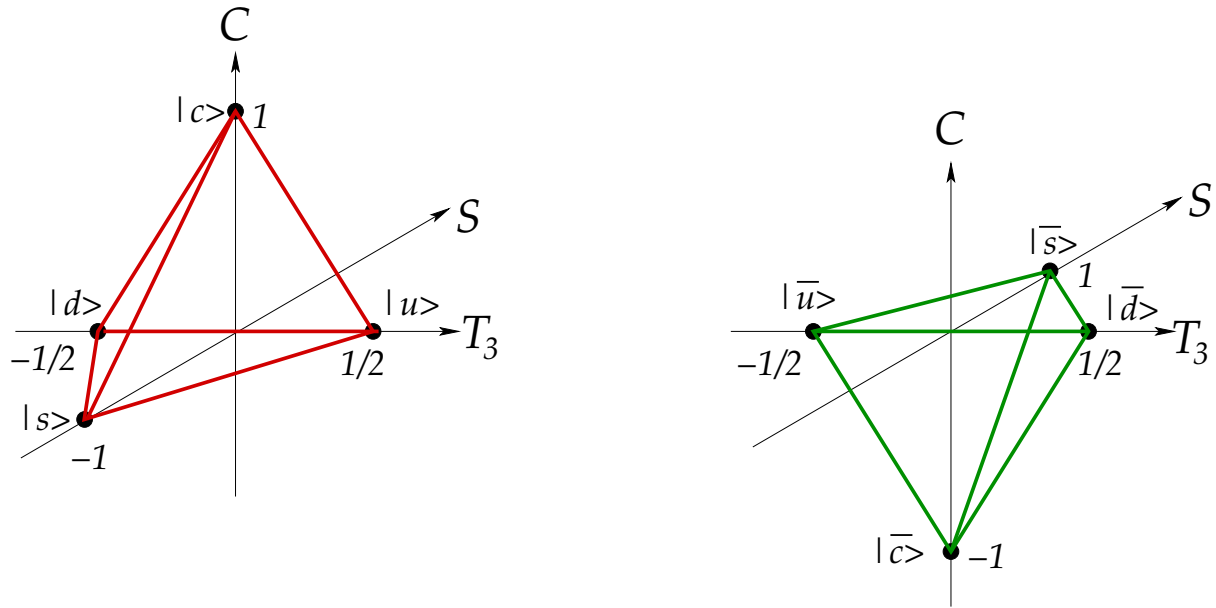
$$|C_1 C_2 C_3 T_3 T_8 T_{15}\rangle \longrightarrow |C_1 C_2 C_3 B T_3 S C\rangle .$$

Die Gell-Mann–Nishijima–Ladungsformel ist nach wie vor durch Gl. (2.204) gegeben, wenn wir für die Hyperladung Gl. (2.213) verwenden. Für das fundamentale  $SU(4)$ -Quadruplett sind alle relevanten Quantenzahlen in Tabelle 2.3 aufgeführt.

	$B$	$T_3$	$S$	$C$	$Y$	$Q[e]$
$u$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}$	0	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$
$d$	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{2}$	0	0	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$
$s$	$\frac{1}{3}$	0	-1	0	$-\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{3}$
$c$	$\frac{1}{3}$	0	0	1	$\frac{4}{3}$	$\frac{2}{3}$

Tabelle 2.3: Quantenzahlen des  $SU(4)$ -Quadrupletts.

$SU(4)$ -Flavor-Multipletts können im **dreidimensionalen**  $(T_3 - S - C)$ -Raum dargestellt werden, z.B. das **Quadruplett** [4] und das **Anti-Quadruplett** [4]:



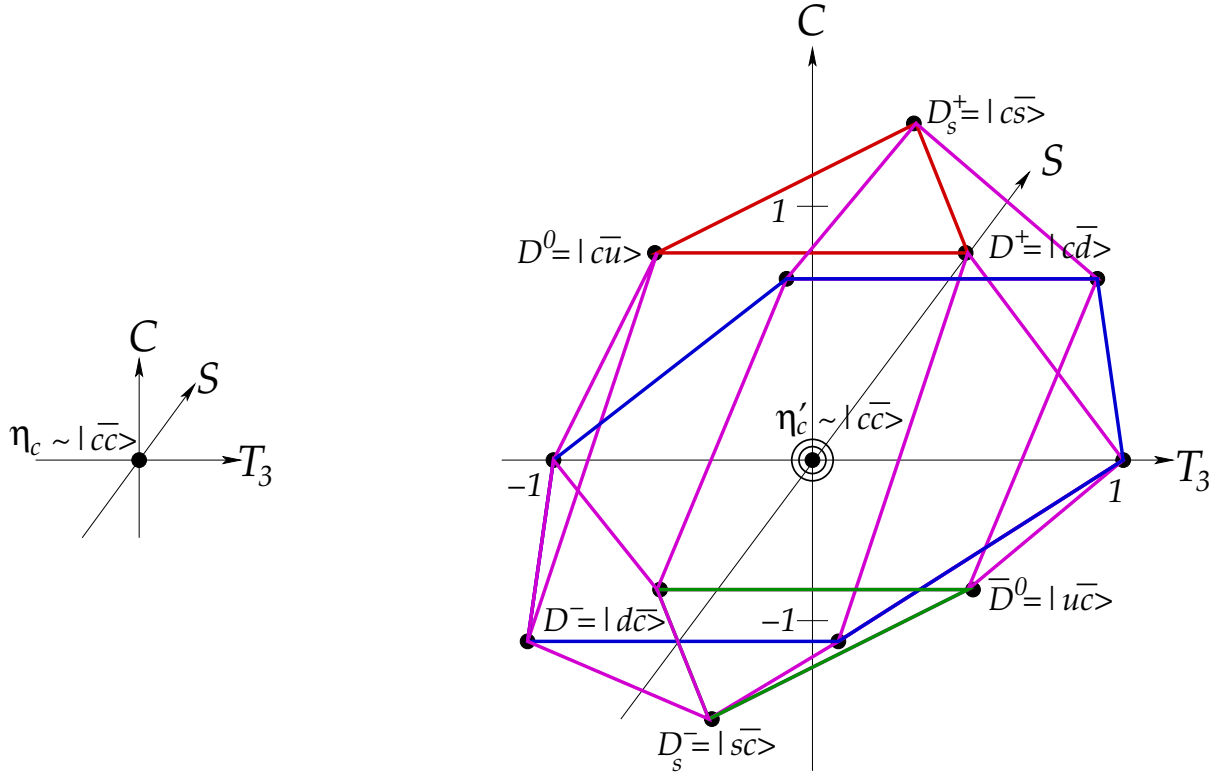
Man erkennt in der  $(T_3 - S)$ -Ebene die  $SU(3)$ -Unter-Multipletts bestehend up-, down- und strange-Quark (Triplet) bzw. aus den entsprechenden Anti-Quarks (Anti-Triplett).

Höhere Multipletts können wieder durch Kopplung fundamentaler Quadrupletts generiert werden. Wir geben (ohne Beweis) die wichtigsten Kopplungsregeln an:

$$[4] \otimes [\bar{4}] = [1] \oplus [15] ,$$

$$[4] \otimes [4] \otimes [4] = [\bar{4}] \oplus [20] \oplus [20] \oplus [20'] .$$

Demnach findet man Mesonen in  $SU(4)$ -Singletts bzw. -Oktetts und Baryonen in  $SU(4)$ -Anti-Quadrupletts, sowie drei 20-pletts. Für die pseudoskalaren Mesonen ist dies exemplarisch in nachfolgender Abbildung dargestellt:



Man erkennt im 15-plett ein Oktett (blau) bei  $C = 0$ . Dies ist das bereits aus der  $SU(3)$ -Flavor-Symmetrie bekannte Oktett der pseudoskalaren Mesonen. Die einzelnen Zustände sind nicht mehr explizit gekennzeichnet. Neu hinzukommen ein  $SU(3)$ -Triplet (grün) bei  $C = -1$  und ein  $SU(3)$ -Anti-Triplett (rot) bei  $C = 1$ . Die entsprechenden Zustände sind

$$\begin{aligned}
 D^\pm & : I(J^{PC}) = \frac{1}{2}(0^{-+}) , \quad m_{D^\pm} = 1869.5 \pm 0.4 \text{ MeV} , \\
 D^0 & : I(J^{PC}) = \frac{1}{2}(0^{-+}) , \quad m_{D^0} = 1864.91 \pm 0.17 \text{ MeV} , \\
 D_s^\pm & : I(J^{PC}) = 0(0^{-+}) , \quad m_{D_s^\pm} = 1969.0 \pm 1.4 \text{ MeV} , \\
 D_s^0 & : I(J^{PC}) = 0(0^{-+}) , \quad m_{D_s^0} = 1864.91 \pm 0.17 \text{ MeV} , \\
 \eta_c & : I(J^{PC}) = 0(0^{-+}) , \quad m_{\eta_c} = 2981.0 \pm 1.1 \text{ MeV} , \\
 \eta_c' & : I(J^{PC}) = 0(0^{-+}) , \quad m_{\eta_c'} = 3638.9 \pm 1.3 \text{ MeV} .
 \end{aligned}$$

Das dem  $SU(4)$ -Singlett, dem  $\eta_c$ , entsprechende Vektormeson, das  $J/\Psi$ -Meson ( $m_{J/\Psi} = 3096.916 \pm 0.011 \text{ MeV}$ ) war das erste charm-tragende Teilchen, das experimentell entdeckt wurde, und zwar 1974 von Samuel Ting am Alternating Gradient Synchrotron (AGS) des Brookhaven National Laboratory (BNL) auf Long Island. Er wurde dafür (zusammen mit Burton Richter vom Stanford Linear Accelerator Center, SLAC) mit dem Nobelpreis 1976 ausgezeichnet.

# 3 Pfadintegrale

Die Methode der **Pfadintegrale** stellt einen alternativen Zugang zur Beschreibung quantenmechanischer und quantenfeldtheoretischer Systeme dar. Die zugrundeliegende Idee ist, dass ein quantenmechanisches Teilchen nicht nur die klassische Trajektorie (die die Wirkung extremalisiert) von Punkt  $\vec{q}_a$  nach Punkt  $\vec{q}_b$  durchlaufen kann, sondern, gewichtet mit einer komplexen Phase, auch alle anderen möglichen Wege. Die quantenmechanische Übergangsamplitude ergibt sich dann als "Pfadintegral", d.h. als kohärente Superposition all dieser Phasenfaktoren.

## 3.1 Dynamik klassischer Teilchen

### 3.1.1 Das Hamiltonsche Prinzip

Wie wir aus der Vorlesung "Mechanik II" wissen, beschreibt man in der klassischen Physik die Dynamik eines Teilchens mit Hilfe des **Hamiltonschen Wirkungsprinzips**,

$$\delta S[\vec{q}(t)] = 0, \quad (3.1)$$

wobei

$$S[\vec{q}(t)] = \int_{t_a}^{t_b} dt L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) \quad (3.2)$$

die **Wirkung** auf der Trajektorie eines Teilchens, welche im Zeitintervall  $[t_a, t_b]$  durchlaufen wird, und  $L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t)$  die **Lagrange-Funktion** des Systems darstellen. Hier bezeichnet  $\vec{q}$  den Vektor der (generalisierten) Koordinaten des Teilchens und  $\dot{\vec{q}}$  den zugehörigen Geschwindigkeitsvektor.

Das Hamiltonsche Prinzip (3.1) besagt, dass die tatsächlich durchlaufene Trajektorie diejenige ist, die einem **Extremum** oder einem **stationären Punkt** der Wirkung (3.2) entspricht. Dabei vergleicht man die Wirkung auf einer **Konkurrenzschar** von Trajektorien im Ortsraum, vgl. Abb. 3.1. Die Konkurrenzschar besteht aus allen Trajektorien mit **fest gehaltenen Anfangs- und Endkoordinaten**  $\vec{q}(t_a) \equiv \vec{q}_a$ ,  $\vec{q}(t_b) \equiv \vec{q}_b$ . Die **klassische Trajektorie** ist diejenige, die die Wirkung stationär macht.

Gleichung (3.1) führt nach den Gesetzen der Variationsrechnung auf die **Euler-Lagrange-Gleichungen**

$$0 = \frac{d}{dt} \frac{\partial L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t)}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t)}{\partial q_i}, \quad i = x, y, z, \quad (3.3)$$

die den Newtonschen Bewegungsgleichungen vollkommen äquivalent sind. Sind die Anfangsbedingungen

$$\vec{q}_a \equiv \vec{q}(t_a), \quad \dot{\vec{q}}_a \equiv \dot{\vec{q}}(t_a),$$

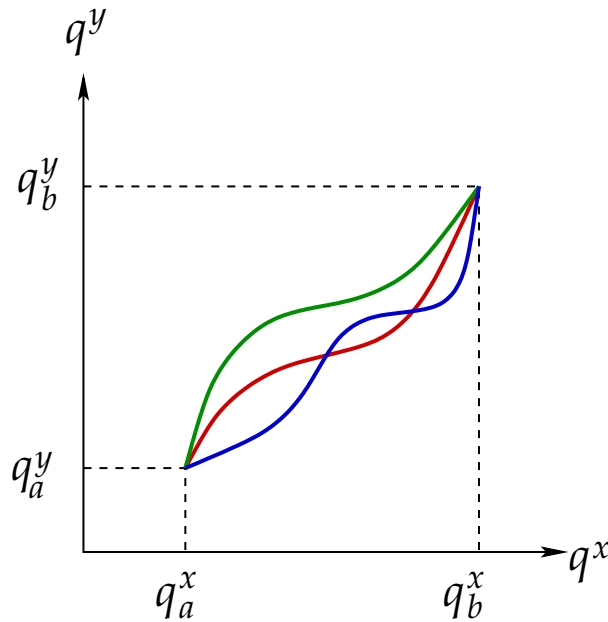


Abbildung 3.1: Konkurrenzscharen von Trajektorien in der Projektion des Ortsraum auf die  $(q^x - q^y)$ -Ebene.

bekannt, so kann man den Ort  $\vec{q}(t_b)$  und die Geschwindigkeit  $\dot{\vec{q}}(t_b)$  des Teilchens durch Lösen der Euler-Lagrange-Gleichungen zu jedem beliebigen späteren Zeitpunkt  $t_b$  bestimmen. Dies legt die **Trajektorie**  $\vec{q}(t)$ , die das Teilchen durchläuft und für die man die Wirkung (3.2) berechnet, **eindeutig** fest.

### 3.1.2 Das modifizierte Hamiltonsche Prinzip

Eine Alternative zum Hamiltonschen Prinzip ist das **modifizierte Hamiltonsche Prinzip**

$$0 = \delta S[\vec{q}(t), \vec{p}(t)] = \delta \int_{t_a}^{t_b} dt \left[ \vec{p} \cdot \dot{\vec{q}} - H(\vec{q}, \vec{p}, t) \right], \quad (3.4)$$

vgl. Gl. (2.22) der Vorlesung “Analytische Mechanik und Spezielle Relativitätstheorie”. Hier ersetzt man in Gl. (3.2) die Lagrange-Funktion durch ihre Legendre-Transformierte,

$$L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) = \vec{p} \cdot \dot{\vec{q}} - H(\vec{q}, \vec{p}, t), \quad (3.5)$$

mit der **Hamilton-Funktion**  $H(\vec{q}, \vec{p}, t)$ . Im Unterschied zum Hamiltonschen Prinzip betrachtet man nun eine Konkurrenzscharen von Trajektorien im **Phasenraum**, vgl. Abb. 3.2. Man beachte, dass hier die Koordinaten von Anfangs- und Endpunkt festgehalten werden,  $\vec{q}(t_a) \equiv \vec{q}_a$ ,  $\vec{q}(t_b) \equiv \vec{q}_b$ , aber dass die Werte  $\vec{p}(t_a)$ ,  $\vec{p}(t_b)$  des Impulses frei variiert werden dürfen.

Die klassische Trajektorie ist dann diejenige, welche die **kanonischen Gleichungen** erfüllt,

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H(\vec{q}, \vec{p}, t)}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H(\vec{q}, \vec{p}, t)}{\partial q_i}, \quad i = x, y, z, \quad (3.6)$$

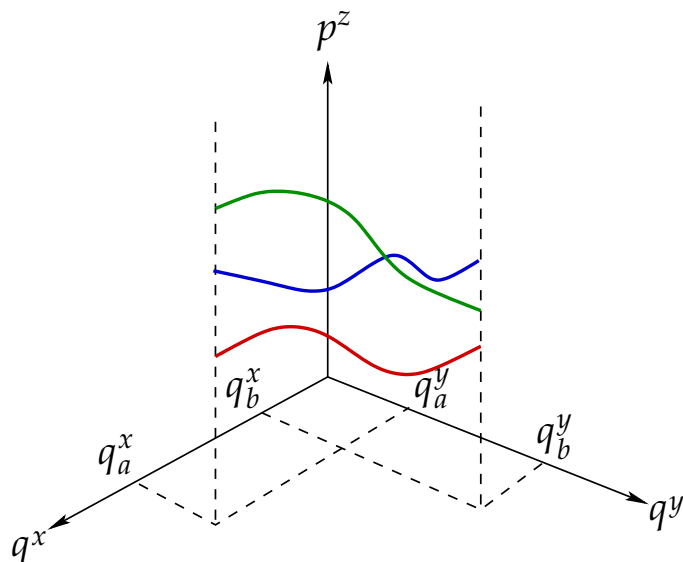


Abbildung 3.2: Konkurrenz von Trajektorien in der Projektion des Phasenraum auf den dreidimensionalen  $(q^x - q^y - p^z)$ -Unterraum.

welche vollkommen äquivalent zu den Euler-Lagrange-Gleichungen (3.3) sind.

## 3.2 Dynamik quantenmechanischer Teilchen

In der Quantenmechanik ist aufgrund der Heisenbergschen Unbestimmtheitsrelation die gleichzeitige Kenntnis von Ort und Geschwindigkeit (bzw. Impuls) nicht möglich. Die zentrale Größe ist nun der **quantenmechanische Überlapp**

$$\langle \vec{q}_b, t_b | \vec{q}_a, t_a \rangle, \quad (3.7)$$

welcher der **Amplitude** für einen Übergang vom Zustand  $|\vec{q}_a, t_a\rangle$  zum Zeitpunkt  $t_a$  in einen Zustand  $|\vec{q}_b, t_b\rangle$  zum Zeitpunkt  $t_b$  entspricht, Das Betragsquadrat

$$|\langle \vec{q}_b, t_b | \vec{q}_a, t_a \rangle|^2 \quad (3.8)$$

gibt die **Wahrscheinlichkeit** für einen solchen Übergang an. Mit anderen Worten, es ist die Wahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen zum Zeitpunkt  $t_b$  am Ort  $\vec{q}_b$  zu finden, wenn es sich zum Zeitpunkt  $t_a$  am Ort  $\vec{q}_a$  aufgehalten hat.

Wir wollen nun die Amplitude (3.7) in etwas anderer Form schreiben. Der Zeitentwicklungsoperator lautet

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{T} \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \right]. \quad (3.9)$$

Ein Schrödinger-Zustand  $|\psi(t)\rangle_S$  stimmt zum Zeitpunkt  $t_0$  mit dem entsprechenden Heisenberg-Zustand  $|\psi\rangle_H$  überein,

$$|\psi(t_0)\rangle_S = |\psi\rangle_H.$$

### 3 Pfadintegrale

Mit Hilfe des Zeitentwicklungsoperators (3.9) lautet die Zeitentwicklung dieses Zustands

$$|\psi(t)\rangle_S = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle_S \equiv \hat{U}(t, t_0) |\psi\rangle_H .$$

Die zugehörige **Wellenfunktion** ergibt sich durch Projektion auf einen Ortsraumzustand,

$$\psi(\vec{q}, t) \equiv \langle \vec{q} | \psi(t) \rangle_S = \langle \vec{q} | \hat{U}(t, t_0) |\psi\rangle_H \equiv \langle \vec{q}, t | \psi \rangle_H ,$$

wobei wir den **zeitabhängigen Ortsraumzustand**

$$|\vec{q}, t\rangle \equiv \hat{U}(t_0, t) |\vec{q}\rangle \quad (3.10)$$

eingeführt haben. Damit läßt sich die Amplitude (3.7) nun wie folgt schreiben:

$$\begin{aligned} \langle \vec{q}_b, t_b | \vec{q}_a, t_a \rangle &= \langle \vec{q}_b | \hat{U}^\dagger(t_0, t_b) \hat{U}(t_0, t_a) | \vec{q}_a \rangle = \langle \vec{q}_b | \hat{U}(t_b, t_0) \hat{U}(t_0, t_a) | \vec{q}_a \rangle \\ &\equiv \langle \vec{q}_b | \hat{U}(t_b, t_a) | \vec{q}_a \rangle , \end{aligned} \quad (3.11)$$

wobei wir die Konvolutionseigenschaft

$$\hat{U}(t_b, t_0) \hat{U}(t_0, t_a) \equiv \hat{U}(t_b, t_a) \quad (3.12)$$

des Zeitentwicklungsoperators ausgenutzt haben, vgl. Gl. (3.76) der Vorlesung ‘‘Quantenmechanik I’’. Gleichung (3.11) bildet den Ausgangspunkt für die sog. **Pfadintegralformulierung** der quantenmechanischen Übergangsamplitude (3.7), die wir im nächsten Abschnitt herleiten.

### 3.3 Pfadintegralformulierung im Phasenraum

Wir zerlegen das Zeitintervall  $[t_a, t_b]$  in  $N$  gleich große Teilstücke der Länge  $\tau$ ,  $t_b - t_a = N \tau$ , so dass

$$t_n = t_a + n\tau , \quad n = 0, \dots, N , \quad t_0 = t_a , \quad t_N = t_b .$$

Unter Benutzung der Konvolutionseigenschaft (3.12) schreiben wir

$$\hat{U}(t_b, t_a) = \hat{U}(t_b, t_{N-1}) \hat{U}(t_{N-1}, t_{N-2}) \cdots \hat{U}(t_2, t_1) \hat{U}(t_1, t_a) \equiv \prod_{n=1}^N \hat{U}(t_n, t_{n-1}) , \quad (3.13)$$

so dass Gl. (3.11) die Form

$$\langle \vec{q}_b, t_b | \vec{q}_a, t_a \rangle = \langle \vec{q}_b | \prod_{n=1}^N \hat{U}(t_n, t_{n-1}) | \vec{q}_a \rangle \quad (3.14)$$

annimmt. Wir fügen nun zwischen jeden der Zeitentwicklungsoperatoren links einen vollständigen Satz von Orts- und rechts einen vollständigen Satz von Impulseigenzuständen ein. Um die einzelnen Sätze zu unterscheiden, numerieren wir sie entsprechend den zugehörigen Zeitschritten  $t_n$  durch,

$$\mathbb{1} = \int d^3 \vec{q}_n |\vec{q}_n\rangle \langle \vec{q}_n| , \quad \mathbb{1} = \int d^3 \vec{p}_n |\vec{p}_n\rangle \langle \vec{p}_n| , \quad n = 1, \dots, N . \quad (3.15)$$



Damit wird aus Gl. (3.14)

$$\begin{aligned} \langle \vec{q}_b, t_b | \vec{q}_a, t_a \rangle &= \int \prod_{n=1}^N d^3 \vec{q}_n d^3 \vec{p}_n \langle \vec{q}_b | \vec{q}_N \rangle \langle \vec{q}_N | \hat{U}(t_N, t_{N-1}) | \vec{p}_N \rangle \langle \vec{p}_N | \vec{q}_{N-1} \rangle \\ &\times \langle \vec{q}_{N-1} | \hat{U}(t_{N-1}, t_{N-2}) | \vec{p}_{N-1} \rangle \langle \vec{p}_{N-1} | \vec{q}_{N-2} \rangle \cdots \langle \vec{q}_1 | \hat{U}(t_1, t_a) | \vec{p}_1 \rangle \langle \vec{p}_1 | \vec{q}_a \rangle . \end{aligned} \quad (3.16)$$

Für  $N \rightarrow \infty$  werden die Teilstücke  $\tau$  infinitesimal klein,  $\tau \rightarrow 0$ , so dass man zunächst das Integral im Exponenten des Zeitentwicklungsoperators nach dem Mittelwertsatz der Integralrechnung approximieren,

$$\int_{t_{n-1}}^{t_n} dt' \hat{H}(t') = \tau \hat{H}(t_{n-1} + \lambda \tau) + O(\tau^2), \quad \lambda \in [0, 1],$$

und sodann die Exponentialfunktion in führender Ordnung in  $\tau$  entwickeln kann,

$$\hat{U}(t_n, t_{n-1}) = \hat{T} \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt' \hat{H}(t') \right] = \mathbb{1} - \frac{i\tau}{\hbar} \hat{H}(t_{n-1} + \lambda \tau) + O(\tau^2). \quad (3.17)$$

Der Zeitordnungsoperator spielt nach Abbruch der Entwicklung der Exponentialfunktion nach dem linearen Term in  $\tau$  keine Rolle mehr. Die in Gl. (3.16) auftretenden Matrixelemente des Zeitentwicklungsoperators nehmen damit folgende Form an:

$$\langle \vec{q}_n | \hat{U}(t_n, t_{n-1}) | \vec{p}_n \rangle = \langle \vec{q}_n | \vec{p}_n \rangle - \frac{i\tau}{\hbar} \langle \vec{q}_n | \hat{H}(t_{n-1} + \lambda \tau) | \vec{p}_n \rangle + O(\tau^2). \quad (3.18)$$

Üblicherweise ist der Hamilton-Operator eine Funktion von Impuls- und Ortsoperator,

$$\hat{H}(t) \equiv H(\hat{\vec{q}}, \hat{\vec{p}}, t).$$

Das Matrixelement des Hamilton-Operators zwischen Impuls- und Ortszuständen ist damit einfach der **Erwartungswert** des Hamilton-Operators,

$$\langle \vec{q}_n | \hat{H}(t_{n-1} + \lambda \tau) | \vec{p}_n \rangle \equiv H(\vec{q}_n, \vec{p}_n, t_{n-1} + \lambda \tau) \langle \vec{q}_n | \vec{p}_n \rangle. \quad (3.19)$$

Insgesamt erhalten wir also für Gl. (3.18)

$$\begin{aligned} \langle \vec{q}_n | \hat{U}(t_n, t_{n-1}) | \vec{p}_n \rangle &= \left[ 1 - \frac{i\tau}{\hbar} H(\vec{q}_n, \vec{p}_n, t_{n-1} + \lambda \tau) + O(\tau^2) \right] \langle \vec{q}_n | \vec{p}_n \rangle \\ &= \exp \left( -\frac{i\tau}{\hbar} H_n \right) \langle \vec{q}_n | \vec{p}_n \rangle, \end{aligned} \quad (3.20)$$

wobei wir im letzten Schritt die Entwicklung der Exponentialfunktion rückgängig gemacht und

$$H_n \equiv H(\vec{q}_n, \vec{p}_n, t_{n-1} + \lambda \tau)$$

abgekürzt haben. Man beachte, dass im Exponenten in Gl. (3.20) lediglich **Funktionen** und keine Operatoren mehr auftreten.

5.7.2012

Der Überlapp aus Impuls- und Ortseigenzuständen sind ebene Wellen,

$$\langle \vec{q}_n | \vec{p}_m \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar^3}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{q}_n \cdot \vec{p}_m\right), \quad (3.21)$$

vgl. Gl. (3.25) der Vorlesung ‘‘Quantenmechanik I’’. Setzen wir die Glgen. (3.20) und (3.21) in Gl. (3.16) ein, so erhalten wir mit

$$\langle \vec{q}_b | \vec{q}_N \rangle = \delta^{(3)}(\vec{q}_b - \vec{q}_N)$$

den Ausdruck

$$\begin{aligned} \langle \vec{q}_b, t_b | \vec{q}_a, t_a \rangle &= \int \prod_{n=1}^N \frac{d^3\vec{q}_n d^3\vec{p}_n}{(2\pi\hbar)^3} \delta^{(3)}(\vec{q}_b - \vec{q}_N) \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} [(\vec{q}_N - \vec{q}_{N-1}) \cdot \vec{p}_N - \tau H_N \right. \\ &\quad \left. + (\vec{q}_{N-1} - \vec{q}_{N-2}) \cdot \vec{p}_{N-1} - \tau H_{N-1} + \dots + (\vec{q}_1 - \vec{q}_a) \cdot \vec{p}_1 - \tau H_1] \right\} \\ &= \int \prod_{n=1}^{N-1} d^3\vec{q}_n \prod_{n=1}^N \frac{d^3\vec{p}_n}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left[ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^N \tau \left( \frac{\vec{q}_n - \vec{q}_{n-1}}{\tau} \cdot \vec{p}_n - H_n \right) \right], \quad (3.22) \end{aligned}$$

wobei wir  $\vec{q}_0 \equiv \vec{q}_a$  und  $\vec{q}_N \equiv \vec{q}_b$  gesetzt haben. Im Limes  $N \rightarrow \infty$ ,  $\tau \rightarrow 0$  wird

$$\sum_{n=1}^N \tau \longrightarrow \int_{t_a}^{t_b} dt, \quad \frac{\vec{q}_n - \vec{q}_{n-1}}{\tau} \longrightarrow \frac{d\vec{q}}{dt} \equiv \dot{\vec{q}}, \quad (3.23)$$

so dass

$$\langle \vec{q}_b, t_b | \vec{q}_a, t_a \rangle \longrightarrow \int_{\vec{q}(t_a)=\vec{q}_a}^{\vec{q}(t_b)=\vec{q}_b} \mathcal{D}\vec{q} \mathcal{D}\vec{p} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left[ \vec{p} \cdot \dot{\vec{q}} - H(\vec{q}, \vec{p}, t) \right] \right\}. \quad (3.24)$$

Hier haben wir die symbolische Notation

$$\mathcal{D}\vec{q} \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N-1} d^3\vec{q}, \quad \mathcal{D}\vec{p} \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \quad (3.25)$$

eingeführt. Gleichung (3.24) ist die sog. **Pfadintegral-** oder auch **Funktionalintegraldarstellung** der quantenmechanischen Übergangsamplitude. Sie besagt, dass man **je-**  
**de** nur mögliche Trajektorie  $(\vec{q}(t), \vec{p}(t))$  im **Phasenraum**, die vom Punkt  $\vec{q}_a = \vec{q}(t_a)$  zum Punkt  $\vec{q}_b = \vec{q}(t_b)$  bei beliebigen Werten der Impulse  $\vec{p}_a = \vec{p}(t_a)$  und  $\vec{p}_b = \vec{p}(t_b)$  führt, mit dem Phasenfaktor

$$\exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left[ \vec{p} \cdot \dot{\vec{q}} - H(\vec{q}, \vec{p}, t) \right] \right\} \quad (3.26)$$

wichtet und dann über alle Trajektorien summiert (integriert). Diese Situation entspricht der, die uns schon beim **modifizierten Hamiltonschen Prinzip** in Abschnitt 3.1.2 begegnet ist, s. auch Abschnitt 2.3 der Vorlesung ‘‘Analytische Mechanik und Spezielle Relativitätstheorie’’. Die **klassische Trajektorie** entspricht nach Gl. (3.4) derjenigen, bei der das Argument des Phasenfaktors (3.26) **stationär** (oder extremal) wird. **Quantenmechanisch** sind aber auch alle möglichen anderen Trajektorien erlaubt.

### 3.4 Pfadintegralformulierung im Ortsraum

Für den Fall, dass der Hamilton-Operator eine quadratische Funktion des Impuls-Operators ist,

$$\hat{H}(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q}, t), \quad (3.27)$$

kann man die (unendlich vielen) Impulsintegrale in Gl. (3.24) exakt ausführen, da es sich lediglich um (verschobene) Gauß-Integrale handelt. Um dies zu sehen, gehen wir auf Gl. (3.22) zurück und setzen entsprechend Gl. (3.27)

$$H_n = H(\vec{q}_n, \vec{p}_n, t_{n-1} + \lambda \tau) = \frac{\vec{p}_n^2}{2m} + V(\vec{q}_n, t_{n-1} + \lambda \tau)$$

ein. Eine quadratische Ergänzung führt auf

$$\frac{\vec{p}_n^2}{2m} - \frac{\vec{q}_n - \vec{q}_{n-1}}{\tau} \cdot \vec{p}_n = \frac{1}{2m} \left( \vec{p}_n - m \frac{\vec{q}_n - \vec{q}_{n-1}}{\tau} \right)^2 - \frac{m}{2} \left( \frac{\vec{q}_n - \vec{q}_{n-1}}{\tau} \right)^2. \quad (3.28)$$

Substituieren wir die Integrationsvariable

$$\vec{p}_n \longrightarrow \vec{p}'_n = \vec{p}_n - m \frac{\vec{q}_n - \vec{q}_{n-1}}{\tau},$$

so erkennen wir, dass sämtliche Impulsintegrale entkoppeln und, da sie Gauß-Integrale sind, sofort mit Hilfe der wohlbekannten Formel

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad a > 0, \quad (3.29)$$

gelöst werden können,

$$\int \frac{d^3 \vec{p}'_n}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(-\frac{i\tau}{\hbar} \frac{\vec{p}'_n{}^2}{2m}\right) = \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left(-\frac{i\tau}{2m\hbar} p^2\right) \right]^3 = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \tau \hbar}}^3. \quad (3.30)$$

Hier ist eine Bemerkung angebracht. Aufgrund des Faktors  $i$  im Exponenten ist dies eigentlich kein Gauß-Integral im Sinne von Gl. (3.29). Mit Hilfe der Euler-Formel, Resultaten aus Integraltafeln [11], sowie  $\cos \frac{\pi}{4} = \sin \frac{\pi}{4} = 1/\sqrt{2}$  erhalten wir aber das gleiche Resultat wie in Gl. (3.29):

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-iax^2} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \cos(ax^2) - i \int_{-\infty}^{\infty} dx \sin(ax^2) \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{2a}} (1 - i) = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \left( \cos \frac{\pi}{4} - i \sin \frac{\pi}{4} \right) = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-i\pi/4} = \sqrt{\frac{\pi}{ia}}. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Mit dem verbleibenden Term aus der quadratischen Ergänzung (3.28) wird Gl. (3.22) zu

$$\begin{aligned} \langle \vec{q}_b, t_b | \vec{q}_a, t_a \rangle &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \tau \hbar}}^{3N} \int \prod_{n=1}^{N-1} d^3 \vec{q}_n \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^N \tau \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{\vec{q}_n - \vec{q}_{n-1}}{\tau} \right)^2 - V(\vec{q}_n, t_{n-1} + \lambda \tau) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.32)$$

### 3 Pfadintegrale

Im Limes  $N \rightarrow \infty$ ,  $\tau \rightarrow 0$  geht dies mit Hilfe von Gl. (3.23) über in

$$\begin{aligned}
 \langle \vec{q}_b, t_b | \vec{q}_a, t_a \rangle &\longrightarrow \mathcal{N} \int_{\vec{q}(t_a)=\vec{q}_a}^{\vec{q}(t_b)=\vec{q}_b} \mathcal{D}\vec{q} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left[ \frac{m}{2} \dot{\vec{q}}^2 - V(\vec{q}, t) \right] \right\} \\
 &\equiv \mathcal{N} \int_{\vec{q}(t_a)=\vec{q}_a}^{\vec{q}(t_b)=\vec{q}_b} \mathcal{D}\vec{q} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) \right] \\
 &\equiv \mathcal{N} \int_{\vec{q}(t_a)=\vec{q}_a}^{\vec{q}(t_b)=\vec{q}_b} \mathcal{D}\vec{q} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[\vec{q}(t)] \right\}, \tag{3.33}
 \end{aligned}$$

wobei wir die Lagrange-Funktion

$$L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) = \frac{m}{2} \dot{\vec{q}}^2 - V(\vec{q}, t) \tag{3.34}$$

und die Definition (3.2) der Wirkung benutzt haben. Die Normierungskonstante

$$\mathcal{N} = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \tau \rightarrow 0}} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \tau \hbar}}^{3N}$$

ist dabei im Prinzip nicht wohldefiniert, aber das spielt keine Rolle, da wir die Übergangsamplitude immer durch Multiplikation mit einem konstanten Phasenfaktor (re-)normieren können. Gleichung (3.33) ist die **Pfadintegraldarstellung** der quantenmechanischen Übergangsamplitude im **Ortsraum**. Sie besagt, dass man **jede** Trajektorie  $\vec{q}(t)$  mit dem Phasenfaktor  $e^{iS[\vec{q}(t)]/\hbar}$  wichten und dann über **alle möglichen** Trajektorien im Ortsraum summieren (integrieren) muss. Die **klassische Trajektorie** entspricht nach dem Hamiltonschen Prinzip (3.1) derjenigen, die die Wirkung **stationär** (oder extremal) macht. **Quantenmechanisch** sind aber auch alle möglichen anderen Trajektorien erlaubt.

Eine zentrale Rolle in der Gewichtung der einzelnen Trajektorien spielt die Überlegung, wie groß die Wirkung auf einer gegebenen Trajektorie relativ zum Planckschen Wirkungsquantum  $\hbar$  ist. Im Limes  $\hbar \rightarrow 0$  wird das Verhältnis  $S[\vec{q}(t)]/\hbar$  beliebig groß. Die Phasenfaktoren auf Trajektorien abseits der klassischen Trajektorie, wo  $S[\vec{q}(t)]$  stationär wird und ein Minimum annimmt, können damit beliebige (komplexe) Werte (vom Betrag eins) annehmen. Die Beiträge dieser Trajektorien (3.33) mitteln sich im Pfadintegral gegenseitig weg und nur Beiträge von Trajektorien um die klassische herum (dem stationären Punkt und Minimum von  $S[\vec{q}(t)]$ ), in deren Nähe die Phasenfaktoren aufgrund der Stationarität der Wirkung alle annähernd gleiche Werte annehmen, "überleben". Daher entspricht  $\hbar \rightarrow 0$  dem **klassischen Limes**.

## 3.5 Zusammenhang zwischen Übergangsamplitude und Greens-Funktion

Wir betrachten im folgenden die **freie** zeitabhängige Schrödinger-Gleichung,

$$0 = \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_0 \right) \psi(\vec{q}, t), \tag{3.35}$$

### 3.5 Zusammenhang zwischen Übergangsamplitude und Greens-Funktion

wobei

$$\hat{H}_0 \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_q \quad (3.36)$$

der **freie** Hamilton-Operator ist. Dies ist eine **homogene** Wellengleichung, die wir mit Hilfe der Fourier-Zerlegung der Wellenfunktion,

$$\psi(\vec{q}, t) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d\omega d^3\vec{k} \tilde{\psi}(\omega, \vec{k}) e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{q})}, \quad (3.37)$$

lösen können. Setzen wir diese in die Schrödinger-Gleichung (3.35) ein, so erhalten wir

$$0 = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d\omega d^3\vec{k} \left( \hbar\omega - \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \right) \tilde{\psi}(\omega, \vec{k}) e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{q})}.$$

Da die ebenen Wellen ein vollständiges Funktionensystem bilden, kann dies nur dann null sein, wenn der Term in Klammern verschwindet, d.h. wenn die **Dispersionsrelation**

$$\hbar\omega(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \quad (3.38)$$

erfüllt ist. Wir berücksichtigen dies in der Fourier-Zerlegung (3.37), indem wir für die Fourier-Koeffizienten den Ansatz

$$\tilde{\psi}(\omega, \vec{k}) = \tilde{\psi}(\vec{k}) \delta(\omega - \omega(\vec{k})) \quad (3.39)$$

machen. Wir erhalten

$$\psi(\vec{q}, t) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d\omega d^3\vec{k} \tilde{\psi}(\vec{k}) \delta(\omega - \omega(\vec{k})) e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{q})} = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3\vec{k} \tilde{\psi}(\vec{k}) e^{-i(\omega(\vec{k})t - \vec{k} \cdot \vec{q})}. \quad (3.40)$$

Die Koeffizienten  $\tilde{\psi}(\vec{k})$  lassen sich aus den Anfangsbedingungen bestimmen,

$$\psi(\vec{q}, 0) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3\vec{k} \tilde{\psi}(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{q}}, \quad (3.41)$$

also nach Fourier-Transformation

$$\begin{aligned} \int d^3\vec{q} e^{-i\vec{p} \cdot \vec{q}} \psi(\vec{q}, 0) &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3\vec{k} \tilde{\psi}(\vec{k}) \int d^3\vec{q} e^{i(\vec{k} - \vec{p}) \cdot \vec{q}} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3\vec{k} \tilde{\psi}(\vec{k}) (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{p}) \\ &= \frac{1}{2\pi} \tilde{\psi}(\vec{p}), \end{aligned}$$

also

$$\tilde{\psi}(\vec{k}) = 2\pi \int d^3\vec{q} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{q}} \psi(\vec{q}, 0). \quad (3.42)$$

Setzen wir dies in Gl. (3.40) ein, so erhalten wir

$$\psi(\vec{q}, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{k} \int d^3\vec{r} e^{-i\omega(\vec{k})t + i\vec{k} \cdot (\vec{q} - \vec{r})} \psi(\vec{r}, 0). \quad (3.43)$$

### 3 Pfadintegrale

Wir definieren die Funktion

$$G(\vec{q}, t; \vec{r}, 0) \equiv \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{k} e^{-i\omega(\vec{k})t + i\vec{k}\cdot(\vec{q}-\vec{r})} . \quad (3.44)$$

Dann schreibt sich Gl. (3.43)

$$\psi(\vec{q}, t) = \int d^3\vec{r} G(\vec{q}, t; \vec{r}, 0) \psi(\vec{r}, 0) . \quad (3.45)$$

Die physikalische Interpretation dieser Gleichung ist, dass die Anfangsbedingung  $\psi(\vec{r}, 0)$  durch die Funktion  $G(\vec{q}, t; \vec{r}, 0)$  zum Zeitpunkt  $t$  und zum Ort  $\vec{q}$  **“propagiert”** wird. Dies ist ganz ähnlich zu der Funktion  $D(t, \vec{r} - \vec{r}')$ , die uns schon in der Vorlesung “Elektrodynamik” begegnet ist, s. dort Gl. (4.50). Aus diesem Grund nennt man  $G(\vec{q}, t; \vec{r}, 0)$  auch **Propagator**. Es handelt sich dabei um eine **Greens-Funktion**, denn wenn wir auf das Resultat (3.45) den freien Schrödinger-Operator

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_0$$

anwenden, erhalten wir

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_0 \right) \psi(\vec{q}, t) = \int d^3\vec{r} \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_0 \right) G(\vec{q}, t; \vec{r}, 0) \psi(\vec{r}, 0) .$$

Da  $\psi(\vec{q}, t)$  eine Lösung der freien Schrödinger-Gleichung (3.35) für alle Zeiten  $t > 0$  sein soll, muss die rechte Seite verschwinden. Dies ist erfüllt, falls

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_0 \right) G(\vec{q}, t; \vec{r}, 0) = \delta(t) \delta^{(3)}(\vec{q} - \vec{r}) , \quad (3.46)$$

weil dann

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_0 \right) \psi(\vec{q}, t) = \delta(t) \psi(\vec{q}, 0) = 0 \quad \forall t > 0 .$$

Gleichung (3.46) ist aber gerade die Definitionsgleichung für die Greens-Funktion der Schrödinger-Gleichung.

Wir können in Gl. (3.45) auch Orts- und Zeitargumente umbenennen,

$$\psi(\vec{q}_b, t_b) = \int d^3\vec{q}_a G(\vec{q}_b, t_b; \vec{q}_a, t_a) \psi(\vec{q}_a, t_a) . \quad (3.47)$$

Wir zeigen nun, dass die Übergangsamplitude (3.7) mit der **Greens-Funktion** (3.44) der Schrödinger-Gleichung identisch ist. Dazu setzen wir die Wellenfunktion am Ort  $\vec{q}_b$  zum Zeitpunkt  $t_b$  durch Einschieben eines vollständigen Funktionensystems

$$\mathbb{1} = \int d^3\vec{q}_a |\vec{q}_a, t_a\rangle \langle \vec{q}_a, t_a|$$

mit der Wellenfunktion am Ort  $\vec{q}_a$  zum Zeitpunkt  $t_a$  in Beziehung,

$$\psi(\vec{q}_b, t_b) = \langle \vec{q}_b, t_b | \psi \rangle_H = \int d^3\vec{q}_a \langle \vec{q}_b, t_b | \vec{q}_a, t_a \rangle \langle \vec{q}_a, t_a | \psi \rangle_H = \int d^3\vec{q}_a \langle \vec{q}_b, t_b | \vec{q}_a, t_a \rangle \psi(\vec{q}_a, t_a) . \quad (3.48)$$

Der Vergleich mit Gl. (3.47) ergibt

$$G(\vec{q}_b, t_b; \vec{q}_a, t_a) \equiv \langle \vec{q}_b, t_b | \vec{q}_a, t_a \rangle, \quad \text{q.e.d.} \quad (3.49)$$

Die Übergangsamplitude ist also nichts weiter als der **Propagator** oder die **Greens-Funktion** der Schrödinger-Gleichung. Wir werden dies im folgenden auch durch eine explizite Rechnung für den freien Fall,  $V(\vec{q}, t) = 0$ , beweisen.

## 3.6 Propagator der freien Schrödinger-Gleichung

10.7.2012

Wir berechnen zunächst die Übergangsamplitude für die freie Schrödinger-Gleichung aus der Pfadintegralformulierung. Der Startpunkt ist Gl. (3.32), wobei wir  $V(\vec{q}, t) \equiv 0$  setzen,

$$\langle \vec{q}_b, t_b | \vec{q}_a, t_a \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \tau \hbar}}^{3N} \int \prod_{n=1}^{N-1} d^3 \vec{q}_n \exp \left[ \frac{i m}{2 \hbar \tau} \sum_{n=1}^N (\vec{q}_n - \vec{q}_{n-1})^2 \right]. \quad (3.50)$$

Wir integrieren sukzessive über die Koordinaten  $\vec{q}_n$ . Die Koordinate  $\vec{q}_1$  taucht in zwei Termen in der Summe im Exponenten auf, so dass das  $\vec{q}_1$ -Integral die Form

$$\int d^3 \vec{q}_1 \exp \left\{ \frac{i m}{2 \hbar \tau} [(\vec{q}_2 - \vec{q}_1)^2 + (\vec{q}_1 - \vec{q}_0)^2] \right\} \quad (3.51)$$

hat. Wir schreiben den Exponenten ein wenig um,

$$\begin{aligned} (\vec{q}_2 - \vec{q}_1)^2 + (\vec{q}_1 - \vec{q}_0)^2 &= \vec{q}_2^2 + \vec{q}_0^2 - 2 \vec{q}_1 \cdot (\vec{q}_2 + \vec{q}_0) + 2 \vec{q}_1^2 \\ &= 2 \left( \vec{q}_1 - \frac{\vec{q}_2 + \vec{q}_0}{2} \right)^2 - \frac{1}{2} (\vec{q}_2 + \vec{q}_0)^2 + \vec{q}_2^2 + \vec{q}_0^2 \\ &= 2 \vec{q}_1'^2 + \frac{1}{2} (\vec{q}_2 - \vec{q}_0)^2, \end{aligned}$$

wobei wir

$$\vec{q}_1' \equiv \vec{q}_1 - \frac{\vec{q}_2 + \vec{q}_0}{2}$$

definiert haben. Substituieren wir diese Variable im  $\vec{q}_1$ -Integral in Gl. (3.51), so können wir das Integral direkt ausführen (es ist wieder vom Gauß-Typ),

$$\begin{aligned} &\int d^3 \vec{q}_1 \exp \left\{ \frac{i m}{2 \hbar \tau} [(\vec{q}_2 - \vec{q}_1)^2 + (\vec{q}_1 - \vec{q}_0)^2] \right\} \\ &= \exp \left[ \frac{i m}{2 \hbar (2\tau)} (\vec{q}_2 - \vec{q}_0)^2 \right] \int d^3 \vec{q}_1' \exp \left( \frac{2i m}{2 \hbar \tau} \vec{q}_1'^2 \right) \\ &= \exp \left[ \frac{i m}{2 \hbar (2\tau)} (\vec{q}_2 - \vec{q}_0)^2 \right] \sqrt{\frac{\pi i \tau \hbar}{m}}^3. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Wir erkennen, dass das Resultat aus der Gauß-Integration mit drei der  $3N$  Vorfaktoren vor dem Pfadintegral in Gl. (3.50)

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi i \tau \hbar} \frac{\pi i \tau \hbar}{m}}^3 = \frac{1}{\sqrt{2}^3} \quad (3.53)$$

### 3 Pfadintegrale

ergibt. Gleichzeitig ist das Zeitintervall  $\tau$  in der Exponentialfunktion durch  $2\tau$  ersetzt worden.

Wir integrieren nun über  $\vec{q}_2$ , welches ebenfalls in zwei Termen im Exponenten vorkommt,

$$\int d^3\vec{q}_2 \exp \left\{ \frac{i m}{2\hbar\tau} \left[ (\vec{q}_3 - \vec{q}_2)^2 + \frac{1}{2} (\vec{q}_2 - \vec{q}_0)^2 \right] \right\} . \quad (3.54)$$

Ähnliche Manipulation des Exponenten wie im  $\vec{q}_1$ -Fall ergibt

$$\begin{aligned} (\vec{q}_3 - \vec{q}_2)^2 + \frac{1}{2} (\vec{q}_2 - \vec{q}_0)^2 &= \vec{q}_3^2 + \frac{1}{2} \vec{q}_0^2 - 2\vec{q}_2 \cdot \left( \vec{q}_3 + \frac{1}{2} \vec{q}_0 \right) + \frac{3}{2} \vec{q}_2^2 \\ &= \frac{3}{2} \left[ \vec{q}_2 - \frac{2}{3} \left( \vec{q}_3 + \frac{1}{2} \vec{q}_0 \right) \right]^2 - \frac{2}{3} \left( \vec{q}_3 + \frac{1}{2} \vec{q}_0 \right)^2 + \vec{q}_3^2 + \frac{1}{2} \vec{q}_0^2 \\ &= \frac{3}{2} \vec{q}_2'^2 + \frac{1}{3} (\vec{q}_3 - \vec{q}_0)^2 , \end{aligned}$$

wobei wir

$$\vec{q}_2' \equiv \vec{q}_2 - \frac{2}{3} \left( \vec{q}_3 + \frac{1}{2} \vec{q}_0 \right)$$

definiert haben. Eingesetzt in Gl. (3.54) erhalten wir

$$\begin{aligned} &\int d^3\vec{q}_2 \exp \left\{ \frac{i m}{2\hbar\tau} \left[ (\vec{q}_3 - \vec{q}_2)^2 + \frac{1}{2} (\vec{q}_2 - \vec{q}_0)^2 \right] \right\} \\ &= \exp \left[ \frac{i m}{2\hbar(3\tau)} (\vec{q}_3 - \vec{q}_0)^2 \right] \int d^3\vec{q}_2' \exp \left( \frac{3i m}{4\hbar\tau} \vec{q}_2'^2 \right) \\ &= \exp \left[ \frac{i m}{2\hbar(3\tau)} (\vec{q}_3 - \vec{q}_0)^2 \right] \sqrt{\frac{4\pi i\tau\hbar}{3m}}^3 . \end{aligned} \quad (3.55)$$

Das Resultat aus der Gauß-Integration ergibt zusammen mit drei der Vorfaktoren aus Gl. (3.50) und mit dem Faktor  $1/\sqrt{2}^3$  aus Gl. (3.53)

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar} \frac{4\pi i\tau\hbar}{3m} \frac{1}{2}}^3 = \frac{1}{\sqrt{3}^3} .$$

Wir integrieren nun weiter über die Variablen  $\vec{q}_n$ . Bei der Integration über die Variable  $\vec{q}_j$  wird das Zeitintervall  $j\tau$  im Nenner des Exponenten um  $\tau$  größer, also zu  $(j+1)\tau$ , drei der  $3N$  Vorfaktoren in Gl. (3.50) heben sich teilweise mit dem Resultat der  $\vec{q}_j$ -Integration weg, und wir erhalten einen Faktor  $1/\sqrt{j+1}^3$ . Setzen wir dies bis  $j = N - 1$  fort, so erhalten wir mit  $\vec{q}_0 \equiv \vec{q}_a$ ,  $\vec{q}_N \equiv \vec{q}_b$  und  $N\tau \equiv t_b - t_a$  als Endergebnis

$$\langle \vec{q}_b, t_b | \vec{q}_a, t_a \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t_b - t_a)}}^3 \exp \left[ \frac{i m}{2\hbar(t_b - t_a)} (\vec{q}_b - \vec{q}_a)^2 \right] . \quad (3.56)$$

Wir zeigen nun, dass dieser Ausdruck identisch mit dem Propagator (3.44) der Schrödinger-Gleichung ist. Dazu müssen wir nur erkennen, dass auch das Integral in dieser Gleichung ein (verschobenes) Gauß-Integral ist (zumindest nach analytischer Fortsetzung in



der komplexen Ebene, um Konvergenz zu erzielen). Mit der Dispersionsrelation (3.38) erhalten wir

$$\begin{aligned}
 G(\vec{q}, t; \vec{r}, 0) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{k} \exp \left[ -\frac{i\hbar t}{2m} \vec{k}^2 + i\vec{k} \cdot (\vec{q} - \vec{r}) \right] \\
 &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{k} \exp \left\{ -\frac{i\hbar t}{2m} \left[ \vec{k} - \frac{m}{\hbar t} (\vec{q} - \vec{r}) \right]^2 + \frac{i m}{2\hbar t} (\vec{q} - \vec{r})^2 \right\} \\
 &= \frac{1}{(2\pi)^3} \sqrt{\frac{2\pi m}{i\hbar t}}^3 \exp \left[ \frac{i m}{2\hbar t} (\vec{q} - \vec{r})^2 \right] \\
 &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}^3 \exp \left[ \frac{i m}{2\hbar t} (\vec{q} - \vec{r})^2 \right]. \tag{3.57}
 \end{aligned}$$

Dies ist mit den offensichtlichen Ersetzungen  $\vec{q} \rightarrow \vec{q}_b$ ,  $\vec{r} \rightarrow \vec{q}_a$  und  $t \rightarrow t_b - t_a$  identisch mit Gl. (3.56), q.e.d.

Wir wollen uns einen Überblick über die Wirkung des Propagators (3.57) verschaffen. Dazu denken wir uns das Teilchen bei  $t = 0$  am Ursprung,  $\vec{r} = 0$ , lokalisiert. Die zugehörige Wellenfunktion ist

$$\psi(\vec{r}, 0) = \delta^{(3)}(\vec{r}). \tag{3.58}$$

Gemäß Gl. (3.45) ist die Wellenfunktion zu einem späteren Zeitpunkt  $t > 0$  dann

$$\psi(\vec{q}, t) = \int d^3\vec{r} G(\vec{q}, t; \vec{r}, 0) \delta^{(3)}(\vec{r}) = G(\vec{q}, t; 0, 0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}^3 \exp \left( \frac{i m}{2\hbar t} q^2 \right), \tag{3.59}$$

wobei wir Gl. (3.57) benutzt haben. Offensichtlich hängt die Wellenfunktion für diese Anfangsbedingung nur vom Abstand  $q = |\vec{q}|$  vom Ursprung (dem Aufenthaltsort des Teilchens bei  $t = 0$ ) ab,  $\psi(\vec{q}, t) \equiv \psi(q, t)$ . Es handelt sich also um eine **Kugelwelle**. Die speziell gewählte Anfangsbedingung sorgt zudem dafür, dass Wellenfunktion und Propagator übereinstimmen. Wir zerlegen die Wellenfunktion in Real- und Imaginärteil,

$$\begin{aligned}
 \psi(q, t) &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar t}}^3 (1 + i) \left[ \cos \left( \frac{m q^2}{2\hbar t} \right) + i \sin \left( \frac{m q^2}{2\hbar t} \right) \right] \\
 &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar t}}^3 \left\{ \left[ \cos \left( \frac{m q^2}{2\hbar t} \right) - \sin \left( \frac{m q^2}{2\hbar t} \right) \right] + i \left[ \cos \left( \frac{m q^2}{2\hbar t} \right) + \sin \left( \frac{m q^2}{2\hbar t} \right) \right] \right\}. \tag{3.60}
 \end{aligned}$$

Real- und Imaginärteil sind in Abb. 3.3 für einige exemplarische Werte von  $t$  als Funktion von  $q$  dargestellt. Man erkennt, dass die Oszillationsfrequenz mit zunehmenden Abstand  $q$  vom Ursprung zu- und mit zunehmender Zeit  $t$  abnimmt. Die Amplitude nimmt mit  $t^{-3/2}$  ab.

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte

$$|\psi(\vec{q}, t)|^2 = \left( \frac{m}{2\pi\hbar t} \right)^3 \tag{3.61}$$

ist räumlich konstant. Dies ist auf den ersten Blick ein überraschendes Ergebnis, erklärt sich aber daraus, dass das Teilchen bei  $t = 0$  exakt lokalisiert war. Nach der Heisenbergschen Unbestimmtheitsrelation ist sein Impuls daher vollkommen unbestimmt, d.h. alle

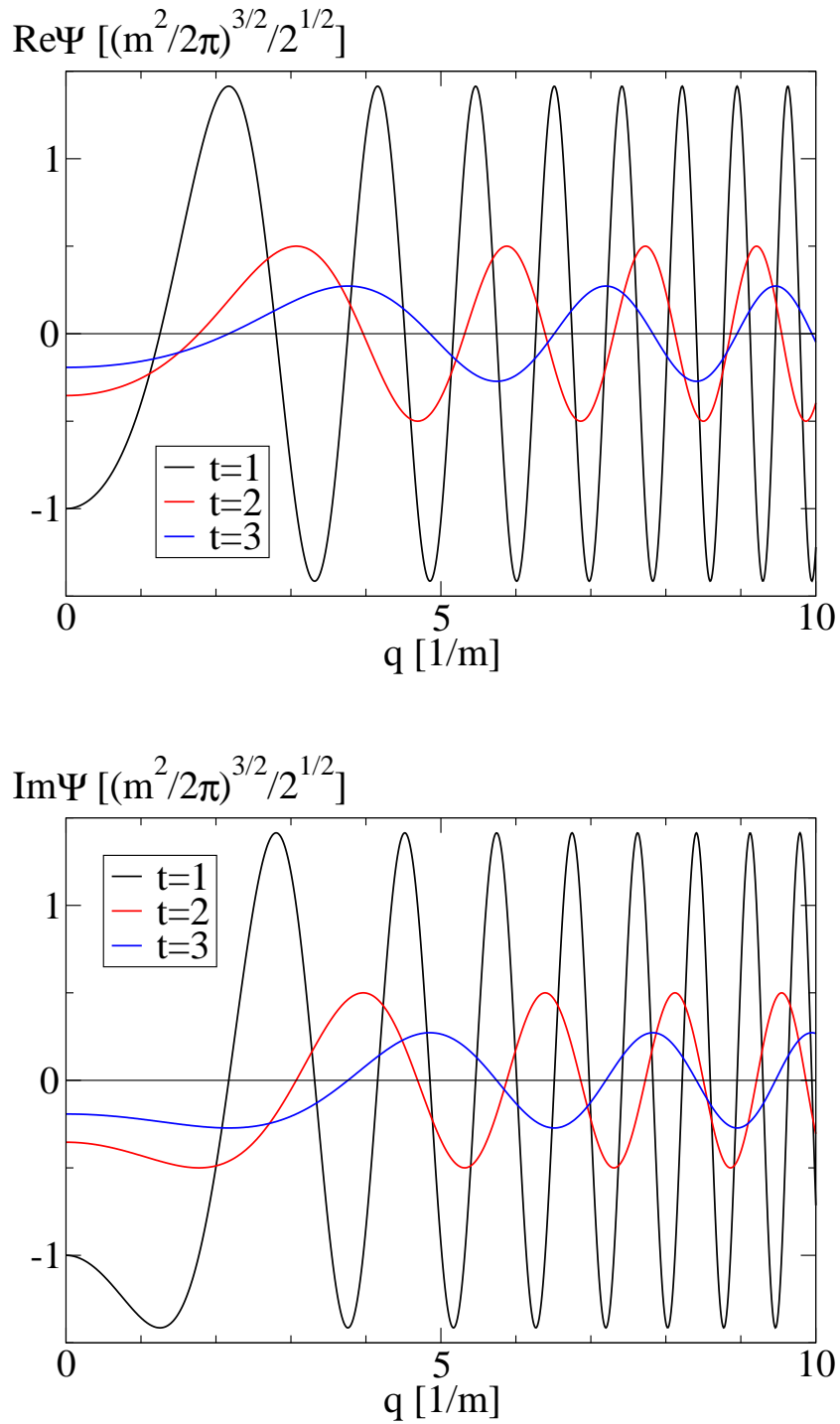


Abbildung 3.3: Real- und Imaginärteil der Wellenfunktion (3.60) (in Einheiten von  $[m^2/(2\pi)]^{3/2}/\sqrt{2}$ ) für Zeiten  $t = 1$  (schwarz), 2 (rot), 3 (blau), (in Einheiten von  $1/(\hbar m)$ ) als Funktion des Ortes  $q$  (in Einheiten von  $1/m$ ).

Impulse  $\vec{p}$  treten mit gleicher Wahrscheinlichkeit auf. Dies gilt auch für beliebig hohe Werte von  $\vec{p}$ , die das Teilchen quasi instantan von  $\vec{q} = 0$  an einen vom Ursprung beliebig weit

entfernten Ort transportieren (Kausalitätsprobleme treten in der nichtrelativistischen Betrachtung nicht auf). Andererseits nimmt die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte (3.61) an jedem Ort mit der Zeit wie  $t^{-3}$  ab. Auf den ersten Blick scheint dies der Normierung der Wellenfunktion zu widersprechen. Wir müssen aber bedenken, dass wir für das Normierungsintegral über den gesamten Raum integrieren, also

$$\int_V d^3\vec{q} |\psi(\vec{q}, t)|^2 = V \left( \frac{m}{2\pi\hbar t} \right)^3 .$$

Die korrekt normierte Wellenfunktion muss daher noch mit einem Faktor

$$\sqrt{\frac{1}{V} \left( \frac{2\pi\hbar t}{m} \right)^3}$$

multipliziert werden.

Die Situation eines exakt lokalisierten Teilchens (mit dann beliebig hohem Impuls) ist natürlich wenig realistisch. Wir betrachten daher die Anfangsbedingung

$$\psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^3}} \exp\left(-\frac{\vec{r}^2}{2\sigma}\right) , \quad (3.62)$$

also ein Gaußsches Wellenpaket der Breite  $\sigma$ . Für  $\sigma \rightarrow 0$  geht das Paket in die  $\delta$ -Funktion (3.58) über. Weil die Fourier-Transformierte einer Gauß-Funktion wieder eine Gauß-Funktion ist, sind zwar auch jetzt im Prinzip beliebig hohe Impulse  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$  möglich, aber sie werden mit zunehmendem  $\vec{p}$  exponentiell unwahrscheinlicher,

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(\vec{k}, 0) &= 2\pi \int d^3\vec{r} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \psi(\vec{r}, 0) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^3}} \int d^3\vec{r} \exp\left(-\frac{\vec{r}^2}{2\sigma} - i\vec{k}\cdot\vec{r}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^3}} \exp\left(-\frac{\sigma}{2} \vec{k}^2\right) \int d^3\vec{r} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma} (\vec{r} + i\sigma\vec{k})^2\right] \\ &= 2\pi \exp\left(-\frac{\sigma}{2} \vec{k}^2\right) \equiv 2\pi \exp\left(-\frac{\sigma}{2\hbar^2} \vec{p}^2\right) . \end{aligned} \quad (3.63)$$

Gemäß Gl. (3.45) ist die Wellenfunktion zu einem Zeitpunkt  $t > 0$

$$\psi(\vec{q}, t) = \sqrt{\frac{m}{(2\pi)^2 i\hbar t \sigma}} \exp\left(\frac{im}{2\hbar t} q^2\right) \int d^3\vec{r} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma} \left(1 - \frac{im\sigma}{\hbar t}\right) \vec{r}^2 - \frac{im}{\hbar t} \vec{q}\cdot\vec{r}\right] . \quad (3.64)$$

Eine quadratische Ergänzung liefert

$$\begin{aligned} &-\frac{1}{2\sigma} \left(1 - \frac{im\sigma}{\hbar t}\right) \vec{r}^2 - \frac{im}{\hbar t} \vec{q}\cdot\vec{r} \\ &= -\frac{1}{2\sigma} \left(1 - \frac{im\sigma}{\hbar t}\right) \left[ \left(\vec{r} + \frac{im\sigma}{\hbar t - im\sigma} \vec{q}\right)^2 - \left(\frac{im\sigma}{\hbar t - im\sigma}\right)^2 q^2 \right] \\ &= -\frac{1}{2\sigma} \left(1 - \frac{im\sigma}{\hbar t}\right) \vec{r}'^2 - \frac{m^2}{2\hbar t} \frac{\sigma}{\hbar t - im\sigma} q^2 , \end{aligned}$$

### 3 Pfadintegrale

wobei wir die Substitution

$$\vec{r}' \equiv \vec{r} + \frac{im\sigma}{\hbar t - im\sigma} \vec{q}$$

vorgenommen haben. Das Gauß-Integral über  $\vec{r}'$  hat den Wert

$$\sqrt{\frac{2\pi\hbar t\sigma}{\hbar t - im\sigma}}^3.$$

Eingesetzt in Gl. (3.64) ergibt sich

$$\begin{aligned} \psi(q, t) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i} \frac{1}{\hbar t - im\sigma}}^3 \exp\left[-\frac{m}{2\hbar t} \left(\frac{m\sigma}{\hbar t - im\sigma} - i\right) q^2\right] \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i} \frac{1}{\hbar t - im\sigma}}^3 \exp\left[\frac{im}{2(\hbar t - im\sigma)} q^2\right]. \end{aligned} \quad (3.65)$$

Im Limes  $\sigma \rightarrow 0$  ergibt sich wieder das Resultat (3.59). Die Zerlegung in Real- und Imaginärteil ist wieder möglich, ergibt aber einen recht unhandlichen Ausdruck. Wir zeigen daher nur das Resultat in Abb. 3.4. Man sieht sehr schön, wie das anfängliche Gaußsche Wellenpaket (gestrichelte Linie in der Abbildung für den Realteil) aufgrund der Impulsunbestimmtheit “auseinanderfließt”.

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte beträgt

$$|\psi(\vec{q}, t)|^2 = \left(\frac{m}{2\pi\sqrt{(\hbar t)^2 + (m\sigma)^2}}\right)^3 \exp\left(-\frac{m^2\sigma}{(\hbar t)^2 + (m\sigma)^2} q^2\right). \quad (3.66)$$

Sie ist noch nicht korrekt normiert, da

$$\int d^3\vec{r}' |\psi(\vec{q}, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}}^3.$$

Die korrekt (auf eins) normierte Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ist in Abb. 3.5 dargestellt. Auch hier erkennt man das “Zerfließen” der Wellenfunktion im Laufe der Zeit.

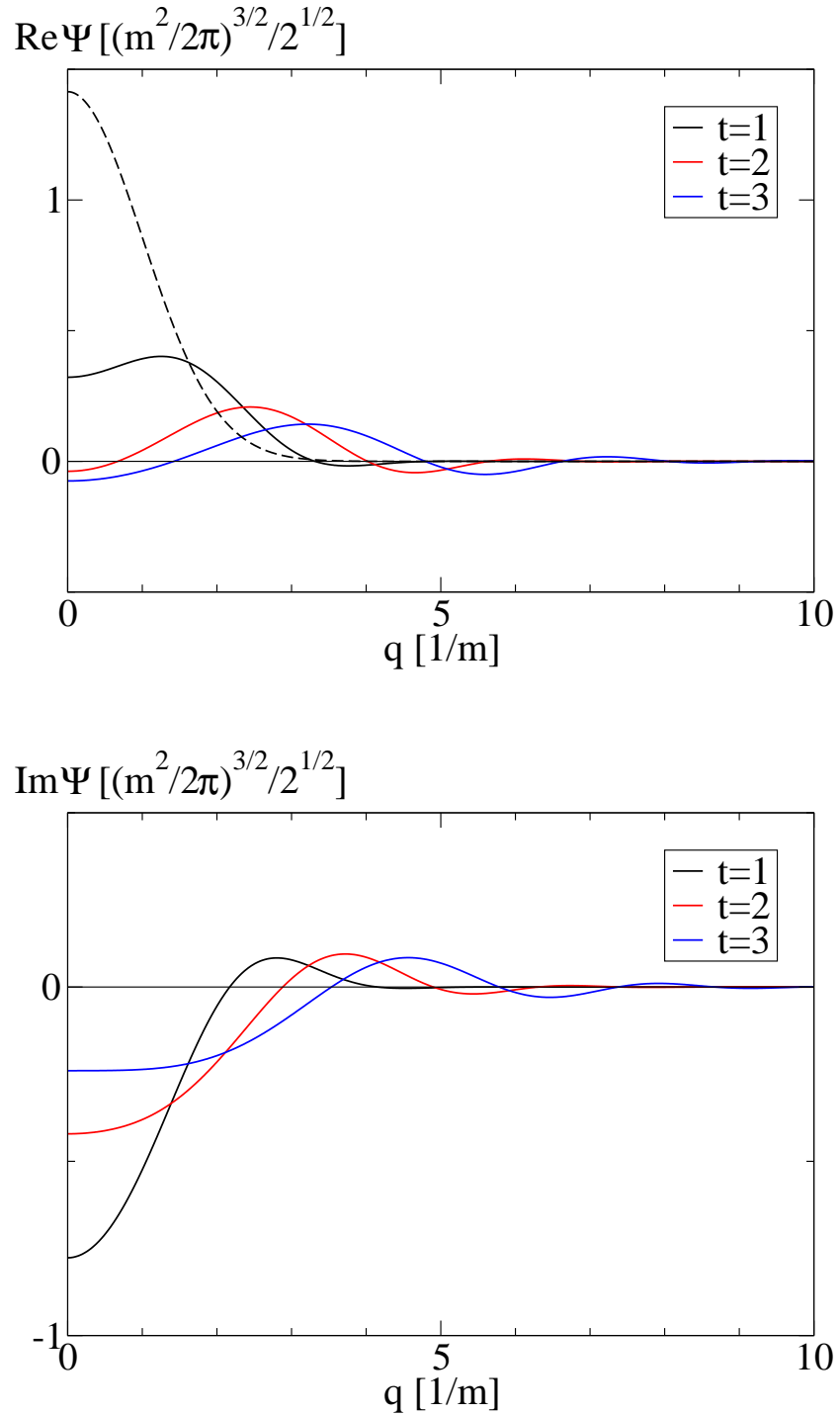


Abbildung 3.4: Real- und Imaginärteil der Wellenfunktion (3.65) (in Einheiten von  $[m^2/(2\pi)]^{3/2}/\sqrt{2}$ ) für die Zeiten  $t = 1$  (schwarz), 2 (rot), 3 (blau) (in Einheiten von  $1/(\hbar m)$ ) als Funktion des Ortes  $q$  (in Einheiten von  $1/m$ ). Die anfängliche Breite des Wellenpakets beträgt  $\sigma = 1$  (in Einheiten von  $1/m^2$ ).

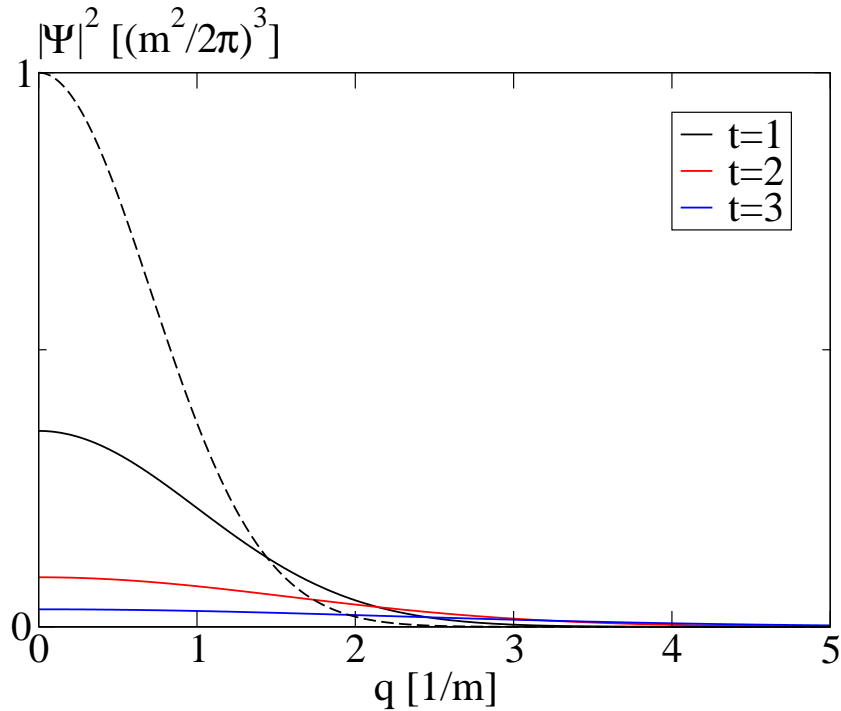


Abbildung 3.5: Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte (in Einheiten von  $[m^2/(2\pi)]^3$ ) für die Zeiten  $t = 1$  (schwarz), 2 (rot), 3 (blau) (in Einheiten von  $1/(\hbar m)$ ) als Funktion des Ortes  $q$  (in Einheiten von  $1/m$ ). Die anfängliche Breite des Wellenpakets beträgt  $\sigma = 1$  (in Einheiten von  $1/m^2$ ).

### 3.7 Semiklassische Näherung

Für ein beliebiges Potential  $V(\vec{q}, t)$  läßt sich das Pfadintegral (3.33) i.a. nicht mehr lösen. Eine Ausnahme bilden Potentiale, die **quadratisch** in  $\vec{q}$  sind, weil dann das Pfadintegral über  $\vec{q}$  wieder in (im Prinzip unendliche viele) Gauß-Integrale übergeht. Man kann aber stets die sog. **semiklassische Näherung** machen, d.h. man entwickelt die Wirkung  $S[\vec{q}(t)]$  bis zur **quadratischen Ordnung** in  $\vec{q}(t)$  um den **klassischen Pfad**  $\vec{q}_{cl}(t)$  herum. Dies führt dann auf exakt lösbare Pfadintegrale. Wir wollen dies im folgenden präzisieren.

Der klassische Pfad  $\vec{q}_{cl}(t)$  sei gegeben durch die Lösung der Euler-Lagrange-Gleichungen (3.3) und die zugehörige Wirkung sei

$$S_{cl} \equiv S[\vec{q}_{cl}(t)] = \int_{t_a}^{t_b} dt L(\vec{q}_{cl}, \dot{\vec{q}}_{cl}, t) .$$

Wir führen die **Variation** um den klassischen Pfad durch die Gleichung

$$\vec{r}(t) \equiv \vec{q}(t) - \vec{q}_{cl}(t) \tag{3.67}$$

ein. Offenbar gilt

$$\vec{r}(t_a) = \vec{r}(t_b) \equiv 0 ,$$

weil der Anfangspunkt  $\vec{q}_a = \vec{q}(t_a)$  und der Endpunkt  $\vec{q}_b = \vec{q}(t_b)$  bei allen Pfaden im Pfadintegral identisch sind, also nicht variiert werden. Wir entwickeln die Lagrange-Funktion bis zur Ordnung  $O(\vec{r}^2)$  um den klassischen Pfad,

$$L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) \simeq L(\vec{q}_{\text{cl}}, \dot{\vec{q}}_{\text{cl}}, t) + \sum_i \left( r_i \frac{\partial L}{\partial q_i} \Big|_{\vec{q}=\vec{q}_{\text{cl}}} + \dot{r}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \Big|_{\vec{q}=\vec{q}_{\text{cl}}} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left( r_i r_j \frac{\partial^2 L}{\partial q_i \partial q_j} \Big|_{\vec{q}=\vec{q}_{\text{cl}}} + 2 r_i \dot{r}_j \frac{\partial^2 L}{\partial q_i \partial \dot{q}_j} \Big|_{\vec{q}=\vec{q}_{\text{cl}}} + \dot{r}_i \dot{r}_j \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} \Big|_{\vec{q}=\vec{q}_{\text{cl}}} \right), \quad (3.68)$$

wobei wir die Komponenten von  $\vec{r}(t)$  mit  $r_i(t)$ ,  $i = x, y, z$ , bezeichnet haben. Für das Folgende benutzen wir, dass die gemischte zweite Ableitung von  $L$  für Lagrange-Funktionen vom Typ (3.34) verschwindet. Eingesetzt in das Wirkungsintegral erhalten wir

$$\begin{aligned} S[\vec{q}(t)] &\simeq \int_{t_a}^{t_b} dt \left[ L(\vec{q}_{\text{cl}}, \dot{\vec{q}}_{\text{cl}}, t) + \sum_i \left( r_i \frac{\partial L}{\partial q_i} \Big|_{\vec{q}=\vec{q}_{\text{cl}}} + \dot{r}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \Big|_{\vec{q}=\vec{q}_{\text{cl}}} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left( r_i r_j \frac{\partial^2 L}{\partial q_i \partial q_j} \Big|_{\vec{q}=\vec{q}_{\text{cl}}} + \dot{r}_i \dot{r}_j \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} \Big|_{\vec{q}=\vec{q}_{\text{cl}}} \right) \right] \\ &= S_{\text{cl}} + \int_{t_a}^{t_b} dt \sum_i r_i \left( \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \Big|_{\vec{q}=\vec{q}_{\text{cl}}} \\ &\quad + \int_{t_a}^{t_b} dt \left[ \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 - \frac{1}{2} \vec{r}^T V''(\vec{q}_{\text{cl}}, t) \vec{r} \right], \end{aligned} \quad (3.69)$$

wobei wir im Term  $\sim O(\vec{r})$  partiell integriert und ausgenutzt haben, dass die Variation von  $\vec{r}(t)$  bei  $t_a$  und  $t_b$  verschwindet. Außerdem haben wir aufgrund von Gl. (3.34)

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} \Big|_{\vec{q}=\vec{q}_{\text{cl}}} &= m \delta_{ij}, \\ \frac{\partial^2 L}{\partial q_i \partial q_j} \Big|_{\vec{q}=\vec{q}_{\text{cl}}} &= - \frac{\partial^2 V(\vec{q}, t)}{\partial q_i \partial q_j} \Big|_{\vec{q}=\vec{q}_{\text{cl}}} \equiv -V''_{ij}(\vec{q}_{\text{cl}}, t) \end{aligned}$$

benutzt. Die letzte Gleichung stellt das  $(ij)$ -Element der Matrix  $V''$  der zweiten Ableitungen des Potentials  $V$  nach den Koordinaten dar. Der zweite Term in Gl. (3.69) verschwindet aufgrund der Euler-Lagrange-Gleichungen (3.3) und wir erhalten

$$S[\vec{q}(t)] \simeq S_{\text{cl}} + \int_{t_a}^{t_b} dt \left[ \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 - \frac{1}{2} \vec{r}^T V''(\vec{q}_{\text{cl}}, t) \vec{r} \right]. \quad (3.70)$$

Wenn wir diesen Ausdruck in das Pfadintegral (3.33) einsetzen, können wir den Beitrag der klassischen Wirkung aus dem Integral herausziehen, weil er nicht von den Integrationsvariablen  $\vec{q}_n$  abhängt. Außerdem können wir letztere aufgrund von Gl. (3.67) durch die Variablen  $\vec{r}_n$  ersetzen. Diese Variablensubstitution für das Pfadintegral hat die Jacobi-Determinante eins, weshalb sofort folgt

$$\langle \vec{q}_b, t_b | \vec{q}_a, t_a \rangle \simeq \mathcal{N} e^{iS_{\text{cl}}/\hbar} \int_{\vec{r}(t_a)=0}^{\vec{r}(t_b)=0} \mathcal{D}\vec{r} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left[ \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 - \frac{1}{2} \vec{r}^T V''(\vec{q}_{\text{cl}}, t) \vec{r} \right] \right\}. \quad (3.71)$$

### 3 Pfadintegrale

Das Pfadintegral ist wieder vom Typ eines (unendlich dimensionalen) Gauß-Integrals und kann exakt gelöst werden. Wir demonstrieren dies explizit für den **eindimensionalen** Fall. Dazu schreiben wir das Pfadintegral in Gl. (3.71) (inklusive des Normierungsfaktors  $\mathcal{N}$ ) zunächst in der Form von Gl. (3.32), also wo wir über  $N - 1$  Variable  $r_n$  integrieren,

$$I(t_b, t_a) \equiv \sqrt{\frac{m}{2\pi i\tau\hbar}}^N \int \prod_{n=1}^{N-1} dr_n \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^N \tau \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{r_n - r_{n-1}}{\tau} \right)^2 - \frac{1}{2} V_n'' r_n^2 \right] \right\}, \quad (3.72)$$

wobei wir

$$V_n'' \equiv V''(q_{\text{cl},n}, t_{n-1} + \lambda\tau)$$

abgekürzt haben.

**12.7.2012**

Der Exponent in Gl. (3.72) hat die folgende Form:

$$\begin{aligned} - \sum_{n=1}^N \left[ \frac{m}{2i\tau\hbar} (r_n - r_{n-1})^2 + \frac{i\tau}{2\hbar} V_n'' r_n^2 \right] &= -\frac{m}{2i\tau\hbar} (r_0^2 - 2r_0r_1 + r_1^2 + r_1^2 - 2r_1r_2 + r_2^2 + \dots \\ &\quad + r_{N-2}^2 - 2r_{N-2}r_{N-1} + r_{N-1}^2 + r_{N-1}^2 - 2r_{N-1}r_N + r_N^2) \\ &\quad - \frac{i\tau}{2\hbar} (V_1'' r_1^2 + V_2'' r_2^2 + \dots + V_N'' r_N^2) \\ &\equiv -\frac{m}{2i\tau\hbar} (2r_1^2 - 2r_1r_2 + 2r_2^2 + \dots + 2r_{N-2}^2 - 2r_{N-2}r_{N-1} + 2r_{N-1}^2) \\ &\quad - \frac{i\tau}{2\hbar} (V_1'' r_1^2 + V_2'' r_2^2 + \dots + V_{N-1}'' r_{N-1}^2), \end{aligned} \quad (3.73)$$

wobei wir ausgenutzt haben, dass  $r_0 \equiv r_a = 0$ ,  $r_N \equiv r_b = 0$ . Das Ergebnis kann als Produkt von Zeilenvektor, Matrix und Spaltenvektor geschrieben werden,

$$-\frac{m}{2i\tau\hbar} \sum_{n=1}^N \left[ (r_n - r_{n-1})^2 - \frac{\tau^2}{m} V_n'' r_n^2 \right] \equiv -\frac{m}{2i\tau\hbar} \vec{r}^T \mathbf{A} \vec{r}, \quad (3.74)$$

wobei  $\vec{r} \equiv (r_1, r_2, r_3, \dots, r_{N-1})^T$  und

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 + c_1 & -1 & 0 & \dots & & 0 \\ -1 & 2 + c_2 & -1 & 0 & \dots & \vdots \\ 0 & -1 & 2 + c_3 & -1 & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 2 + c_{N-2} & -1 \\ 0 & & \dots & 0 & -1 & 2 + c_{N-1} \end{pmatrix}, \quad (3.75)$$

mit  $c_n \equiv -\tau^2 V_n''/m$ . Gleichung (3.72) nimmt damit die kompakte Form

$$I(t_b, t_a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\tau\hbar}}^N \int d^{N-1}\vec{r} \exp \left( -\frac{m}{2i\tau\hbar} \vec{r}^T \mathbf{A} \vec{r} \right)$$



an. Die  $[(N - 1) \times (N - 1)]$ -Matrix  $A$  ist symmetrisch, also kann sie mit Hilfe einer **orthogonalen Transformation  $O$  diagonalisiert werden**,  $O^T \equiv O^{-1}$  und  $\det O = +1$ ,

$$D \equiv \text{diag}(a_1, a_2, \dots, a_{N-1}) \equiv O A O^T, \quad (3.76)$$

wobei  $a_n$  die Eigenwerte von  $A$  sind. Multiplikation mit  $O^T$  von links und mit  $O$  von rechts liefert

$$O^T D O = A,$$

also

$$\begin{aligned} I(t_b, t_a) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \tau \hbar}}^N \int d^{N-1} \vec{r} \exp\left(-\frac{m}{2i\tau\hbar} \vec{r}^T O^T D O \vec{r}\right) \\ &\equiv \sqrt{\frac{m}{2\pi i \tau \hbar}}^N \int d^{N-1} \vec{s} \exp\left(-\frac{m}{2i\tau\hbar} \vec{s}^T D \vec{s}\right) \\ &\equiv \sqrt{\frac{m}{2\pi i \tau \hbar}}^N \int \prod_{n=1}^{N-1} ds_n \exp\left(-\frac{m}{2i\tau\hbar} \sum_{n=1}^{N-1} a_n s_n^2\right), \end{aligned} \quad (3.77)$$

wobei wir die Variablensubstitution

$$\vec{s} \equiv O \vec{r}, \quad \vec{s}^T \equiv \vec{r}^T O^T,$$

vorgenommen haben. Die zugehörige Jacobi-Determinante ist  $\mathcal{J} \equiv \det O = +1$ , so dass sich am Integrationsmaß nichts ändert. Die  $N - 1$  Gauß-Integrale in Gl. (3.77) können wieder mit der Formel (3.29) gelöst werden, so dass

$$I(t_b, t_a) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \tau \hbar}}^N \sqrt{\frac{2\pi i \tau \hbar}{m}}^{N-1} \prod_{n=1}^{N-1} a_n^{-1/2} \equiv \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar}} (\tau \det A)^{-1/2}, \quad (3.78)$$

wobei wir aufgrund von Gl. (3.76) und  $\det O \equiv \det O^T = +1$  die Identität

$$\det D = \prod_{n=1}^{N-1} a_n = \det(O A O^T) = \det O \det A \det O^T = \det A \quad (3.79)$$

benutzen konnten. Wir berechnen nun die Determinante der Matrix (3.75) mit Hilfe des Determinantenentwicklungssatzes,

$$\varphi_{N-1} \equiv \tau \det A = (2 + c_{N-1}) \varphi_{N-2} - \varphi_{N-3}, \quad (3.80)$$

wobei

$$\varphi_{N-2} = \tau \begin{vmatrix} 2 + c_1 & -1 & 0 & \cdots & & 0 \\ -1 & 2 + c_2 & -1 & 0 & \cdots & \vdots \\ 0 & -1 & 2 + c_3 & -1 & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 2 + c_{N-3} & -1 \\ 0 & & \cdots & 0 & -1 & 2 + c_{N-2} \end{vmatrix},$$

$$\varphi_{N-3} = -\tau \begin{vmatrix} 2+c_1 & -1 & 0 & \cdots & & 0 \\ -1 & 2+c_2 & -1 & 0 & \cdots & \vdots \\ 0 & -1 & 2+c_3 & -1 & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 2+c_{N-3} & 0 \\ 0 & & \cdots & 0 & -1 & -1 \end{vmatrix}$$

$$\equiv \tau \begin{vmatrix} 2+c_1 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2+c_2 & -1 & 0 & \vdots \\ 0 & -1 & 2+c_3 & -1 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 2+c_{N-3} \end{vmatrix}.$$

Daraus ergibt sich die Rekursionsformel

$$\varphi_{n+1} = (2 + c_{n+1}) \varphi_n - \varphi_{n-1}, \quad n = 1, \dots, N - 2, \quad (3.81)$$

wobei  $\varphi_1 = \tau(2 + c_1)$  und  $\varphi_0 = \tau$  gesetzt wird. Diese Rekursionsformel kann man mit der Definition der  $c_n$  in der Form

$$\frac{\varphi_{n+1} - 2\varphi_n + \varphi_{n-1}}{\tau^2} = \frac{c_{n+1}}{\tau^2} \varphi_n \equiv -\frac{V''_{n+1}}{m} \varphi_n \quad (3.82)$$

schreiben. Im Limes  $\tau \rightarrow 0$  wird daraus die **Differentialgleichung**

$$\frac{d^2\varphi(t)}{dt^2} = -\frac{V''(t)}{m} \varphi(t). \quad (3.83)$$

Zur Lösung benötigen wir die **Anfangsbedingungen**, welche lauten

$$\begin{aligned} \varphi(t_a) &\equiv \lim_{\tau \rightarrow 0} \varphi_0 = \lim_{\tau \rightarrow 0} \tau \equiv 0, \\ \frac{d\varphi(t_a)}{dt} &\equiv \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\varphi_1 - \varphi_0}{\tau} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\tau(2 + c_1) - \tau}{\tau} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \left(1 - \frac{\tau^2 V''_1}{m}\right) \equiv 1. \end{aligned} \quad (3.84)$$

Weiter kommen wir nur, wenn wir das Potential  $V(\vec{q}, t)$  spezifizieren und die Differentialgleichung (3.83) explizit bis zum Zeitpunkt  $t_b$  lösen. Dies liefert eine Funktion

$$f(t_b, t_a) \equiv \varphi(t_b) \equiv \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \tau \rightarrow 0}} \varphi_N = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \tau \rightarrow 0}} \varphi_{N-1} = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \tau \rightarrow 0}} (\tau \det A), \quad (3.85)$$

die von den Anfangsbedingungen (3.84) zum Zeitpunkt  $t_a$  abhängt. Diese soll im nächsten Abschnitt als Beispiel für den eindimensionalen harmonischen Oszillator bestimmt werden.

Wir fassen die Ergebnisse dieses Abschnitts zusammen. Mit den Glgen. (3.71), (3.78) und (3.85) lautet die **Übergangsamplitude (bzw. der Propagator) in der semi-klassischen Näherung**

$$\langle \vec{q}_b, t_b | \vec{q}_a, t_a \rangle \equiv G(\vec{q}_b, t_b; \vec{q}_a, t_a) \simeq \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar f(t_b, t_a)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{\text{cl}}\right). \quad (3.86)$$

## 3.8 Propagator für den eindimensionalen harmonischen Oszillator

Der eindimensionale harmonische Oszillator hat das Potential

$$V(q) = \frac{1}{2} m \omega^2 q^2, \quad (3.87)$$

wobei  $\omega$  die Eigenfrequenz des Oszillators ist. Für dieses Potential ist die semiklassische Näherung, die wir im vorangegangenen Abschnitt besprochen haben, **exakt**, denn die Entwicklung des Potentials bricht automatisch nach der zweiten Ordnung ab,

$$V'' = m \omega^2 = \text{const.}, \quad V''' \equiv 0.$$

Die Differentialgleichung (3.83) ist einfach die Bewegungsgleichung für den harmonischen Oszillator,

$$\frac{d^2 \varphi(t)}{dt^2} + \omega^2 \varphi(t) = 0, \quad (3.88)$$

mit der wohlbekanntten Lösung

$$\varphi(t) = A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t). \quad (3.89)$$

Die Anfangsbedingungen (3.84) liefern

$$\begin{aligned} \varphi(t_a) &= A \cos(\omega t_a) + B \sin(\omega t_a) \equiv 0, \\ \frac{d\varphi(t_a)}{dt} &= -\omega A \sin(\omega t_a) + \omega B \cos(\omega t_a) = 1, \end{aligned}$$

woraus wir die Konstanten  $A$  und  $B$  bestimmen können:

$$\begin{aligned} A &= -B \tan(\omega t_a), \\ B &= \frac{\cos(\omega t_a)}{\omega}, \end{aligned}$$

so dass die spezielle Lösung zum Zeitpunkt  $t_b$  lautet

$$\begin{aligned} f(t_b, t_a) &= -B \tan(\omega t_a) \cos(\omega t_b) + B \sin(\omega t_b) \\ &= \frac{\cos(\omega t_a)}{\omega} [\sin(\omega t_b) - \tan(\omega t_a) \cos(\omega t_b)] \\ &= \frac{1}{\omega} [\sin(\omega t_b) \cos(\omega t_a) - \cos(\omega t_b) \sin(\omega t_a)] \\ &\equiv \frac{\sin[\omega(t_b - t_a)]}{\omega}. \end{aligned} \quad (3.90)$$

Um den Propagator (3.86) zu bestimmen, müssen wir noch die Wirkung entlang des klassischen Weges berechnen. Dies ist ein wenig mühsam, aber ohne große Schwierigkeiten möglich. Zunächst ist der klassische Weg natürlich eine Lösung der Euler-Lagrange-Gleichung für den harmonischen Oszillator,

$$0 = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = m \ddot{q} + m \omega^2 q,$$

### 3 Pfadintegrale

oder

$$\ddot{q} + \omega^2 q = 0 .$$

Die Lösung ist wohlbekannt,

$$q_{\text{cl}}(t) = A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t) . \quad (3.91)$$

Die Konstanten  $A$  und  $B$  bestimmen wir nun durch die vorgegebenen Anfangs- und Endbedingungen (die natürlich auch für den klassischen Weg gelten)

$$\begin{aligned} q_a \equiv q_{\text{cl}}(t_a) &= A \cos(\omega t_a) + B \sin(\omega t_a) , \\ q_b \equiv q_{\text{cl}}(t_b) &= A \cos(\omega t_b) + B \sin(\omega t_b) . \end{aligned}$$

Man überzeuge sich davon, dass dies

$$\begin{aligned} A &= \frac{q_a \sin(\omega t_b) - q_b \sin(\omega t_a)}{\sin[\omega(t_b - t_a)]} , \\ B &= \frac{q_b \cos(\omega t_a) - q_a \cos(\omega t_b)}{\sin[\omega(t_b - t_a)]} \end{aligned} \quad (3.92)$$

liefert. Eingesetzt in Gl. (3.91) erhalten wir

$$q_{\text{cl}}(t) = \frac{q_a \sin[\omega(t_b - t)] + q_b \sin[\omega(t - t_a)]}{\sin[\omega(t_b - t_a)]} . \quad (3.93)$$

Die Zeitableitung ist

$$\dot{q}_{\text{cl}}(t) = \omega \frac{q_b \cos[\omega(t - t_a)] - q_a \cos[\omega(t_b - t)]}{\sin[\omega(t_b - t_a)]} . \quad (3.94)$$

Setzen wir dies in die Lagrange-Funktion ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} L(q_{\text{cl}}, \dot{q}_{\text{cl}}, t) &= \frac{m}{2} \dot{q}_{\text{cl}}^2 - \frac{m}{2} \omega^2 q_{\text{cl}}^2 \\ &= \frac{m\omega^2}{2 \sin^2[\omega(t_b - t_a)]} \left\{ q_b^2 \cos^2[\omega(t - t_a)] + q_a^2 \cos^2[\omega(t_b - t)] \right. \\ &\quad - 2 q_a q_b \cos[\omega(t - t_a)] \cos[\omega(t_b - t)] \\ &\quad - q_b^2 \sin^2[\omega(t - t_a)] - q_a^2 \sin^2[\omega(t_b - t)] \\ &\quad \left. - 2 q_a q_b \sin[\omega(t - t_a)] \sin[\omega(t_b - t)] \right\} \\ &= \frac{m\omega^2}{2 \sin^2[\omega(t_b - t_a)]} \left\{ q_b^2 \cos[2\omega(t - t_a)] + q_a^2 \cos[2\omega(t_b - t)] \right. \\ &\quad \left. - 2 q_a q_b \cos[\omega(t_b + t_a - 2t)] \right\} . \end{aligned} \quad (3.95)$$

Setzen wir dies in das Wirkungsintegral ein, müssen wir die folgenden drei Integrale berechnen:

$$\begin{aligned} \int_{t_a}^{t_b} dt \cos[2\omega(t - t_a)] &= \int_0^{t_b - t_a} dz \cos(2\omega z) = \frac{1}{2\omega} \sin[2\omega(t_b - t_a)] , \\ \int_{t_a}^{t_b} dt \cos[2\omega(t_b - t)] &= - \int_{t_b - t_a}^0 dz \cos(2\omega z) = \frac{1}{2\omega} \sin[2\omega(t_b - t_a)] , \\ \int_{t_a}^{t_b} dt \cos[\omega(t_b + t_a - 2t)] &= - \frac{1}{2} \int_{t_b - t_a}^{t_a - t_b} dz \cos(\omega z) = \frac{1}{\omega} \sin[\omega(t_b - t_a)] . \end{aligned}$$

Also lautet die klassische Wirkung

$$\begin{aligned}
 S_{\text{cl}} &= \int_{t_a}^{t_b} dt L(q_{\text{cl}}, \dot{q}_{\text{cl}}, t) \\
 &= \frac{m\omega}{2 \sin^2 [\omega(t_b - t_a)]} \left\{ \frac{q_a^2 + q_b^2}{2} \sin [2\omega(t_b - t_a)] - 2 q_a q_b \sin [\omega(t_b - t_a)] \right\} \\
 &= \frac{m\omega}{2 \sin [\omega(t_b - t_a)]} \left\{ (q_a^2 + q_b^2) \cos [\omega(t_b - t_a)] - 2 q_a q_b \right\} . \quad (3.96)
 \end{aligned}$$

Damit und mit Gl. (3.90) lautet der **Propagator des eindimensionalen harmonischen Oszillators**

$$\begin{aligned}
 \langle \vec{q}_b, t_b | \vec{q}_a, t_a \rangle &\equiv G(\vec{q}_b, t_b; \vec{q}_a, t_a) \\
 &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin [\omega(t_b - t_a)]}} \exp \left\{ \frac{im\omega (q_a^2 + q_b^2) \cos [\omega(t_b - t_a)] - 2 q_a q_b}{2\hbar \sin [\omega(t_b - t_a)]} \right\} . \quad (3.97)
 \end{aligned}$$

# Literaturverzeichnis

- [1] W. Greiner, B. Müller, *Theoretische Physik Band 5: Quantenmechanik II – Symmetrien* (Harri Deutsch, Thun & Frankfurt am Main)
- [2] W. Greiner, *Theoretische Physik Band 6: Relativistische Quantenmechanik: Wellengleichungen* (Harri Deutsch, Thun & Frankfurt am Main)
- [3] R. Jelitto, *Theoretische Physik 5: Quantenmechanik II* (AULA-Verlag, Wiesbaden)
- [4] W. Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 5/2: Quantenmechanik – Methoden und Anwendungen* (Springer, Berlin)
- [5] J.J. Sakurai, J. Napolitano, *Modern Quantum Mechanics* (Pearson Addison Wesley, San Francisco)
- [6] F. Schwabl, *Quantenmechanik für Fortgeschrittene (QM II)* (Springer, Berlin)
- [7] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik III: Quantenmechanik* (Harri Deutsch, Thun & Frankfurt am Main)
- [8] R.P. Feynman, A.R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw Hill, New York)
- [9] <http://de.wikipedia.org/wiki/Wasserstoffatom>, 14.5.2012
- [10] <http://pdg.lbl.gov>
- [11] I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series, and Products* (Academic Press, San Diego)