

### III.3 Zweite Quantisierung der freien Klein–Gordon-Gleichung

In diesem Abschnitt wird der Übergang von einer Wellenfunktions- zu einer quantenfeldtheoretischen Beschreibung skizziert.

#### III.3.1 Zweite Quantisierung

Ersetzt man in der Lösung (III.7) der Klein–Gordon-Gleichung die klassischen Zahlen  $a_{\vec{p}}, b_{\vec{p}} \in \mathbb{C}$  durch (nicht-hermitesche) Operatoren  $\hat{a}_{\vec{p}}, \hat{b}_{\vec{p}}$  eines noch un spezifizierten Hilbert<sup>(q)</sup>-Raums mit den einfachen Vertauschungsrelationen

$$[\hat{a}_{\vec{p}}, \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger] = \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{q}), \quad [\hat{b}_{\vec{p}}, \hat{b}_{\vec{q}}^\dagger] = \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{q}) \quad (\text{III.10a})$$

sowie

$$[\hat{a}_{\vec{p}}, \hat{a}_{\vec{q}}] = [\hat{b}_{\vec{p}}, \hat{b}_{\vec{q}}] = [\hat{a}_{\vec{p}}, \hat{b}_{\vec{q}}] = [\hat{a}_{\vec{p}} \hat{b}_{\vec{q}}^\dagger] = \dots = 0, \quad (\text{III.10b})$$

für alle  $\vec{p}, \vec{q} \in \mathbb{R}^3$ , so wird die Wellenfunktion  $\phi(\mathbf{x})$  zu einem *Feldoperator*

$$\hat{\phi}(\mathbf{x}) = \int \left( \hat{a}_{\vec{p}} e^{-i\vec{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} + \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger e^{i\vec{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \right) \frac{\hbar c \, d^3\vec{p}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3 2E_{\vec{p}}}}. \quad (\text{III.11a})$$

Diese Substitution von kommutierenden Zahlen mit nicht-kommutierenden Operatoren wird gewöhnlich *zweite Quantisierung* genannt.

Die Kommutatoren (III.10) ähneln stark den Vertauschungsrelationen der bei der Quantisierung des harmonischen Oszillators eingeführten Leiteroperatoren  $\hat{a}$  und  $\hat{a}^\dagger$ . Somit werden jetzt die  $\hat{a}_{\vec{p}}$  und  $\hat{b}_{\vec{p}}$  bzw. die  $\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger$  und  $\hat{b}_{\vec{p}}^\dagger$  als *Vernichtungs-* bzw. *Erzeugungsoperatoren* bezeichnet.

Der zu  $\hat{\phi}(\mathbf{x})$  hermitesch konjugierte Operator lautet

$$\hat{\phi}(\mathbf{x})^\dagger = \int \left( \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger e^{i\vec{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} + \hat{b}_{\vec{p}} e^{-i\vec{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \right) \frac{\hbar c \, d^3\vec{p}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3 2E_{\vec{p}}}}. \quad (\text{III.11b})$$

Definiert man einen zum Feldoperator  $\hat{\phi}(\mathbf{x})$  kanonisch konjugierten Operator durch

$$\hat{\pi}(\mathbf{x}) \equiv \frac{1}{c} \partial_0 \hat{\phi}(\mathbf{x})^\dagger = \frac{i}{c} \int \left( \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger e^{i\vec{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} - \hat{b}_{\vec{p}} e^{-i\vec{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \right) \frac{E_{\vec{p}} \, d^3\vec{p}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3 2E_{\vec{p}}}}, \quad (\text{III.12})$$

so führen die verschiedenen Vertauschungsrelationen (III.10) zum Kommutator

$$[\hat{\phi}(t, \vec{x}), \hat{\pi}(t, \vec{y})] = i\hbar \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}). \quad (\text{III.13})$$

Hier sollen die Felder zur gleichen Zeit betrachtet werden. Diese Relation ist jetzt ähnlich dem kanonischen Kommutator  $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$  der Quantenmechanik.

Beweis der Relation (III.13): Das Einsetzen der Ausdrücke (III.11a) und (III.12), wobei der Letztere als Integral über die Variable  $\vec{q}$  geschrieben wird, in den Kommutator gibt

$$[\hat{\phi}(\mathbf{x}), \hat{\pi}(\mathbf{y})] = i\hbar \int \left( [\hat{a}_{\vec{p}}, \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger] e^{-i(\vec{p}\cdot\mathbf{x}-\vec{q}\cdot\mathbf{y})/\hbar} - [\hat{b}_{\vec{p}}, \hat{b}_{\vec{q}}] e^{i(\vec{p}\cdot\mathbf{x}-\vec{q}\cdot\mathbf{y})/\hbar} \right) \frac{d^3\vec{p} \, E_{\vec{q}} \, d^3\vec{q}}{(2\pi\hbar)^3 \sqrt{2E_{\vec{p}} 2E_{\vec{q}}}},$$

wobei die verschwindenden Kommutatoren  $[\hat{a}_{\vec{p}}, \hat{b}_{\vec{q}}]$  und  $[\hat{b}_{\vec{p}}^\dagger, \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger]$  schon weggelassen wurden. Mit Hilfe der Relationen (III.10a) wird die Integration nach  $\vec{q}$  trivial

$$\begin{aligned} [\hat{\phi}(\mathbf{x}), \hat{\pi}(\mathbf{y})] &= i\hbar \int \left[ \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{q}) e^{-i(\vec{p}\cdot\mathbf{x}-\vec{q}\cdot\mathbf{y})/\hbar} + \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{q}) e^{i(\vec{p}\cdot\mathbf{x}-\vec{q}\cdot\mathbf{y})/\hbar} \right] \frac{d^3\vec{p} \, E_{\vec{q}} \, d^3\vec{q}}{(2\pi\hbar)^3 \sqrt{2E_{\vec{p}} 2E_{\vec{q}}}}, \\ &= i\hbar \int \left[ e^{i[E_{\vec{p}}(y^0-x^0)-\vec{p}\cdot(\vec{y}-\vec{x})]/\hbar} + e^{i[E_{\vec{p}}(x^0-y^0)-\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{y})]/\hbar} \right] \frac{d^3\vec{p}}{2(2\pi\hbar)^3}. \end{aligned}$$

Mit  $x^0 = y^0 = ct$  ergibt sich das gesuchte Ergebnis. □

<sup>(q)</sup>D. HILBERT, 1862–1943

**Bemerkung:** Die komplizierten Faktoren von  $\hbar$ ,  $c$  und  $E_{\vec{p}}$ , die in der Substitution vor Gl. (III.7) eingeführt wurden und sich im Ausdruck des Feldoperators (III.11a) wieder finden, wurden eigentlich so gewählt, dass die Vertauschungsrelation (III.13) eine einfache Form annimmt.

### III.3.2 Physikalische Deutung

Um die physikalische Deutung der oben eingeführten Operatoren  $\hat{a}_{\vec{p}}$ ,  $\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger$ ,  $\hat{b}_{\vec{p}}$  und  $\hat{b}_{\vec{p}}^\dagger$  besser zu erkennen, werden jetzt zwei „übliche“ quantenmechanische Operatoren durch diese Leiteroperatoren ausgedrückt.

#### III.3.2 a Hamilton-Operator des freien Klein–Gordon–Feldes

Man kann zeigen, dass der Hamilton-<sup>(r)</sup>Operator für das Skalarfeld, dessen Dynamik durch die freie Klein–Gordon–Gleichung (III.4) beschrieben wird, durch

$$\hat{H} = \int \left[ \hat{\pi}(\mathbf{x})^\dagger \hat{\pi}(\mathbf{x}) + \vec{\nabla} \hat{\phi}(\mathbf{x})^\dagger \cdot \vec{\nabla} \hat{\phi}(\mathbf{x}) + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \hat{\phi}(\mathbf{x})^\dagger \hat{\phi}(\mathbf{x}) \right] d^3 \vec{x} \quad (\text{III.14})$$

gegeben ist.

Skizzenhaft ist die Klein–Gordon–Gleichung (III.4) die Bewegungsgleichung, die sich aus der Lagrange-<sup>(s)</sup>Dichte

$$\hat{\mathcal{L}}_{\text{KG}}[\hat{\phi}(\mathbf{x}), \partial^\mu \hat{\phi}(\mathbf{x})] = \partial_\mu \hat{\phi}(\mathbf{x})^\dagger \partial^\mu \hat{\phi}(\mathbf{x}) - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \hat{\phi}(\mathbf{x})^\dagger \hat{\phi}(\mathbf{x})$$

unter Nutzung der Euler-<sup>(t)</sup>Lagrange-Gleichung, entsprechend der Extremierung der Wirkung, herleiten lässt. Führt man eine Legendre-<sup>(u)</sup>Transformation dieser Dichte bezüglich  $\partial_0 \hat{\phi}(\mathbf{x})$  durch, so erhält man die Hamilton-Dichte, die den Integranden in Gl. (III.14) darstellt.

Setzt man den Ausdruck (III.11a) des Klein–Gordon–Feldes in diesen Hamilton-Operator ein, so findet man

$$\hat{H} = \int \left[ \frac{1}{2} (\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} + \hat{a}_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger) + \frac{1}{2} (\hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{\vec{p}} + \hat{b}_{\vec{p}} \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger) \right] E_{\vec{p}} d^3 \vec{p} = \int \left[ \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} + \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{\vec{p}} + \delta^{(3)}(\vec{0}) \right] E_{\vec{p}} d^3 \vec{p}, \quad (\text{III.15})$$

wobei die zweite Gleichung aus den Vertauschungsrelationen (III.10a) folgt. Bei den hermiteschen Operatoren  $\hat{N}_{\vec{p}}^{(a)} \equiv \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}}$  und  $\hat{N}_{\vec{p}}^{(b)} \equiv \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{\vec{p}}$  im rechten Glied erkennt man in Ähnlichkeit mit dem nicht-relativistischen quantenmechanischen harmonischen Oszillator die *Besetzungszahloperatoren* für jeden Typ von Teilchen ( $a$  und  $b$ ) mit einem gegebenen Impuls. Dazu stellt der Term  $\delta^{(3)}(\vec{0})$  die unphysikalische Vakuumenergie dar, die schon bei der Quantisierung des einfachen harmonischen Oszillator auftritt. Wichtig ist, dass beide Teilchenarten *positiv* zur Gesamtenergie beitragen, auch wenn in der Wellenfunktion-Beschreibung die Wellen des Typs  $b$  eine „negative Energie“ hatten.

Die Herleitung des Ausdrucks (III.15) ist ähnlich den Beweisen des Kommutators (III.13) oben oder der Beziehung (III.17) unten und wird der Leserin überlassen.

**Bemerkung:** Der Ausdruck (III.14) des Hamilton-Operators liefert die hier adoptierte Dimension des Klein–Gordon–Feldes, und zwar  $[\hat{\phi}] = [\text{M}^{1/2} \text{L}^{1/2} \text{T}^{-1}]$ . In einem System natürlicher Einheiten hat  $\hat{\phi}$  die Dimension einer Energie. Dazu geben die Kommutatoren (III.10a) die Dimension der Leiteroperatoren,  $[\hat{a}] = [\hat{b}] = [(\text{MLT}^{-1})^{-3/2}]$ .

#### III.3.2 b Teilchenzahloperator

Um zwischen den beiden Teilchenarten unterscheiden zu können, kann man den Operator

$$\hat{N} \equiv \frac{i}{\hbar c} \int \left[ \hat{\phi}(\mathbf{x})^\dagger \partial_0 \hat{\phi}(\mathbf{x}) - \hat{\phi}(\mathbf{x}) \partial_0 \hat{\phi}(\mathbf{x})^\dagger \right] d^3 \vec{x} \quad (\text{III.16})$$

<sup>(r)</sup>W. R. HAMILTON, 1805–1865    <sup>(s)</sup>J.-L. LAGRANGE, 1736–1813    <sup>(t)</sup>L. EULER, 1707–1783    <sup>(u)</sup>A.-M. LEGENDRE, 1752–1833

betrachten. Der Vergleich dieser Definition mit der Zeitkomponente des Viererstroms (III.8) weist auf die Erhaltung der entsprechenden physikalischen Größe — und zwar, des Erwartungswerts des Operators — hin.

Mit den Ausdrücken von  $\hat{\phi}(\mathbf{x})$  und  $\hat{\phi}(\mathbf{x})^\dagger$  in Abhängigkeit der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren und unter Verwendung der Vertauschungsrelationen der Letzteren ergibt sich

$$\hat{N} = \int \left[ \frac{1}{2} (\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} + \hat{a}_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger) - \frac{1}{2} (\hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{\vec{p}} + \hat{b}_{\vec{p}} \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger) \right] d^3\vec{p} = \int \left[ \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} - \hat{b}_{\vec{p}}^\dagger \hat{b}_{\vec{p}} \right] d^3\vec{p}. \quad (\text{III.17})$$

Beweis: Die Gleichungen (III.11) und (III.12), mit  $\hat{\phi}(\mathbf{x})^\dagger$  und  $\partial_0 \hat{\phi}(\mathbf{x})^\dagger$  bzw.  $\hat{\phi}(\mathbf{x})$  und  $\partial_0 \hat{\phi}(\mathbf{x})$  geschrieben als Integral über  $\vec{p}$  bzw.  $\vec{q}$ , führen zu

$$\begin{aligned} \hat{N} = \int \left[ (\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} + \hat{b}_{\vec{p}} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}) (\hat{a}_{\vec{q}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}/\hbar} - \hat{b}_{\vec{q}}^\dagger e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}/\hbar}) \left( \frac{E_{\vec{q}}}{E_{\vec{p}}} \right)^{1/2} \right. \\ \left. + (\hat{a}_{\vec{q}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}/\hbar} + \hat{b}_{\vec{q}}^\dagger e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}/\hbar}) (\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} - \hat{b}_{\vec{p}} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}) \left( \frac{E_{\vec{p}}}{E_{\vec{q}}} \right)^{1/2} \right] \frac{d^3\vec{p} d^3\vec{q}}{2(2\pi\hbar)^3} d^3\vec{x}. \end{aligned}$$

Multipliziert man die Produkte aus, so ergeben sich Terme der Art  $\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{q}} e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{x}/\hbar}$  mit entweder  $\pm i(\mathbf{p}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{x}/\hbar$  oder  $\pm i(\mathbf{p}+\mathbf{q})\cdot\mathbf{x}/\hbar$  im Exponenten. Durch die Integration über  $\vec{x}$  werden diese Exponentialfunktionen durch entsprechende Terme  $(2\pi\hbar)^3 \delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{q})$  oder  $(2\pi\hbar)^3 \delta^{(3)}(\vec{p}+\vec{q})$  ersetzt. Integriert man als nächstes über  $\vec{q}$ , so werden die zwei Faktoren  $\sqrt{E_{\vec{q}}/E_{\vec{p}}}$  und  $\sqrt{E_{\vec{p}}/E_{\vec{q}}}$  gleich 1. Dann tauchen alle Produkte von  $\hat{a}$  und  $\hat{b}$  bzw. von ihren adjungierten Operatoren als Kommutatoren auf, die dank Gl. (III.10b) verschwinden. Die restlichen Terme entsprechen gerade dem zweiten Glied in Gl. (III.17).

Auf Gl. (III.17) erkennt man wieder die Besetzungszahloperatoren für jede Teilchenart, doch jetzt tragen sie mit entgegengesetzten Vorzeichen zu  $\hat{N}$  bei. Dies lässt sich einfach interpretieren, indem man sich vorstellt, dass die zugehörige Erhaltungsgröße irgendeiner erhaltenen „Ladung“ entspricht, wobei die Teilchen des Typs  $a$  eine positive Ladung und die Teilchen des Typs  $b$  eine negative, entgegengesetzte Ladung tragen.

Beide Teilchenarten besitzen also die gleiche Masse  $m$  — sie genügen derselben Klein–Gordon-Gleichung —, doch ihre Ladungen sind entgegengesetzt: bei dem Typ  $b$  handelt es sich definitionsgemäß um die *Antiteilchen* zum Typ  $a$ .

Als Beispiel kann man sich vorstellen, dass die durch  $\hat{a}_{\vec{p}}$  und  $\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger$  beschriebenen Teilchen positiv geladene Pionen  $\pi^+$  sind. Diese haben Spin 0 — so dass ihre Dynamik durch die Klein–Gordon-Gleichung beschrieben wird —, haben eine positive elektrische Ladung  $Q = +1$  und einen positiven Isospin  $I_3 = +1$ .<sup>(23)</sup> Das dazugehörige Antiteilchen, das durch die Operatoren  $\hat{b}_{\vec{p}}$  und  $\hat{b}_{\vec{p}}^\dagger$  beschrieben wird, ist das negativ geladene Pion  $\pi^-$ , mit derselben Masse  $m_\pi \simeq 139,6 \text{ MeV}/c^2$ , demselben Spin 0 und den entgegengesetzten Ladungen  $Q = -1$  und  $I_3 = -1$ .

### III.3.2 c Interpretation der Leiteroperatoren

Somit lässt die Feynman–Stückelberg-Interpretation der Quanten des Typs  $b$  als Antiteilchen mit positiver Energie einfach als natürliche Folgerung des Formalismus wiederentdecken.

Die Wirkungen der unterschiedlichen Leiteroperatoren lassen sich wie folgt zusammenfassen:

- $\hat{a}_{\vec{p}}$  vernichtet ein Teilchen mit Impuls  $\vec{p}$ , das also im Anfangszustand eines Zerfalls- oder Streuprozesses vorhanden sein muss. Somit steht dieser Vernichter für ein *einlaufendes Teilchen*.
- $\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger$  erzeugt ein Teilchen mit Impuls  $\vec{p}$ , das sich also im Endzustand eines Zerfalls oder Stoßes befinden wird: dieser Erzeugungsoperator repräsentiert ein *auslaufendes Teilchen*.
- $\hat{b}_{\vec{p}}$  vernichtet ein *einlaufendes Antiteilchen* mit Impuls  $\vec{p}$ .
- $\hat{b}_{\vec{p}}^\dagger$  erzeugt ein *auslaufendes Antiteilchen* mit Impuls  $\vec{p}$ .

<sup>(23)</sup> Im Quark-Modell gilt  $\pi^+ = u\bar{d}$ , wobei das  $u$ -Quark und das  $\bar{d}$ -Antiquark beide den Isospin  $+\frac{1}{2}$  haben.

Wenn der Feldoperator  $\hat{\phi}(\mathbf{x})$  hermitesch ist, so dass die entsprechende Wellenfunktion  $\phi(\mathbf{x}) = \langle \hat{\phi}(\mathbf{x}) \rangle$  reelle Werte annimmt, dann gilt  $\hat{a}_{\vec{p}} = \hat{b}_{\vec{p}}$  für jeden  $\vec{p}$ : das Teilchen ist sein eigenes Antiteilchen — als Beispiel sei das neutrale Pion  $\pi^0$  genannt. Dieser Fall wird länger in Abschn. [IV.2](#) diskutiert.

**Bemerkung:** Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren  $\hat{a}_{\vec{p}}^\dagger$ ,  $\hat{a}_{\vec{p}}$ ,  $\hat{b}_{\vec{p}}^\dagger$  und  $\hat{b}_{\vec{p}}$  — und somit der Feldoperator  $\hat{\phi}(\mathbf{x})$ , dessen hermitesch Konjugierter und deren Ableitungen — sind Operatoren auf einem (bosonischen) *Fock*<sup>(v)</sup>-Raum, der den geeigneten Hilbert-Raum für Viel-Teilchen-Systeme darstellt. Ein besonderer Zustand dieses Raums ist der *Vakuumzustand*  $|0\rangle$ , der so definiert ist, dass  $\hat{a}_{\vec{p}}|0\rangle = \hat{b}_{\vec{p}}|0\rangle = |\emptyset\rangle$  für jeden  $\vec{p}$  gilt, wobei  $|\emptyset\rangle$  den Null-Vektor des Hilbert-Raums bezeichnet.<sup>(24)</sup>

## Literatur

- Landau & Lifschitz, Band IV [\[17\]](#), Kap. II § 10–12.
- Nachtmann [\[18\]](#), Kap. 3.2.
- Schwabl [\[2\]](#), Kap. 5.1–5.2.

<sup>(24)</sup>Üblicherweise wird eher einfach  $\hat{a}_{\vec{p}}|0\rangle = \hat{b}_{\vec{p}}|0\rangle = 0$  geschrieben.

<sup>(v)</sup>V. A. FOCK, 1898–1974