

Zwei-Fermionen-Systeme in der Relativistischen Schrödinger-Theorie

Von der Fakultät Mathematik und Physik der Universität Stuttgart
zur Erlangung der Würde eines
Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)
genehmigte Abhandlung

vorgelegt von

Stefanie Pruß-Hunzinger
geboren in Ruit auf den Fildern

Hauptberichter: Prof. Dr. Hans-Rainer Trebin
Mitberichter: Prof. Dr. Dr. h.c. Wolfgang Weidlich
Betreuer: Dr. Manfred Sorg
Tag der mündlichen Prüfung: 11.05.2007

II. Institut für Theoretische Physik
Universität Stuttgart

2007

Inhaltsverzeichnis

Summary	9
1 Einleitung und Zusammenfassung	13
2 Grundlagen der RST	17
2.1 Einführung und Motivation	17
2.2 Materie-Dynamik	19
2.2.1 Die Wellenfunktion Ψ	19
2.2.2 Die Intensitätsmatrix \mathcal{I}	20
2.2.3 Der Hamiltonoperator \mathcal{H}_μ	20
2.3 Die Eichfelder und ihre Dynamik	22
2.3.1 Konnexion \mathcal{A}_μ und Bündelkrümmung $\mathcal{F}_{\mu\nu}$	22
2.3.2 Eichfelddynamik und Erhaltungssätze	23
2.4 Ströme und Erhaltungssätze	24
2.4.1 RST-Ströme	24
2.4.2 Maxwell-Ströme	25
2.4.3 Der Kompatibilitätstensor	26
3 RST-Felder und ihre Dynamik in einem Zwei-Fermionen-System	29
3.1 Die Zwei-Fermionen-Wellenfunktion Ψ	29

3.2	Elektromagnetische Felder und Austauschfelder in einem Zwei-Fermionen-System	30
3.3	RST- und Maxwell-Ströme in einem Zwei-Fermionen-System	33
3.3.1	RST-Ströme	34
3.3.2	Maxwell-Ströme	37
3.3.3	Normierung der Ströme	38
3.3.4	Der Zwei-Fermionen-Kompatibilitätstensor \mathcal{K}	40
3.3.5	Mechanismus der Selbstwechselwirkungen	42
3.3.6	Tabellarischer Überblick über die in der RST auftretenden Ströme	43
4	Energie-Impulsdichten und Energiefunktionale für ein Zwei-Fermionen-System	45
4.1	Herleitung der Energie-Impulsdichten und Energien	46
4.1.1	Quellgleichungen für die Energie-Impulsdichten	46
4.1.2	Materiedichte ${}^{(D)}T_{\mu\nu}$ und Materieenergie E_D	49
4.1.3	Externe Wechselwirkungsdichte ${}^{(es)}T_{\mu\nu}$ und externe Wechselwirkungsenergie E_{es}	50
4.1.4	Eichfeldldichte ${}^{(G)}T_{\mu\nu}$ und Eichfeldenergie E_G	51
4.2	Energie-Impulsdichten unter Verwendung des Noether-Theorems	53
4.2.1	Wirkungsprinzip und Lagrange-Dichte	53
4.2.2	Das Noether-Theorem	55
4.3	Das Gesamtenergiefunktional E_{TX}	57
4.4	Tabellarischer Überblick über die Energien und Energie-Impulsdichten in der RST	58
5	Relativistisches Energieeigenwertproblem und nichtrelativistische Näherung	59

5.1	Stationäre Zustände	59
5.2	Relativistisches Eigenwertproblem	61
5.2.1	Poisson-Gleichungen	63
5.2.2	Elektrostatische Näherung	67
5.2.3	Elektrostatische Näherung des relativistischen Eigenwertproblems	69
5.2.4	Nichtrelativistische Näherung	70
6	Heliumähnliche Systeme	75
6.1	Ortho- und Parazustände bei heliumähnlichen Ionen	76
6.2	Symmetrie des Grundzustands	76
6.2.1	Eigenschaften der $ns^2\ ^1S_0$ Zustände von heliumähnlichen Ionen	82
6.3	Masseeigenwertgleichungen	82
6.4	Poisson-Gleichungen	84
6.4.1	Poisson-Gleichung für die elektrostatischen Potentiale $^{(a)}A_0(r)$	84
6.4.2	Magnetische Poisson-Gleichungen	85
6.4.2.1	Poisson-Gleichung für die magnetostatischen Potentiale $A_a(r)$	85
6.4.2.2	Poisson-Gleichung für das magnetische Austauschpotential $B(r)$	86
6.4.2.3	Isotrope magnetische Poisson-Gleichung	87
6.5	Energiefunktionale	87
6.5.1	Materieenergie E_D	87
6.5.2	Interne Wechselwirkungsenergie E_G	90
6.5.3	Externe Wechselwirkungsenergie E_{sx}	92
6.5.4	Gesamtenergie E''_{TX} der $ns^2\ ^1S_0$ -Zustände	94

6.6	Problem mit der Korrelationsenergie E_C in der RST beim Grundzustand des Parasytems	95
6.7	Existieren auch nichtradialsymmetrische Lösungen?	96
7	Relativistische Ionisierungsenergien	101
7.1	Semiklassische Ionisierungsenergien	102
7.2	Selbstwechselwirkung	107
7.2.1	Bestimmung des Selbstwechselwirkungsparameters u	109
7.2.2	Vergleich der verschiedenen Ansätze mit Selbstwechselwirkung	109
7.3	Ionisierungsenergien mit Selbstwechselwirkung	115
8	Zusammenfassung und Ausblick	119
8.1	Ergebnisse der Dissertation	119
8.2	Ausblick	120
	Anhang	120
A	Nachweis für die Existenz von Lösungen $\mathcal{H}_\mu(x)$ der Hamiltonschen Dynamik	121
B	Abelsche Symmetriebrechung	123
C	Der Hartree-Fock-Ansatz	127
C.1	Hartree-Fock-Gleichungen für $N = 2$	127
D	Einteilchensysteme	131
D.1	Der Grundzustand in wasserstoffähnlichen Systemen	131
D.2	Einteilchenenergie E_T	133
E	Nichtrelativistische Näherung für die Materieenergie E_D	137

INHALTSVERZEICHNIS	7
--------------------	---

Symbolverzeichnis	143
-------------------	-----

Abbildungsverzeichnis	149
-----------------------	-----

Tabellenverzeichnis	151
---------------------	-----

Literaturverzeichnis	155
----------------------	-----

Summary

As far as processes concerning the “microcosm” are considered it is commonly accepted that quantum field theory (QFT) is the best theory to describe these processes. The considerable successes of QFT, e.g. concerning the calculation of the magnetic momentum of the electron by using quantum electrodynamics (QED), consolidate our faith towards that theory. Nevertheless there are some problems that QED is at a loss to explain; among these is the description of bound states, where it is mostly not possible to produce exact analytical results.

The “Relativistic Schrödinger Theory” (in the following referred to as *RST*) does follow an alternative approach: In contrast to QED, the RST approach is not of probabilistic but of fluid-dynamic character; many-particle systems that are conventionally described by product-states are within the RST formalism described by using a Whitney sum structure; and the gauge group of the system that fixes the interactions between the particles is substituted by an enlarged structure group. As a first quantized theory, the RST is on the same footing as quantum mechanics and so it is able to perform analytical calculations of e.g. atomic energy-levels; furthermore the RST approach is also able to deal with relativistic many-particle systems which poses severe problems to conventional quantum mechanics; one of the conventional approaches to solve a relativistic two-particle system is realized in the Bethe-Salpeter equation; but satisfying solutions to this equation have yet been found, irrespective of the existing interpretation problems [9].

Another advantage of the RST approach can be seen when comparing RST predictions for the energies of helium-like ions to other theoretical predictions as those made by Drake by means of the $1/Z$ -expansion [2] and by D. R. Plante, W. R. Johnson and J. Sapirstein with the “all order technique in many body perturbation theory” (“all order MBPT”) [14]: There the calculations of energy-levels, resp. ionization energies, are performed by using semi-classical quantum mechanics and afterwards QED corrections are added to these semi-classical results. RST on the

other hand offers the possibility to include self-interaction effects directly into the theory. In this thesis the self-interactions of the particles are included as the interaction of the particle with its own electromagnetic field. How corrections due to virtual processes may be included into the RST formalism is left to future work.

The already mentioned enlarged structure group is another difference between RST and conventional quantum mechanics. This structure group does incorporate the gauge group of the interactions only as a subgroup. The benefit of this enlarged structure group is the appearance of additional interactions in the RST system that take place between identical particles. These interactions do correspond to the exchange interactions, that are incorporated in conventional theories via the anti-symmetrization postulate which is, as the name tells us, just a postulate, while the exchange effects in RST do appear as real interactions between the particles.

Based on examinations of RST pure states and mixtures [16, 17, 20] this thesis demonstrates the physical relevance of the RST formalism with its completely different mathematical structure in comparison to the conventional approach (i.e. Whitney sum versus product structure, etc.). The special RST ansatz for the two-fermion system, that is used within this thesis, leads on the one hand to the well-known Hartree-Fock ansatz when a suitable non relativistic approximation is applied, which means that the special RST ansatz may be seen as a relativistic generalization of the Hartree-Fock ansatz; on the other hand it is shown, that numerical calculations based on this RST ansatz are in the region of large atomic numbers ($z_{ex} > 30$) closer to the experimental data ([10, 12]) than other theoretical predictions [2, 14]. In the region of small atomic numbers the RST results differ about 1.2 eV from the predictions of the other theoretical approaches because of the missing correlation energy in the RST system; in the region of larger atomic numbers, the relativistic effects, that are included in the RST calculations, do dominate, so that the influence of the missing correlation energy becomes negligible.

The thesis is structured as follows:

Chapter 1 gives a German introduction.

As the RST approach does fundamentally differ from the conventional quantum mechanical approach, chapter 2 introduces the basic concepts of RST in comparison to their conventional analoga; those include the representation of matter as well as matter dynamics, currents, gauge fields and their dynamics

In chapter 3 the basic RST equations are specified to a two-fermion system. By

means of this specialization, the emergence of the exchange interactions between identical particles is clarified as well as the mechanism of the RST self-interactions.

The energy-momentum densities for the two-fermion system are deduced in chapter 4.

In chapter 5 the relativistic energy-eigenvalue problem is presented for the special case of a stationary bound system of two fermions in an external Coulomb potential. It is also shown, that the non relativistic limit of the special RST ansatz leads to the well known Hartree-Fock approach, if the one particle states are used as approximate solutions.

Chapter 6 specializes the system further to rotationally symmetric states. The resulting equations are those necessary to describe a system of a helium-like ion in the ground state. They are the basis for the numerical calculations of the next chapter.

In chapter 7 numerical calculations of the ionization energies and ground state interaction energies for helium-like ions on the basis of the so far deduced equations are presented and compared to experimental data ([10, 12]) as well as other theoretical predictions ([2, 14]). It is shown, that RST is able in the region of large atomic numbers to reach closer to experimental data than the other theoretical approaches, provided the value of the self-interaction parameter u of the RST system is chosen suitably.

Chapter 8 does summarize the results and gives a short outlook:

Though the RST predictions for the helium-like ions are closer to experimental data than other theoretical approaches there is still some potential left. One improvement could be to find some other RST ansatz where the non relativistic limit is not equal to the Hartree-Fock approach in order to avoid problems with vanishing self-energy between electrons with anti-parallel spins. It should also be possible to include further self-energy corrections to the theory.

Then it remains to be seen whether more complex systems than a two-fermion system show the same agreement with experimental data, which would be another important step within the development of the Relativistic Schrödinger Theory.

Kapitel 1

Einleitung und Zusammenfassung

Wenn es darum geht, Prozesse im “Mikrokosmos” zu beschreiben, wird heutzutage davon ausgegangen, dass die Quantenfeldtheorie (QFT) die beste Theorie zur Beschreibung dieser Prozesse ist. Ihre großen Erfolge, wie z.B. bei der Berechnung des magnetischen Moments des Elektrons mit Hilfe der Quantenelektrodynamik (QED), untermauern diesen Anspruch. Allerdings gibt es einige Punkte, bei denen gerade die QED in Erklärungsnöte gerät, z.B. bei der Beschreibung gebundener Zustände. Zudem basieren die QED-Berechnungen auf einem störungstheoretischen Ansatz, sodass also keine analytischen Berechnungen möglich sind.

Mit der “Relativistischen Schrödinger-Theorie” (im folgenden als RST bezeichnet) wird nun ein alternativer Ansatz verfolgt. Bei der RST handelt es sich im Gegensatz zur QED nicht um einen probabilistischen, sondern einen fluiddynamischen Ansatz; die Mehrteilchenzustände werden hier nicht über einen Produktzustand realisiert, sondern über die Verwendung der Whitney-Summenstruktur. Die RST steht dabei auf demselben Level wie die konventionelle Quantenmechanik und ermöglicht so analytische Berechnungen von z.B. Energiezuständen. Sie ist darüber hinaus in der Lage, relativistische Mehrteilchenprobleme zu behandeln, was in der konventionellen Quantenmechanik nur bedingt möglich ist; einer der konventionellen Versuche, ein relativistisches Zweiteilchenproblem zu lösen, wird in der Bethe-Salpeter-Gleichung verwirklicht; allerdings ist eine zufriedenstellende Lösung dieser Gleichung aufgrund von Interpretationsproblemen bis heute nicht möglich [9].

Vorteile zeigt die RST auch im Vergleich zu anderen konventionellen Ansätzen zur Beschreibung von Zweiteilchen-Problemen, wie sie z.B. von Drake mit der $1/Z$ -Entwicklung [2] und von D. R. Plante, W. R. Johnson und J. Sapirstein mit

der “all order technique in many body perturbation Theory” (“all order MBPT”) [14] verfolgt werden: Hier wird zur Berechnung von Energieniveaus bzw. Ionisierungsenergien semiklassische Quantenmechanik betrieben und anschließend werden QED-Korrekturen zum Ergebnis hinzu addiert; damit werden hier Ergebnisse aus zwei unterschiedlichen Theorien verwendet. Die RST bietet hingegen die Möglichkeit, aufgrund ihres intrinsischen Potentials Selbstwechselwirkungen mit zu berücksichtigen. Im Rahmen dieser Dissertation wird die Selbstwechselwirkung der Teilchen als die Wechselwirkung mit dem eigenen elektromagnetischen Feld behandelt. Wie Korrekturen, die virtuelle Prozesse beinhalten, in die RST korrekt eingebunden werden können, muß noch eingehender untersucht werden.

Ein weiterer großer Unterschied zur konventionellen Quantenmechanik liegt auch darin, dass die in der RST verwendete Strukturgruppe, welche die Wechselwirkungen festlegt, die eigentliche Eichgruppe nur als Untergruppe enthält. Die erweiterte Strukturgruppe führt zum Auftreten von zusätzlichen Wechselwirkungen zwischen identischen Teilchen in der RST. Diese Wechselwirkungen entsprechen den Austauschwechselwirkungen, die in der konventionellen Theorie über das Antisymmetrisierungspostulat integriert werden, bei dem es sich aber eben, wie der Name bereits sagt, um ein Postulat handelt, während die Austauschwechselwirkungen in der RST als eigenständige Wechselwirkungen mit eigenem Feld auftreten.

Aufbauend auf Untersuchungen zu RST-Gemischen [16, 17, 20] wird im Rahmen dieser Dissertation nun anhand eines Zwei-Fermionen-Systems die physikalische Relevanz der RST aufgezeigt, die ja auf einer völlig anderen mathematischen Struktur basiert als die konventionellen Ansätze (d.h. Whitney-Summe statt Produktansatz, erweiterte Strukturgruppe, etc.). Für den in dieser Dissertation untersuchten speziellen RST-Ansatz für das Zwei-Fermionen-System zeigt es sich zum einen, dass sich durch geeignete nichtrelativistische Näherungen der RST-Gleichungen der bekannte Hartree-Fock-Ansatz ergibt, man die RST für diesen Ansatz also als eine relativistische Verallgemeinerung des Hartree-Fock-Ansatzes ansehen kann; zum anderen gelingt es, mit Hilfe numerischer Berechnungen auf Basis der RST-Gleichungen im Bereich größerer Kernladungszahlen ($z_{ex} > 30$), näher an die experimentellen Daten ([10, 12]) heranzukommen als andere theoretische Ansätze, vergl. [2, 14]. Im Bereich kleiner Kernladungszahlen sind die RST-Ergebnisse aufgrund der bei dem hier verwendeten Ansatz fehlenden Korrelationsenergie um ca. 1,2 eV schlechter als die anderen theoretischen Ansätze; im Bereich großer Kernladungszahlen überwiegen dann allerdings die relativistischen Effekte, die in der RST ja berücksichtigt werden, sodass der Einfluss der fehlenden Korrelationsenergie vernachlässigbar wird.

Da sich die RST grundlegend von der konventionellen Quantenmechanik unterscheidet, dient Kapitel 2 zunächst dazu, die RST-Grundlagen einzuführen, wie Darstellung von Materie und Materiedynamik, Ströme, Eichfelder und ihre Dynamik, sowie Erhaltungsgrößen.

In Kapitel 3 werden die allgemeinen Grundlagen aus Kapitel 2 auf den Fall eines Zwei-Fermionen-Systems spezialisiert. Durch die explizite Darstellung der verschiedenen Feldgleichungen werden die Unterschiede zur konventionellen Quantenmechanik deutlich gemacht. Dabei wird die Austauschwechselwirkung zwischen identischen Teilchen, die in der RST als eigenes Feld auftritt für das es kein Analogon in der konventionellen Quantenmechanik gibt, näher erläutert sowie das Auftreten von Selbstwechselwirkungen.

Anschliessend werden in Kapitel 4 die Energie-Impulsdichten für das Zwei-Fermionen-System aufgestellt und mit einer Herleitung aus der Lagrange-Dichte unter Verwendung des Noether-Theorems verglichen.

In Kapitel 5 wird das relativistische Energieeigenwertproblem aufgestellt für den Spezialfall gebundener stationärer Zwei-Fermionen-Systeme in einem Coulomb-Potential. Außerdem wird gezeigt, dass der nichtrelativistische Grenzfall der RST gleich dem Hartree-Fock-Ansatz ist, wenn man als Näherungslösungen die Einteilchenzustände verwendet.

In Kapitel 6 wird nun weiter spezialisiert und zwar auf rotationssymmetrische Zustände. In diesem Kapitel werden nun alle relevanten Gleichungen für ein gebundenes heliumähnliches System im Grundzustand aufgestellt, die zur numerischen Berechnung von Energieniveaus benötigt werden.

In Kapitel 7 schließlich werden die numerischen Berechnungen von Ionisierungsenergien und Grundzustandswechselwirkungsenergien in der RST auf der Basis der Gleichungen aus Kapitel 5 aufgelistet und mit experimentellen Werten [10, 12], aber auch anderen theoretischen Ansätzen [2, 14], verglichen. Hierbei wird gezeigt, dass es mit der RST gelingt, im Bereich großer Kernladungszahlen dichter an die experimentellen Daten heranzureichen, als es mit den anderen theoretischen Ansätzen möglich ist.

Kapitel 8 bietet eine kurze Zusammenstellung der Ergebnisse und einen Ausblick auf zukünftig zu untersuchende Aspekte der RST.

Kapitel 2

Grundlagen der RST

2.1 Einführung und Motivation

In den letzten Jahren ist es gelungen, auf der Basis der RST-Gleichungen konkrete numerische Ergebnisse zu produzieren, die sich mit experimentellen Daten vergleichen lassen und somit einen Prüfstein für die Theorie darstellen. Die Tatsache, dass die von der RST vorhergesagten Frequenzen für Spektrallinien für schwere heliumähnliche Ionen näher am Experiment liegen als die entsprechenden Hartree-Fock-Vorhersagen, ist dabei ein klares Indiz für die physikalische Relevanz dieser Theorie.

Dieses Kapitel soll dazu dienen, die RST-Grundlagen einzuführen, bevor dann im folgenden Kapitel die explizite Darstellung der RST-Größen für ein Zwei-Fermionen-System erfolgt und mit Hilfe dieser expliziten Darstellung eine konkrete Analyse der Grundlagen und ihrer Konsequenzen.

Die RST steht als erstquantisierte Mehrteilchentheorie zwischen der konventionellen Quantenmechanik und der Quantenfeldtheorie. Um die bereits erwähnten Defizite der konventionellen Quantentheorie (z.B. bei der Bethe-Salpeter-Gleichung) zu vermeiden, beruht die RST auf anderen mathematischen Konstrukten und Ansätzen. Einen kurzen Überblick über die Unterschiede zwischen RST und konventioneller Quantenmechanik gibt Tabelle 2.1.

Wie in den meisten modernen Eichtheorien bestehen auch in der RST die dynamischen Grundgleichungen aus einem Materieanteil und einem Eichanteil, wobei die logische Konsistenz der beiden Systeme natürlich gewährleistet sein muss. Dabei beruht der mathematische Ansatz der RST auf der Theorie der Faserbündel und

konventionell	RST
probabilistisch	fluiddynamisch
Zustandsvektor	
Ψ	Ψ
Tensorprodukt der Einteilchenwellenfunktionen	Whitney-Summe der Einteilchenwellenfunktionen an <i>demselben</i> Raumzeitpunkt
nicht lokal	lokal
beinhaltet N individuelle Teilchenzeiten	eine Zeit t
Schrödinger-Gleichung	Relativistische Schrödinger-Gleichung
Gemische	
Dichtematrix ρ	Intensitätsmatrix \mathcal{I}
von-Neumann-Gleichung	Relativistische von-Neumann-Gleichung
Hamiltonian	
hermitischer Operator	1-Form
folgt durch Quantisierungsregeln aus klassischem Hamiltonian	dynamisches Objekt mit eigenen dynamischen Gleichungen
Eichgruppe der Wechselwirkung zwischen N Fermionen	
Minimalkopplung	Minimalkopplung
abelsch	nichtabelsch
$U(1)$	$U(N)$

Tabelle 2.1: **Zusammenfassung der formalen Unterschiede zwischen der konventionellen Quantenmechanik und der RST**

damit einer geometrischen Deutung der relevanten physikalischen Größen wie Eichgruppen, Feldstärken, Wellenfunktionen, etc.. Im folgenden sollen nun die in der RST auftretenden physikalischen Größen, sowie deren Dynamik, genauer beschrieben werden:

2.2 Materie-Dynamik

2.2.1 Die Wellenfunktion Ψ

Im Gegensatz zur konventionellen Quantenmechanik mit ihrem probabilistischen Charakter handelt es sich bei der RST um eine fluiddynamische Theorie. Die Wellenfunktion Ψ für N -Teilchensysteme wird hier nicht als *Tensorprodukt*, sondern als *direkte Summe* (Whitney-Summe) der Einteilchenzustände am *selben* Raumzeitpunkt gebildet

$$\Psi(x_\mu) = \psi_1(x_\mu) \oplus \psi_2(x_\mu) \oplus \cdots \oplus \psi_N(x_\mu) \Rightarrow \begin{pmatrix} \psi_1(x_\mu) \\ \psi_2(x_\mu) \\ \cdots \\ \psi_N(x_\mu) \end{pmatrix}. \quad (2.1)$$

Verschiedene Einteilchenzeiten, wie sie in der konventionellen Theorie auftreten und dort zu Problemen bei der Interpretation der Wahrscheinlichkeitsamplitude schon bei Teilchenzahlen von $N = 2$ führen (vergl. Bethe-Salpeter-Gleichung [6]), treten in der RST damit nicht auf.

Geometrisch betrachtet handelt es sich bei der Wellenfunktion Ψ der RST um einen Schnitt durch ein entsprechendes Vektorbündel über der Raumzeit. Die Gesamtwellenfunktion $\Psi(x_\mu)$ wird aus der direkten Summe von Einteilchenschnitten gebildet. Dabei ist es in der RST immer möglich, diese Wellenfunktion als Produkt aus einem konstanten komplexen Vektor Ψ_* und einem raumzeitabhängigen Gruppenelement g darzustellen mit $g(x_\mu) \in \mathcal{GL}(N, \mathbb{C})$

$$\Psi(x_\mu) = g(x_\mu) \cdot \Psi_*(x_\mu) \quad (2.2)$$

(vergl. Anhang A).

Die zeitliche Entwicklung des Zustandsvektors für den Fall reiner Zustände wird in der RST in Analogie zur Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi \quad (2.3)$$

durch die **R**elativistische **S**chrödinger-**G**leichung (RSG)

$$i\hbar c \mathcal{D}_\mu \Psi = \mathcal{H}_\mu \Psi \quad (2.4)$$

beschrieben, bei der es sich um eine relativistische Verallgemeinerung der Schrödinger-Gleichung handelt, mit der eichkovarianten Ableitung ($\mathcal{D}_\mu \Psi \doteq \partial_\mu \Psi + \mathcal{A}_\mu \Psi$). Damit ist die RSG lorentz- und eichkovariant.

2.2.2 Die Intensitätsmatrix \mathcal{I}

In der RST wird die fluiddynamische Materieverteilung durch eine hermitesche Intensitätsmatrix $\mathcal{I}(= \overline{\mathcal{I}}(x))$ - analog zur konventionellen statistischen Dichtematrix ρ - beschrieben. Sie stellt den Schnitt eines entsprechenden Faserbündels über der Raumzeit dar. Die Dynamik der Intensitätsmatrix \mathcal{I} wird durch die **R**elativistische **v**on-**N**eumann-**G**leichung (RNG) wie folgt beschrieben:

$$\mathcal{D}_\mu \mathcal{I} = \frac{i}{\hbar c} [\mathcal{I} \cdot \overline{\mathcal{H}}_\mu - \mathcal{H}_\mu \cdot \mathcal{I}] . \quad (2.5)$$

Die RNG ist dabei die relativistische Verallgemeinerung der konventionellen von-Neumann-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho] . \quad (2.6)$$

Im allgemeinen beschreibt die Intensitätsmatrix \mathcal{I} ein Gemisch von Zuständen. Für den Spezialfall reiner Zustände lässt sie sich als Tensorprodukt der Wellenfunktion darstellen

$$\mathcal{I} \rightarrow \Psi \otimes \overline{\Psi} . \quad (2.7)$$

Wählt man die Nichtdiagonalelemente der Intensitätsmatrix ungleich Null, so erhält man Verknüpfungen der Wellenfunktionen untereinander und damit Interferenzterme.

Die Intensitätsmatrix \mathcal{I} lässt sich konstruieren aus einem Gruppenelement g mit $g \in \mathcal{GL}(N, \mathbb{C})$ und einer konstanten hermiteschen $(N \times N)$ -Matrix g_* als

$$\mathcal{I} = g \cdot g_* \cdot \overline{g} \quad (2.8)$$

(vergleiche hierzu Anhang A).

2.2.3 Der Hamiltonoperator \mathcal{H}_μ

Der Hamiltonoperator \mathcal{H}_μ beschreibt die Dynamik der Materieverteilung. In der konventionellen Quantenmechanik geht der Hamiltonoperator durch Quantisierungsregeln aus dem klassischen Hamiltonian hervor. Der Hamiltonoperator ist dort ein hermitescher Operator.

In der RST ist er selbst ein dynamisches Objekt, das Werte in der Lie-Algebra $\mathfrak{gl}(N, \mathbb{C})$ annimmt. Er kann als eine $N \times N$ Matrix aus Einsformen angesehen werden und ist im Gegensatz zur konventionellen Quantenmechanik nicht hermitisch. Der

Hamiltonian ist in der RST nicht vorgegeben, sondern wird durch seine eigenen Feldgleichungen bestimmt und zwar zum einen durch die *Integrabilitätsbedingung* und zum anderen durch die *Erhaltungsgleichung*.

Die Integrabilitätsbedingung

$$\mathcal{D}_\nu \mathcal{H}_\mu - \mathcal{D}_\mu \mathcal{H}_\nu + \frac{i}{\hbar c} [\mathcal{H}_\mu, \mathcal{H}_\nu] = i\hbar c \mathcal{F}_{\mu\nu} \quad (2.9)$$

sorgt dafür, dass gewisse Bündelidentitäten für die Wellenfunktion Ψ bzw. die Intensitätsmatrix \mathcal{I}

$$[\mathcal{D}_\mu \mathcal{D}_\nu - \mathcal{D}_\nu \mathcal{D}_\mu] \Psi = \mathcal{F}_{\mu\nu} \Psi \quad (2.10a)$$

$$[\mathcal{D}_\mu \mathcal{D}_\nu - \mathcal{D}_\nu \mathcal{D}_\mu] \mathcal{I} = [\mathcal{F}_{\mu\nu}, \mathcal{I}] \quad (2.10b)$$

automatisch erfüllt sind. Damit ist sichergestellt, dass die relativistische Schrödinger-Gleichung (2.4) und die relativistische von-Neumann-Gleichung (2.5) zumindest lokale Lösungen besitzen.

$\mathcal{F}_{\mu\nu}$ ist hierbei der Feldstärkeoperator des Eichfeldes \mathcal{A}_μ , das die Wechselwirkung trägt und ist wie gewöhnlich in der Yang-Mills-Theorie definiert (siehe nächster Abschnitt).

Die zweite Feldgleichung des Hamiltonian ist die *Erhaltungsgleichung*

$$\mathcal{D}^\mu \mathcal{H}_\mu - \frac{i}{\hbar c} \mathcal{H}^\mu \cdot \mathcal{H}_\mu = -i\hbar c \left[\left(\frac{Mc}{\hbar} \right)^2 \right] \quad (2.11a)$$

$$\mathcal{D}^\mu \mathcal{H}_\mu - \frac{i}{\hbar c} \mathcal{H}^\mu \cdot \mathcal{H}_\mu = -i\hbar c \left[\left(\frac{Mc}{\hbar} \right)^2 - \Sigma^{\mu\nu} \mathcal{F}_{\mu\nu} \right] \quad (2.11b)$$

für Teilchen ohne Spin (2.11a) bzw. für Teilchen mit Spin (2.11b) unter Verwendung eines Spinpolarisationsterms $\Sigma^{\mu\nu}$ ¹.

Die Erhaltungsgleichung führt zum einen dazu, dass die Lösungen Ψ der RSG auch den konventionellen Wellengleichungen von Dirac bzw. Klein-Gordon gehorchen und zum anderen dazu, dass sich sowohl eine Kontinuitätsgleichung der Form

¹Für ein fermionisches System mit Teilchenzahl N folgen die Spingeneratoren $\Sigma_{\mu\nu}$ einer $4N$ -dimensionalen Darstellung $\{\Gamma_\mu\}$ der Clifford-Algebra $\mathbb{C}(1, 3)$

$$\Gamma_\mu \cdot \Gamma_\nu + \Gamma_\nu \cdot \Gamma_\mu = 2g_{\mu\nu} \cdot \mathbf{1},$$

vergl. (3.17), damit gilt für die Spingeneratoren $\Sigma_{\mu\nu}$

$$\Sigma_{\mu\nu} \doteq \frac{1}{4} [\Gamma_\mu, \Gamma_\nu]. \quad (2.12)$$

$\mathcal{D}^\mu \mathcal{J}_\mu = 0$, als auch eine Erhaltungsgleichung für den Gesamtstrom J_μ mit $\nabla^\mu J_\mu = 0$ aus der Materiedynamik der RST herleiten lassen; genauer gezeigt wird dies in Abschnitt 3.3.1 am Beispiel eines Zwei-Fermionen-Systems.

Ein Ansatz für den Hamiltonian \mathcal{H}_μ , der die Integrabilitätsbedingung (2.9) erfüllt, ist

$$\mathcal{H}_\mu = i\hbar c (\mathcal{D}_\mu g) g^{-1} = i\hbar c ((\partial_\mu g) g^{-1} + \mathcal{A}_\mu) , \quad (2.13)$$

damit können der Hamiltonian \mathcal{H}_μ und die Materiefelder Ψ (2.2) bzw. \mathcal{I} (2.8) aus demselben Gruppenelement g mit $g \in \mathcal{GL}(N, \mathbb{C})$ konstruiert werden. Vergleiche hierzu Anhang A.

2.3 Die Eichfelder und ihre Dynamik

2.3.1 Konnexion \mathcal{A}_μ und Bündelkrümmung $\mathcal{F}_{\mu\nu}$

Über die Wahl der Eichgruppe lässt sich die Art der Wechselwirkung zwischen den Teilchen festlegen. Das Eichpotential \mathcal{A}_μ , das die Wechselwirkungen zwischen den Teilchen durch das Prinzip der Minimalkopplung bestimmt, ist dabei ein Element der Lie-Algebra der Strukturgruppe. Damit erhält man als kovariante Ableitung $\mathcal{D}_\mu = \partial_\mu + \mathcal{A}_\mu$ der Wellenfunktion Ψ , bzw. der Intensitätsmatrix \mathcal{I} :

$$\mathcal{D}_\mu \Psi = \partial_\mu \Psi + \mathcal{A}_\mu \Psi \quad (2.14a)$$

$$\mathcal{D}_\mu \mathcal{I} = \partial_\mu \mathcal{I} + [\mathcal{A}_\mu, \mathcal{I}] . \quad (2.14b)$$

Mit Hilfe eines geeigneten Satzes an Generatoren τ_α ($\alpha = 1, \dots, N^2$) der Strukturgruppe lässt sich die Bündelkonnexion (Eichpotential) \mathcal{A}_μ in ihre Komponenten A^α_μ aufspalten

$$\mathcal{A}_\mu = -i^{(ex)} A_\mu \cdot \mathbf{1} + A^\alpha_\mu \tau_\alpha . \quad (2.15)$$

Der erste Term auf der rechten Seite tritt bei der Existenz einer externen Quelle (z.B. Kern) auf, er ist proportional zur Einheitsmatrix und wirkt damit in gleicher Weise auf die verschiedenen Teilchen des Systems.

Die Bündelkrümmung (Feldstärke) $\mathcal{F}_{\mu\nu}$ wird wie gewöhnlich aus der Konnexion \mathcal{A}_μ generiert

$$\mathcal{F}_{\mu\nu} = \nabla_\mu \mathcal{A}_\nu - \nabla_\nu \mathcal{A}_\mu + [\mathcal{A}_\mu, \mathcal{A}_\nu] . \quad (2.16)$$

Analog zur Konnexion \mathcal{A}_μ lässt sich auch die Bündelkrümmung $\mathcal{F}_{\mu\nu}$ nach den Generatoren τ_α der Strukturgruppe aufspalten

$$\mathcal{F}_{\mu\nu} = -i {}^{(ex)}\mathcal{F}_{\mu\nu} \cdot \mathbf{1} + F^\alpha{}_{\mu\nu} \tau_\alpha . \quad (2.17)$$

Ausgedrückt in Komponenten von $A^\alpha{}_\mu$ und Strukturkonstanten $C^\alpha{}_{\beta\gamma}$, die wie folgt definiert sind:

$$[\tau_\beta, \tau_\gamma] = C^\alpha{}_{\beta\gamma} \tau_\alpha \quad (2.18)$$

erhält man damit folgende Form für die Komponenten der Bündelkrümmung $\mathcal{F}_{\mu\nu}$

$${}^{(ex)}F_{\mu\nu} = \nabla_\mu {}^{(ex)}A_\nu - \nabla_\nu {}^{(ex)}A_\mu \quad (2.19a)$$

$$F^\alpha{}_{\mu\nu} = \nabla_\mu A^\alpha{}_\nu - \nabla_\nu A^\alpha{}_\mu + C^\alpha{}_{\beta\gamma} A^\beta{}_\mu A^\gamma{}_\nu . \quad (2.19b)$$

2.3.2 Eichfelddynamik und Erhaltungssätze

Um das dynamische System der RST abzuschließen, benötigt man nun noch Feldgleichungen für die Eichfelder. Hier werden, wie in den meisten modernen Eichtheorien, die (nichtabelschen) Yang-Mills-Gleichungen verwendet

$$\mathcal{D}^\mu \mathcal{F}_{\mu\nu} = -i4\pi\alpha_s \mathcal{J}_\nu \quad (2.20)$$

mit der elektromagnetischen Kopplungskonstanten $\alpha_s (= e^2/\hbar c)$ und dem Stromoperator \mathcal{J}_μ , der in Komponentenschreibweise zerlegt nach den Generatoren der Strukturgruppe wie folgt lautet

$$\mathcal{J}_\mu = {}^{(ex)}j_\mu \cdot \mathbf{1} + i j^\alpha{}_\mu \tau_\alpha . \quad (2.21)$$

Setzt man nun die Zerlegungen für die Bündelkrümmung $\mathcal{F}_{\mu\nu}$ (2.17) und den Stromoperator \mathcal{J}_μ (2.21) in die Yang-Mills-Gleichung (2.20) ein, so ergibt sich durch Vergleich der Koeffizienten vor den Generatoren, dass der äußere Strom ${}^{(ex)}j_\mu$ die äußere Feldstärke ${}^{(ex)}F_{\mu\nu}$ (2.19a) entsprechend den äußeren Maxwell-Gleichungen generiert:

$$\nabla^\mu {}^{(ex)}F_{\mu\nu} = 4\pi\alpha_s {}^{(ex)}j_\nu , \quad (2.22)$$

und dass die Maxwell-Ströme $j^\alpha{}_\mu$ als die Quellen der inneren Feldstärken $F^\alpha{}_{\mu\nu}$ wirken:

$$D^\mu F^\alpha{}_{\mu\nu} = 4\pi\alpha_s j^\alpha{}_\nu , \quad (2.23)$$

wobei die kovariante Ableitung D_μ folgendermaßen für Lie-Algebra-wertige Objekte definiert ist:

$$D_\mu j_{\alpha\nu} \doteq \nabla_\mu j_{\alpha\nu} - \omega^\beta{}_{\alpha\mu} j_{\beta\nu} \quad (2.24a)$$

$$D_\mu j^\alpha{}_\nu \doteq \nabla_\mu j^\alpha{}_\nu + \omega^\beta{}_{\alpha\mu} j^\beta{}_\nu \quad (2.24b)$$

$$(\omega^\alpha{}_{\beta\mu} \doteq C^\alpha{}_{\gamma\beta} A^\gamma{}_\mu) .$$

Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass die hier eingeführten Maxwell-Ströme nicht mit den Maxwell-Strömen der konventionellen Theorien übereinstimmen aufgrund der in der RST abweichend definierten Bündelkrümmung. Die genaue Form der Maxwell-Ströme in der RST sowie ihre Beziehung zu den im folgenden definierten RST-Strömen über den Kompatibilitätstensor \mathcal{K} (vergl. Abschnitt 2.4.3) wird in Kapitel 3 am konkreten Fall eines Zwei-Fermionen-Systems deutlich werden.

2.4 Ströme und Erhaltungssätze

2.4.1 RST-Ströme

Neben den Maxwell-Strömen $j^\alpha{}_\mu$ (2.23) als den Quellen der inneren Feldstärken $F^\alpha{}_{\mu\nu}$ gibt es in der RST noch die sogenannten *RST-Ströme*. Da natürlich auch in der RST Erhaltungssätze wie z.B. die Ladungserhaltung gelten müssen, erhält man Bedingungen für die Definition dieser RST-Ströme.

Zunächst soll der Geschwindigkeitsoperator Γ^μ als eine pseudo-hermitische Einsform eingeführt werden, die Werte in der Lie-Algebra $\mathfrak{gl}(N, \mathbb{C})$ annimmt. Der RST-Gesamtstrom j_μ ist unter Verwendung des Geschwindigkeitsoperators Γ_μ wie folgt definiert:

$$j_\mu \doteq \text{tr}(\mathcal{I} \cdot \Gamma_\mu) \quad (2.25a)$$

$$j_\mu \doteq \bar{\Psi} \Gamma_\mu \Psi , \quad (2.25b)$$

für Gemische bzw. reine Zustände. Entsprechend der Art des betrachteten Teilchens (Bosonen oder Fermionen) werden die Geschwindigkeitsoperatoren nun mit Hilfe der Erhaltungsgleichung (2.11) so bestimmt, dass sich automatisch eine Ladungserhaltung der Form

$$\partial^\mu j_\mu = 0 \quad (2.26)$$

ergibt; für Fermionen wird dies erreicht, indem man den Geschwindigkeitsoperator Γ_μ als Whitney-Summe von Gammamatrizen γ_μ wählt (siehe nächstes Kapitel).

Folgender Ansatz soll für die Geschwindigkeitsoperatoren $v_{\alpha\mu}$ verwendet werden:

$$v_{\alpha\mu} \doteq \frac{i}{2} \{ \tau_\alpha, \Gamma_\mu \}, \quad (2.27)$$

bei den τ_α handelt es sich um die Generatoren der Strukturgruppe. Damit nehmen die Geschwindigkeitsoperatoren $v_{\alpha\mu}$ Werte in $\mathcal{U}(N) \times \mathbb{C}_8(1, 3)$ an. Mit Hilfe der $v_{\alpha\mu}$ lassen sich die RST-Ströme $j_{\alpha\mu}$ nun definieren als

$$j_{\alpha\mu} \doteq \text{tr}(\mathcal{I} \cdot v_{\alpha\mu}) \quad (2.28a)$$

$$j_{\alpha\mu} \doteq \overline{\Psi} v_{\alpha\mu} \Psi \quad (2.28b)$$

für Gemische bzw. reine Zustände. Dabei befindet sich der Index α bei den RST-Strömen in kovarianter Stellung ($j_{\alpha\mu}$), bei den Maxwell-Strömen hingegen in kontravarianter Stellung ($j^\alpha{}_\mu$) (zur Beziehung zwischen den beiden Arten von Strömen siehe Abschnitt 2.4.3). Unter Verwendung der Erhaltungsgleichung (2.11) und der RSG (2.4) bzw. RNG (2.5), ergeben sich damit die folgenden Quellgleichungen für die RST-Ströme (vergl. Abschnitt 3.3.1 für den Fall eines Zwei-Fermionen-Systems):

$$D^\mu j_{\alpha\mu} = 0. \quad (2.29)$$

2.4.2 Maxwell-Ströme

Die Maxwell-Ströme wurden ja bereits als die Quellen der äußeren Feldstärke ${}^{(ex)}F_{\mu\nu}$ bzw. der inneren Feldstärken $F^\alpha{}_{\mu\nu}$ über die entsprechenden äußeren (2.22) bzw. inneren Maxwell-Gleichungen (2.23) eingeführt. Bekanntermaßen verbinden die Maxwell-Gleichungen die Feldstärken so mit den Strömen, dass die Ströme bestimmte Kontinuitätsgleichungen automatisch erfüllen. In der Tat führt die folgende Bündelidentität

$$\mathcal{D}^\mu \mathcal{D}^\nu \mathcal{F}_{\mu\nu} \equiv 0 \quad (2.30)$$

wegen $\mathcal{D}^\mu \mathcal{F}_{\mu\nu} = -4\pi\alpha_s i \mathcal{J}_\nu$ (2.20) automatisch zur gewünschten Kontinuitätsgleichung in Operatorform

$$\mathcal{D}^\mu \mathcal{J}_\mu \equiv 0, \quad (2.31)$$

d.h. für die Komponenten von \mathcal{J}_μ gilt

$$\nabla^\mu {}^{(ex)}j_\mu = 0 \quad (2.32a)$$

$$D^\mu j^\alpha{}_\mu = 0. \quad (2.32b)$$

2.4.3 Der Kompatibilitätstensor

Wie gesehen, gibt es in der RST zwei verschiedene Arten von Strömen: Die RST-Ströme $j_{\alpha\mu}$ (2.15), die aus den Komponenten ψ_a der N -Teilchen-Wellenfunktion Ψ bestehen, und die Maxwell-Ströme $j^\alpha{}_\mu$ (2.21). Sollen die Maxwell-Gleichungen die Dynamik beider Arten von Strömen beschreiben, so muss es einen Zusammenhang zwischen den Strömen geben: Durch die Einführung eines Kompatibilitätstensors $\mathcal{K} = \{K_{\alpha\beta}\}$ (siehe dazu [23]) lassen sich die RST-Ströme $j_{\alpha\mu}$ und die Maxwell-Ströme $j^\alpha{}_\mu$ als ko- und kontravariante Komponenten desselben Objekts identifizieren. Der Kompatibilitätstensor kann als Fasermetrik angesehen werden und erlaubt so folgende Verknüpfung zwischen RST- und Maxwell-Strömen:

$$j_{\alpha\mu} = K_{\alpha\beta} j^\beta{}_\mu \quad (2.33a)$$

$$j^\alpha{}_\mu = K^{\alpha\beta} j_{\beta\mu} \quad (2.33b)$$

$$(K^{\alpha\beta} K_{\beta\gamma} = \delta^\alpha{}_\gamma) .$$

Natürlich muss der Kompatibilitätstensor \mathcal{K} gewisse Bedingungen erfüllen. Zunächst müssen beide Ströme $j_{\alpha\mu}$ (2.28) und $j^\alpha{}_\mu$ (2.21) ihren eigenen *Kontinuitätsgleichungen* (2.29) und (2.32b) gehorchen. Dies wird erreicht, indem der Kompatibilitätstensor \mathcal{K} kovariant konstant gewählt wird

$$D_\mu K_{\alpha\beta} \equiv 0 . \quad (2.34)$$

Außerdem wird gefordert, dass die Beziehung (2.33a) bzw. (2.33b) unabhängig von der Eichung ist. Dies wird erreicht, wenn \mathcal{K} eine Invariante der adjungierten Darstellung der Eichgruppe $U(N)$ ist, d.h. der Kompatibilitätstensor antikommutiert mit jeder dieser Darstellungen:

$$\mathcal{C}_\alpha^T \cdot \mathcal{K} + \mathcal{K} \cdot \mathcal{C}_\alpha = 0 \quad (\alpha = 1 \dots N^2) \quad (2.35a)$$

$$C^\gamma{}_{\delta\alpha} K_{\gamma\beta} + C^\gamma{}_{\delta\beta} K_{\alpha\gamma} = 0 . \quad (2.35b)$$

Die beiden Bedingungen werden erfüllt, indem man für den Kompatibilitätstensor die folgende Form wählt ²:

$$K_{\alpha\beta} = c_1 (\text{tr } \tau_\alpha) \cdot (\text{tr } \tau_\beta) + c_2 \cdot \text{tr} (\tau_\alpha \cdot \tau_\beta) \quad (2.36)$$

wobei die Konstanten c_1 und c_2 bestimmt werden müssen (für den Zwei-Fermionen-Fall, siehe nächstes Kapitel, Abschnitt 3.2) und man eine totale Antisymmetrie der

²als Erweiterung der bekannten Metrikform $g_{\alpha\beta} = \text{tr} \{\tau_\alpha \tau_\beta\}$, wie sie z.B in [26] eingeführt wird.

Strukturkonstanten fordert $C_{\gamma\delta\beta} = -C_{\beta\delta\gamma}$. Den Kompatibilitätstensor kann man als invariante Fasermetrik des assoziierten Lie-Algebra-Bündels verstehen.

Nachdem nun die relevanten Größen der RST eingeführt wurden, soll im nächsten Kapitel der hier sehr allgemein formulierte Ansatz der RST auf den Fall eines Zwei-Fermionen-Systems spezialisiert werden. Mit Hilfe expliziter Darstellungen der RST-Größen lassen sich die Bedeutung der in diesem Kapitel eingeführten RST-Grundlagen und ihre Konsequenzen konkret zeigen.

Kapitel 3

RST-Felder und ihre Dynamik in einem Zwei-Fermionen-System mit externem Potential

Das folgende Kapitel soll dazu dienen, die im vorherigen Kapitel beschriebenen Grundlagen der RST an einem einfachen System zu verdeutlichen. Hierzu wurde das einfachste System gewählt, das die relevanten Effekte wie z.B. den relativistischen Austauscheffekt beinhaltet, nämlich ein System mit zwei Fermionen in einem externen Potential. Im folgenden werden nun die RST-Größen für dieses Zwei-Fermionen-System explizit dargestellt: Materiefelder, Eichfelder, Ströme und mit ihrer Dynamik (für Überlegungen zum bosonischen Analogon, siehe [25]). Da sich die Betrachtungen im folgenden auf eine flache Raumzeit beziehen, kann die koordinatenkovariante Ableitung ∇_μ durch die partielle Ableitung ∂_μ ersetzt werden.

3.1 Die Zwei-Fermionen-Wellenfunktion Ψ

In der RST ist die Wellenfunktion Ψ eines Zwei-Fermionen-Systems ein Schnitt in einem Vektorbündel über der Raumzeit mit der Faser \mathbb{C}^8 . Dieses Faserbündel ist gleich der Whitney-Summe der beiden Ein-Fermionen-Bündel mit den Fasern \mathbb{C}^4 . Ψ ist damit ein achtkomponentiges Vektorfeld über der Raumzeit und gleich der Whitney-Summe der beiden Schnitte ψ_a ($a = 1, 2$) in den Ein-Fermionen-Bündeln. Mit den beiden Einteilchen-Wellenfunktionen ψ_a ($a = 1, 2$), die aus je einem vierkomponentigen Dirac-Spinor aufgebaut sind, erhält man folgende Wellenfunktion

$\Psi(x)$ für das Zweiteilchensystem:

$$\Psi(x) = \psi_1(x) \oplus \psi_2(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

Die Wechselwirkungen zwischen den Teilchen werden wie gewohnt über die Minimalkopplung in Form der eichkovarianten Ableitung der Wellenfunktion eingeführt

$$\mathcal{D}_\mu \Psi = \partial_\mu \Psi + \mathcal{A}_\mu \Psi, \quad (3.2)$$

mit dem Eichpotential \mathcal{A}_μ .

3.2 Elektromagnetische Felder und Austauschfelder in einem Zwei-Fermionen-System

Das Eichpotential \mathcal{A}_μ für ein Zwei-Fermionen-System ist gleich der Bündelkonnexion des Vektorbündels über der Raumzeit mit der Faser \mathbb{C}^8 . Gewöhnlich wird für ein Zwei-Fermionen-System als Eichgruppe $U(1)$ als die Eichgruppe des Elektromagnetismus angenommen; in der RST werden aber die Austauschwechselwirkungen zwischen identischen Teilchen auf dieselbe Weise behandelt wie die elektromagnetischen Wechselwirkungen. Beide Wechselwirkungen lassen sich in der Strukturgruppe $U(2)$ vereinigen. Dadurch stehen die beiden Wechselwirkungen gleichwertig nebeneinander. Im Gegensatz zu $U(1) \times U(1)$ ist $U(2)$ allerdings eine nichtabelsche Gruppe. Da die RST jedoch - wie allgemein angenommen - ebenfalls vom abelschen Charakter der elektromagnetischen Wechselwirkung ausgeht, muss die Symmetrie der $U(2)$ -Eichgruppe in eine abelsche Untergruppe gebrochen werden, die die elektromagnetischen Potentiale und Austauschpotentiale nicht mischt (siehe Anhang B). Betrachtet man zusätzlich noch ein externes Potential, so ergibt sich als Eichgruppe $U(2) \times U^{ext}$.

Will man das interne Eichpotential ${}^{(s)}\mathcal{A}_\mu$ nun nach den Generatoren der Strukturgruppe $U(2)$ aufspalten, so erhält man $2 \times 2 = 4$ Generatoren τ_α ($\alpha = 1, \dots, 4$) aus der Algebra der Strukturgruppe $u(2)$ - zwei *elektromagnetische Generatoren* τ_a ($a = 1, 2$) (Elemente von $u(1) \times u(1)$) und zwei *Austauschgeneratoren* χ und $\bar{\chi}$ (verbleibende Generatoren von $u(2)$, entsprechend den eingefrorenen Freiheitsgraden). Damit erhält man folgende Darstellung des Eichpotentials \mathcal{A}_μ :

$$\mathcal{A}_\mu = -i {}^{(ex)}A_\mu \cdot \mathbf{1} + A^a{}_\mu \tau_a + B_\mu \chi - \bar{B}_\mu \bar{\chi} \doteq {}^{(ex)}\mathcal{A}_\mu + {}^{(s)}\mathcal{A}_\mu. \quad (3.3)$$

Dabei beschreibt ${}^{(ex)}\mathcal{A}_\mu$ ein externes elektromagnetisches Feld, das auf beide Fermionen gleichermaßen wirkt und damit proportional zum (8-dimensionalen) Einheitsoperator ist. Die internen Wechselwirkungen ${}^{(s)}\mathcal{A}_\mu$ enthalten einen elektromagnetischen Anteil ${}^{(el)}\mathcal{A}_\mu$ auf der Basis der elektromagnetischen Generatoren τ_1 und τ_2 und einen Wechselwirkungsanteil \mathcal{B}_μ auf der Basis der Austauschgeneratoren χ und $\bar{\chi}$:

$${}^{(s)}\mathcal{A}_\mu = {}^{(el)}\mathcal{A}_\mu + \mathcal{B}_\mu \quad (3.4a)$$

$${}^{(el)}\mathcal{A}_\mu = A^a{}_\mu \tau_a = -{}^{(el)}\bar{\mathcal{A}}_\mu \quad (3.4b)$$

$$\mathcal{B}_\mu = B_\mu \chi - \overset{*}{B}_\mu \bar{\chi} = -\bar{\mathcal{B}}_\mu. \quad (3.4c)$$

Dabei erfordert die Unitarität der Strukturgruppe $U(2)$ die Antihermitizität des Eichpotentials \mathcal{A}_μ ($\bar{\mathcal{A}}_\mu = -\mathcal{A}_\mu$) und damit die Antihermitizität der elektromagnetischen Generatoren τ_a ($a = 1, 2$) ($\bar{\tau}_a = -\tau_a$), wohingegen die Austauschgeneratoren χ beliebig bleiben ($\bar{\chi} \neq \pm\chi$). Damit ist das elektromagnetische Potential $A^a{}_\mu$ eine reelle Eins-Form ($\overset{*}{A}^a{}_\mu = A^a{}_\mu$) und das Austausch-Potential B_μ eine komplexe Eins-Form über der Raumzeit.

Unter Berücksichtigung des für gewöhnlich angenommenen abelschen Charakters der elektromagnetischen Wechselwirkungen erhält man folgende Kommutatorrelationen für die Generatoren:

$$[\tau_1, \tau_2] = 0 \quad [\chi, \bar{\chi}] = -i\tau_1 + i\tau_2 \quad (3.5a)$$

$$[\tau_1, \chi] = i\chi \quad [\tau_1, \bar{\chi}] = -i\bar{\chi} \quad (3.5b)$$

$$[\tau_2, \chi] = -i\chi \quad [\tau_2, \bar{\chi}] = i\bar{\chi}. \quad (3.5c)$$

Diese Beziehungen lassen sich erfüllen, indem man die Generatoren τ_1 , τ_2 , χ und $\bar{\chi}$ der Strukturgruppe $U(2)$ folgendermaßen wählt:

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{4 \times 4} & \mathbf{0}_{4 \times 4} \\ \mathbf{0}_{4 \times 4} & -i \cdot \mathbf{1}_{4 \times 4} \end{pmatrix} \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} -i \cdot \mathbf{1}_{4 \times 4} & \mathbf{0}_{4 \times 4} \\ \mathbf{0}_{4 \times 4} & \mathbf{0}_{4 \times 4} \end{pmatrix} \quad (3.6a)$$

$$\chi = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{4 \times 4} & -i \cdot \mathbf{1}_{4 \times 4} \\ \mathbf{0}_{4 \times 4} & \mathbf{0}_{4 \times 4} \end{pmatrix} \quad \bar{\chi} = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{4 \times 4} & \mathbf{0}_{4 \times 4} \\ i \cdot \mathbf{1}_{4 \times 4} & \mathbf{0}_{4 \times 4} \end{pmatrix}. \quad (3.6b)$$

Wendet man die Generatoren auf die Wellenfunktion Ψ (3.1) an, so lässt sich die

Wirkungsweise der Generatoren erkennen:

$$\tau_1 \Psi = \begin{pmatrix} 0 \\ -i\psi_2 \end{pmatrix} \quad \tau_2 \Psi = \begin{pmatrix} -i\psi_1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.7a)$$

$$\chi \Psi = \begin{pmatrix} -i\psi_2 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \bar{\chi} \Psi = \begin{pmatrix} 0 \\ i\psi_1 \end{pmatrix}; \quad (3.7b)$$

τ_1 selektiert also den Zustand ψ_2 aus der Wellenfunktion Ψ und τ_2 selektiert ψ_1 . Die Austauschgeneratoren mischen die beiden Zustände, indem sie deren Positionen vertauschen.

Unter Verwendung der Generatoren (3.6) erhält man nun folgende explizite Darstellung für das Eichpotential \mathcal{A}_μ (3.3)

$$\mathcal{A}_\mu = \begin{pmatrix} -i \left(({}^{ex})A_\mu - A_\mu^2 \right) \cdot \mathbf{1}_{4 \times 4} & -i B_\mu \cdot \mathbf{1}_{4 \times 4} \\ -i \bar{B}_\mu \cdot \mathbf{1}_{4 \times 4} & -i \left(({}^{ex})A_\mu - A_\mu^1 \right) \cdot \mathbf{1}_{4 \times 4} \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Mit Hilfe der Generatoren τ_α der Strukturgruppe lassen sich nun auch weitere Eichobjekte aufbauen: Für die Feldstärke $\mathcal{F}_{\mu\nu}$ ("Bündelkrümmung") (2.16) erhält man (vergl. (2.17)):

$$\mathcal{F}_{\mu\nu} = -i ({}^{ex})F_{\mu\nu} \cdot \mathbf{1} + F_{\mu\nu}^a \tau_a + G_{\mu\nu} \chi - \bar{G}_{\mu\nu} \bar{\chi} = ({}^{ex})\mathcal{F}_{\mu\nu} + ({}^s)\mathcal{F}_{\mu\nu}. \quad (3.9)$$

Dabei spaltet sich der interne Anteil $({}^s)\mathcal{F}_{\mu\nu}$ wieder auf in den elektromagnetischen Anteil $({}^{el})\mathcal{F}_{\mu\nu}$ und den Austauschanteil $\mathcal{G}_{\mu\nu}$:

$$({}^s)\mathcal{F}_{\mu\nu} = ({}^{el})\mathcal{F}_{\mu\nu} + \mathcal{G}_{\mu\nu} \quad (3.10a)$$

$$({}^{el})\mathcal{F}_{\mu\nu} = F_{\mu\nu}^a \tau_a \equiv F_{\mu\nu}^1 \tau_1 + F_{\mu\nu}^2 \tau_2 \quad (3.10b)$$

$$\mathcal{G}_{\mu\nu} = G_{\mu\nu} \chi - \bar{G}_{\mu\nu} \bar{\chi}. \quad (3.10c)$$

Zur Durchführung konkreter Berechnungen ist es sinnvoll, die Komponenten $\{F_{\mu\nu}^a, G_{\mu\nu}, \bar{G}_{\mu\nu}\}$ der Feldstärke $\mathcal{F}_{\mu\nu}$ durch die Komponenten $\{A_\mu^a, B_\mu, \bar{B}_\mu\}$ des Eichpotentials \mathcal{A}_μ auszudrücken. Dazu werden die entsprechenden Aufspaltungen von \mathcal{A}_μ (3.3) und $\mathcal{F}_{\mu\nu}$ (3.9) in die Rotationsbeziehung $\mathcal{F}_{\mu\nu} = \partial_\mu \mathcal{A}_\nu - \partial_\nu \mathcal{A}_\mu + [\mathcal{A}_\mu, \mathcal{A}_\nu]$ (2.16) eingesetzt und man erhält folgende Beziehungen zwischen den Komponenten:

$${}^{(ex)}F_{\mu\nu} = \partial_\mu {}^{(ex)}A_\nu - \partial_\nu {}^{(ex)}A_\mu \quad (3.11a)$$

$$F^1_{\mu\nu} = \partial_\mu A^1_\nu - \partial_\nu A^1_\mu + i [B_\mu \overset{*}{B}_\nu - B_\nu \overset{*}{B}_\mu] \quad (3.11b)$$

$$F^2_{\mu\nu} = \partial_\mu A^2_\nu - \partial_\nu A^2_\mu - i [B_\mu \overset{*}{B}_\nu - B_\nu \overset{*}{B}_\mu] \quad (3.11c)$$

$$G_{\mu\nu} = \partial_\mu B_\nu - \partial_\nu B_\mu + i [A^1_\mu - A^2_\mu] B_\nu - i [A^1_\nu - A^2_\nu] B_\mu \quad (3.11d)$$

$$\overset{*}{G}_{\mu\nu} = \partial_\mu \overset{*}{B}_\nu - \partial_\nu \overset{*}{B}_\mu - i [A^1_\mu - A^2_\mu] \overset{*}{B}_\nu + i [A^1_\nu - A^2_\nu] \overset{*}{B}_\mu . \quad (3.11e)$$

Man sieht, dass in die elektromagnetischen Komponenten ${}^{(a)}F_{\mu\nu}$ der Feldstärke nicht nur die elektromagnetischen Potentiale ${}^{(a)}A_\mu$ eingehen, sondern auch das Austauschpotential B_μ , genauso wie in die Austauschkomponente $G_{\mu\nu}$ neben dem Austauschpotential B_μ auch die elektromagnetischen Potentiale ${}^{(a)}A_\mu$ eingehen. Dabei sind die elektromagnetischen Eichobjekte A^a_μ , $F^a_{\mu\nu}$ reell, wohingegen die Austauschgegenstände B_μ , $G_{\mu\nu}$ komplex sind.

Definiert man die ‘‘Gesamtfeldstärke’’ $F_{\mu\nu}$ als Summe aus den beiden Einteilchenfeldstärken $F^1_{\mu\nu}$ und $F^2_{\mu\nu}$,

$$F_{\mu\nu} \doteq F^1_{\mu\nu} + F^2_{\mu\nu} , \quad (3.12)$$

so gehorcht diese Gesamtfeldstärke $F_{\mu\nu}$ einer abelschen Rotationsbeziehung mit dem ‘‘Gesamtpotential’’ A_μ , da der Kommutator zwischen den beiden Generatoren τ_1 und τ_2 , die ja Generatoren von $U(1) \times U(1)$ sind, aufgrund des abelschen Charakters dieser Gruppe verschwindet; die Austauschanteile B_μ und $\overset{*}{B}_\mu$ heben sich bei der Summenbildung gerade weg.

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu . \quad (3.13)$$

Das ‘‘Gesamtpotential’’ A_μ ist dabei analog zur Gesamtfeldstärke $F_{\mu\nu}$ definiert als

$$A_\mu \doteq A^1_\mu + A^2_\mu . \quad (3.14)$$

3.3 RST- und Maxwell-Ströme in einem Zwei-Fermionen-System

Um die Dynamik der Materie zu bestimmen benötigt man die Ströme. Über die RST-Ströme $j_{\alpha\nu}$ (2.28b) in Form der Lorentz-Kraft und über die Wellenfunktion Ψ via

Minimalkopplung können Felder auf das Zwei-Fermionen-System wirken; diese Felder werden aus den Maxwell-Strömen j^α_ν mit Hilfe der Maxwell-Gleichungen (2.23) generiert, sofern es sich nicht um äußere Felder handelt. Dabei sind die Maxwell-Ströme in der RST j^α_μ über die Fasermetric \mathcal{K} mit den RST-Strömen $j_{\alpha\mu}$ verknüpft (2.33), vergl. auch Abschnitt 3.3.4.

3.3.1 RST-Ströme

Der RST-Gesamtstrom ist nach (2.25b)¹ definiert als $j_\mu = \bar{\Psi}\Gamma_\mu\Psi$.

Im Falle zweier Dirac-Teilchen ist der Gesamtgeschwindigkeitsoperator Γ_μ gegeben durch eine achtdimensionale Darstellung der Gammamatrizen γ_μ ; damit nimmt der achtdimensionale Geschwindigkeitsoperator Γ_μ folgende Form an:

$$\Gamma_\mu = \begin{pmatrix} \gamma_\mu & 0 \\ 0 & \gamma_\mu \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

Dabei werden die Gammamatrizen standardmäßig durch die Pauli-Matrizen σ_j ($j = 1, 2, 3$) ausgedrückt:

$$\gamma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \gamma^j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ -\sigma_j & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.16)$$

Der Operator Γ_μ generiert damit eine achtdimensionale Darstellung der 16-dimensionalen Clifford-Algebra $C(1, 3)$.

$$\Gamma_\mu\Gamma_\nu + \Gamma_\nu\Gamma_\mu = 2g_{\mu\nu} \cdot \mathbf{1}. \quad (3.17)$$

Um eine vollständige Basis für die $8 \times 8 = 64$ unabhängigen Operatoren über der typischen Vektorfaser \mathbb{C}^8 zu generieren, wird Γ_μ durch die vier $U(2)$ -Generatoren $\{\tau_a, \chi, \bar{\chi}\}$ (3.5) ergänzt ($\leadsto 16 \times 4 = 64$).

Mit Hilfe dieser vollständigen Basis lassen sich nun sämtliche RST-Operatoren nach diesem Basissatz entwickeln. Damit werden die Geschwindigkeitsoperatoren $v_{\alpha\mu}$ folgendermaßen definiert:

$$v_{\alpha\mu} \doteq i\tau_\alpha \cdot \Gamma_\mu = i\Gamma_\mu \cdot \tau_\alpha = \frac{i}{2} \{\tau_\alpha, \Gamma_\mu\}. \quad (3.18)$$

¹Zur Beschreibung stationärer gebundener Zustände, wie sie in den folgenden Kapiteln untersucht werden, benötigt man reine Zustände - allerdings lassen sich die Gleichungen verallgemeinert auch für Gemische aufstellen, die den reinen Zustand als Spezialfall enthalten (vergl. 2.7)

Für die elektromagnetischen Generatoren τ_1 und τ_2 ergeben sich daraus unter Verwendung der Definition der RST-Ströme $j_{\alpha\mu}$ (2.28b) die Dirac-Ströme $k_{a\mu}$ ($a \neq b$):

$$j_{a\mu} = \bar{\psi}_b \gamma_\mu \psi_b \doteq k_{b\mu} \quad (3.19)$$

(man beachte die Zuordnung $j_{1\mu} \doteq k_{2\mu}$ und $j_{2\mu} \doteq k_{1\mu}$). Vergleicht man die Definition des Gesamtstroms j_μ (2.25) mit (3.19), so sieht man, dass der Gesamtstrom j_μ gleich der Summe der RST-Ströme $j_{a\mu}$ bzw. der Dirac-Ströme $k_{b\mu}$ ist:

$$j_\mu = \bar{\Psi} \cdot \Gamma_\mu \cdot \Psi = j_{1\mu} + j_{2\mu} = k_{2\mu} + k_{1\mu} . \quad (3.20)$$

Auch mit den beiden verbleibenden Generatoren χ , $\bar{\chi}$ sind Ströme verbunden, und zwar der *Austauschstrom* h_μ und sein komplex konjugiertes h_μ^*

$$h_\mu = i \bar{\Psi} \Gamma_\mu \chi \Psi = i \bar{\Psi} \chi \Gamma_\mu \Psi \equiv \bar{\psi}_1 \gamma_\mu \psi_2 \quad (3.21a)$$

$$h_\mu^* = -i \bar{\Psi} \Gamma_\mu \bar{\chi} \Psi = -i \bar{\Psi} \bar{\chi} \Gamma_\mu \Psi \equiv \bar{\psi}_2 \gamma_\mu \psi_1 . \quad (3.21b)$$

Es zeigt sich hier, dass es sich bei den Geschwindigkeitsoperatoren Γ_μ , γ_μ um (pseudo-)hermitische Operatoren handelt

$$\bar{\Gamma}_\mu \doteq \Gamma_0 \cdot \Gamma_\mu^\dagger \cdot \Gamma_0 \equiv \Gamma_\mu \quad (3.22a)$$

$$\bar{\gamma}_\mu \doteq \gamma_0 \cdot \gamma_\mu^\dagger \cdot \gamma_0 \equiv \gamma_\mu \quad (3.22b)$$

Das (pseudo-)hermitisch Konjugierte der Wellenfunktion Ψ ist wie gewohnt definiert:

$$\bar{\Psi} = \Psi^\dagger \cdot \Gamma_0 \quad (3.23a)$$

$$\bar{\psi}_a = \psi_a^\dagger \cdot \gamma_0 . \quad (3.23b)$$

In Anbetracht der Tatsache, dass sich die (pseudo-)hermitischen Geschwindigkeitsoperatoren Γ_μ so wählen lassen, dass sie über einer pseudo-riemannschen Raumzeit kovariant konstant sind ($\nabla_\lambda g_{\mu\nu} \equiv 0$)

$$\mathcal{D}_\mu \Gamma_\nu \equiv 0 , \quad (3.24)$$

vereinfacht sich die Form der Erhaltungsgleichung für den Hamiltonian (2.11b) für Fermionen zu

$$\Gamma^\mu \mathcal{H}_\mu = \mathcal{M} c^2 \quad (3.25)$$

(mit $\mathcal{M} = M \cdot \mathbf{1}$).

Dies lässt sich zeigen, indem man den Feldstärketensor $\mathcal{F}_{\mu\nu}$ in der Erhaltungsgleichung (2.11b) durch die Darstellung des Feldstärketensors in der Integrabilitätsbedingung für den Hamiltonian (2.9) ersetzt. Damit ergibt sich unter Verwendung von (3.24) folgende Form der Integrabilitätsbedingung (2.9)

$$i\hbar c \left(\frac{\mathcal{M}c}{\hbar} \right)^2 = -\Gamma^\nu \mathcal{D}_\nu (\Gamma^\mu \mathcal{H}_\mu) - \frac{i}{\hbar c} \Gamma^\mu \Gamma^\nu \mathcal{H}_\nu \mathcal{H}_\mu, \quad (3.26)$$

die durch Gleichung (3.25) gelöst wird.

Multipliziert man die RSG (2.4) nun von links mit Γ^μ , so erhält man unter Verwendung der vereinfachten Form der Erhaltungsgleichung (3.25) folgende Zweiteilchen-Dirac-Gleichung:

$$i\hbar c \Gamma^\mu (\mathcal{D}_\mu \Psi) = \mathcal{M}c^2 \Psi. \quad (3.27)$$

Aufgrund der Form der Gesamtwellenfunktion $\Psi = (\psi_1, \psi_2)^T$ scheint es sich bei dieser Zweiteilchen-Dirac-Gleichung um ein entkoppeltes System in Bezug auf die Wellenfunktionen der beiden Fermionen zu handeln, die Kopplung zwischen den Wellenfunktionen erfolgt jedoch über die kovariante Ableitung \mathcal{D}_μ (dies wird am Ende dieses Abschnitts noch genauer gezeigt). Mit der vereinfachten Form der Erhaltungsgleichung (3.25) und der relativistischen Schrödinger-Gleichung (2.4) ist nun die Erhaltungsgleichung für den Gesamtstrom j_μ (3.20)

$$\partial^\mu j_\mu = 0 \quad (3.28)$$

automatisch erfüllt, sowie eine Kontinuitätsgleichung für die RST-Ströme $j_{\alpha\mu}$ der Form

$$D^\mu j_{\alpha\mu} = 0. \quad (3.29)$$

Wird die eichkovariante Ableitung der RST-Ströme $j_{\alpha\mu}$ (3.29) nun durch die Komponenten des Eichpotentials \mathcal{A}_μ ausgedrückt und die Beziehung zwischen RST- und Dirac-Strömen (3.19) verwendet, so erhält man folgende Quellgleichungen für $k_{1\mu}$, $k_{2\mu}$, h_μ und h_μ^* :

$$\partial^\mu k_{1\mu} = i \left[B^\mu h_\mu - \overset{*}{B}^\mu \overset{*}{h}_\mu \right] \quad (3.30a)$$

$$\partial^\mu k_{2\mu} = -i \left[B^\mu h_\mu - \overset{*}{B}^\mu \overset{*}{h}_\mu \right] \quad (3.30b)$$

$$\partial^\mu h_\mu = i \left[A^{1\mu} - A^{2\mu} \right] h_\mu + i \overset{*}{B}^\mu \left[k_{1\mu} - k_{2\mu} \right] \quad (3.30c)$$

$$\partial^\mu \overset{*}{h}_\mu = -i \left[A^{1\mu} - A^{2\mu} \right] \overset{*}{h}_\mu - i B^\mu \left[k_{1\mu} - k_{2\mu} \right]. \quad (3.30d)$$

Addiert man die Gleichungen (3.30a) und (3.30b), so ergibt sich, wie erwartet, die Erhaltung des Gesamtstroms j_μ (3.28).

Wie immer bei Eichwechselwirkungen wirken die Ströme als die Erzeuger der Wechselwirkungen: Jeder Teilchenstrom sendet ein Potential aus, das auf andere Teilchen wirkt, indem es deren Wellenfunktion über die Minimalkopplung beeinflusst, die sich in der kovarianten Ableitung $\mathcal{D}_\mu \Psi$ (3.2) zeigt. Im vorliegenden Zweiteilchen-Fall lässt sich die kovariante Ableitung (3.2) wie folgt aufspalten:

$$\mathcal{D}_\mu \psi = \begin{pmatrix} D_\mu \psi_1 \\ D_\mu \psi_2 \end{pmatrix}; \quad (3.31)$$

und unter Verwendung der Darstellung von \mathcal{A}_μ (3.8) erhält man folgende explizite Darstellung der kovarianten Ableitung D_μ :

$$D_\mu \psi_1 = \partial_\mu \psi_1 - i \left({}^{(ex)}A_\mu + A_\mu^2 \right) \psi_1 - i B_\mu \psi_2 \quad (3.32a)$$

$$D_\mu \psi_2 = \partial_\mu \psi_2 - i \left({}^{(ex)}A_\mu + A_\mu^1 \right) \psi_2 - i \overset{*}{B}_\mu \psi_1; \quad (3.32b)$$

dies führt zu folgender Komponentenschreibweise der Zweiteilchen-Dirac-Gleichung (3.27):

$$i\hbar \gamma^\mu D_\mu \psi_1 = Mc \psi_1 \quad (3.33a)$$

$$i\hbar \gamma^\mu D_\mu \psi_2 = Mc \psi_2. \quad (3.33b)$$

Hier sieht man, wie das Austauschpotential B_μ die Wellenfunktion ψ_2 des zweiten Teilchens in die kovariante Ableitung des ersten Teilchens (3.32a) koppelt und umgekehrt; d.h. es handelt sich hierbei um eine weitere Art der Kraft zwischen den beiden Teilchen (“Austauschkraft”).

3.3.2 Maxwell-Ströme

Für ein Zwei-Fermionen-System in einem externen Potential ergibt sich für die Maxwell-Gleichungen (2.20) folgende Darstellung für die externen bzw. internen Anteile:

$$\partial^\mu {}^{(ex)}F_{\mu\nu} = 4\pi \alpha_s {}^{(ex)}j_\nu \quad (3.34a)$$

$$\mathcal{D}^\mu {}^{(S)}\mathcal{F}_{\mu\nu} = -4\pi \alpha_s i {}^{(S)}\mathcal{J}_\nu, \quad (3.34b)$$

wobei der Stromoperator ${}^{(S)}\mathcal{J}_\nu$ unter Verwendung der Eichoperatoren folgendermaßen definiert ist:

$$\mathcal{J}_\mu = -i {}^{(ex)}j_\mu \cdot \mathbf{1} + {}^{(S)}\mathcal{J}_\mu = -i {}^{(ex)}j_\mu \cdot \mathbf{1} + j_{\mu\nu}^1 \tau_1 + j_{\mu\nu}^2 \tau_2 + h_\mu \chi - \overset{*}{h}_\mu \bar{\chi}. \quad (3.35)$$

Das unterschiedliche Vorzeichen auf der rechten Seite der Maxwell-Gleichungen (3.34a) und (3.34b) ist auf die Annahme zurückzuführen, dass die externe Quelle (hier der Atomkern) positive Ladung trägt, während die anderen beiden Elektronen negativ geladen sind. Der interne Anteil (3.34b) lässt sich wie folgt in Komponentenform darstellen:

$$\partial^\mu F^1_{\mu\nu} + i \left[B^\mu G^*_{\mu\nu} - \overset{*}{B}^\mu G_{\mu\nu} \right] = 4\pi\alpha_s j^1_\nu \quad (3.36a)$$

$$\partial^\mu F^2_{\mu\nu} - i \left[B^\mu G^*_{\mu\nu} - \overset{*}{B}^\mu G_{\mu\nu} \right] = 4\pi\alpha_s j^2_\nu \quad (3.36b)$$

$$\partial^\mu G_{\mu\nu} + i \left[A^1_\mu - A^2_\mu \right] G^\mu_\nu - i B^\mu \left[F^1_{\mu\nu} - F^2_{\mu\nu} \right] = 4\pi\alpha_s j^3_\nu \quad (3.36c)$$

$$\partial^\mu \overset{*}{G}_{\mu\nu} - i \left[A^1_\mu - A^2_\mu \right] \overset{*}{G}^\mu_\nu + i \overset{*}{B}^\mu \left[F^1_{\mu\nu} - F^2_{\mu\nu} \right] = 4\pi\alpha_s j^4_\nu . \quad (3.36d)$$

Man findet hier in jeder Gleichung Kombinationen von elektromagnetischen und Austauschfeldstärken. Addiert man allerdings die ersten beiden Gleichungen (3.36a) und (3.36b), so fallen die Austauschanteile weg und man erhält in Übereinstimmung mit der herkömmlichen Theorie folgende *abelsche* Maxwell-Gleichung

$$\partial^\mu F_{\mu\nu} = -4\pi\alpha_s j_\nu \quad (3.37)$$

für die *Gesamtfeldstärke* $F_{\mu\nu}$ und den *Gesamtstrom* j_ν , wobei die Gesamtfeldstärke $F_{\mu\nu}$ gleich der Summe der Einzelfeldstärken $F^a_{\mu\nu}$ und der Gesamtstrom j_ν gleich der negativen Summe der beiden Maxwell-Ströme j^a_ν ist:

$$F_{\mu\nu} = F^1_{\mu\nu} + F^2_{\mu\nu} \quad (3.38a)$$

$$j_\nu = - \left(j^1_\nu + j^2_\nu \right) . \quad (3.38b)$$

3.3.3 Normierung der Ströme

Über die Normierung der Ströme wird der Bezug zu den Teilchen des Systems hergestellt: Betrachtet man ein Zwei-Fermionen-System unter dem Einfluss eines externen Feldes in Form eines Atomkerns mit der Kernladungszahl z_{ex} , so wird der RST-Gesamtstrom j_μ (3.38b), der das Zwei-Fermionen-System mit zwei Ladungseinheiten beschreibt, auf 2 normiert und der externe Strom $^{(ex)}j_\mu$ auf die Kernladungszahl z_{ex} :

$$\int_{(S)} j_\mu dS^\mu = 2 \quad (3.39a)$$

$$\int_{(S)} ^{(ex)}j_\mu dS^\mu = z_{ex} , \quad (3.39b)$$

wobei die Integrale aufgrund der Kontinuitätsgleichung für den Gesamtstrom $\partial^\mu j_\mu = 0$ (3.28) bzw. für den externen Strom $\partial^\mu {}^{(ex)}j_\mu = 0$ (2.32a) unabhängig von der gewählten Hyperfläche S sind.

Für ein Zwei-Fermionen-System, das von zwei vierkomponentigen Dirac-Spinoren ψ_a beschrieben wird, benötigt man zur Festlegung der absoluten Größe eigentlich zwei (unabhängige) Normierungsbedingungen - eine für jedes Teilchen und nicht nur eine für den Gesamtstrom j_μ wie (3.39a). Da für die Einteilchenströme im Gegensatz zum Gesamtstrom $\partial^\mu j_\mu = 0$ keine homogenen Quellgleichungen (3.30) existieren, lassen sich auch keine Einteilchen-Normierungsbedingungen der Form (3.39) erhalten, die sich ja aus der homogenen Quellgleichung für den Gesamtstrom j_μ herleitet. Man bekommt die gewünschten Einteilchen-Normierungsbedingungen allerdings aus den Quellgleichungen für die Einteilchen-Ströme $k_{a\mu}$ (3.30a) und (3.30b), indem man berücksichtigt, dass die jeweils rechten Seiten der Gleichungen eine Divergenz bilden, nämlich

$$-i \left[B^\mu h_\mu - \overset{*}{B}^\mu \overset{*}{h}_\mu \right] = \partial^\mu G_\mu, \quad (3.40)$$

wobei der Verschränkungsvektor G_μ gegeben ist durch

$$G_\mu = \frac{i}{4\pi\alpha_s} \left[B^\nu \overset{*}{G}_{\mu\nu} - \overset{*}{B}^\nu G_{\mu\nu} \right]. \quad (3.41)$$

Mit Hilfe des Verschränkungsvektors G_μ lassen sich nun die gewünschten Normierungsbedingungen herleiten, indem man die Quellgleichungen (3.30a) und (3.30b) wie folgt umschreibt

$$\partial^\mu (k_{1\mu} + G_\mu) \doteq \partial^\mu l_{1\mu} = 0 \quad (3.42a)$$

$$\partial^\mu (k_{2\mu} - G_\mu) \doteq \partial^\mu l_{2\mu} = 0. \quad (3.42b)$$

Der Verschränkungsvektor G_μ besitzt nur Austauschanteile ($B_\mu, G_{\mu\nu}$) und ist damit natürlich auch nur beim Auftreten von Austauschwechselwirkung ungleich Null. Die beiden modifizierten Teilchenströme $l_{1\mu}$ und $l_{2\mu}$ besitzen nun homogene Quellgleichungen

$$\partial^\mu l_{a\mu} = 0 \quad (3.43)$$

und damit kann man für jeden der beiden modifizierten Teilchenströme $l_{1\mu}$ und $l_{2\mu}$ eine eigene relativistische Normierungsbedingung verlangen:

$$\int_{(S)} l_{1\mu} dS^\mu = 1 \quad (3.44a)$$

$$\int_{(S)} l_{2\mu} dS^\mu = 1. \quad (3.44b)$$

Nachdem nun sowohl die RST-Ströme als auch die Maxwell-Ströme für ein Zwei-Fermionen-System eingeführt worden sind, soll im folgenden die Beziehung der Ströme zueinander dargestellt werden. Dies geschieht, wie bereits erwähnt, unter Verwendung des Kompatibilitätstensors \mathcal{K} (2.36).

3.3.4 Der Zwei-Fermionen-Kompatibilitätstensor \mathcal{K}

Der Kompatibilitätstensor \mathcal{K} (2.36) lässt sich mit Hilfe der Generatoren (3.6) nun explizit darstellen:

$$\mathcal{K} = \begin{pmatrix} 4(-4c_1 - c_2) & -16c_1 & 0 & 0 \\ -16c_1 & 4(-4c_1 - c_2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4c_2 \\ 0 & 0 & 4c_2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.45)$$

Es gelingt nun, eine der beiden Konstanten durch folgende Überlegung zu eliminieren: Der Gesamtstrom j_μ , für den ja eine Erhaltungsgleichung der Form $\partial^\mu j_\mu \equiv 0$ gilt (3.28), muss sich sowohl aus den Dirac-Strömen generieren lassen $j_\mu = k_{1\mu} + k_{2\mu}$ (3.20) als auch aus den Maxwell-Strömen $j_\mu = -(j^1_\mu + j^2_\mu)$, vergl. (3.38b), da es ansonsten zwei erhaltene Gesamtströme gäbe. Damit ergibt sich folgende Beziehung:

$$j_\nu = -(j^1_\nu + j^2_\nu) \equiv k_{1\nu} + k_{2\nu}. \quad (3.46)$$

Da die Maxwell-Ströme j^a_μ mit den RST-Strömen $j_{a\mu}$ über die Fasermetric \mathcal{K} über $j^a_\mu = K^{ab} j_{b\mu}$ (2.33) in Beziehung stehen, bedeutet dies eine Bedingung für die Fasermetric \mathcal{K} (2.36):

$$k_{1\nu} + k_{2\nu} = -4(c_2 + 8c_1)(j^1_\nu + j^2_\nu). \quad (3.47)$$

Durch folgende Wahl der Konstanten c_1 und c_2 (vergl. [23])

$$c_1 = \frac{1}{16} e^u \cdot \cosh u \quad (3.48a)$$

$$c_2 = -\frac{1}{4} e^{2u} \quad (3.48b)$$

lässt sich diese Bedingung erfüllen und man erhält folgende Beziehung zwischen den Maxwell- und den Dirac- bzw. Austauschströmen:

$$j^1_\mu = -e^{-u} \{ \cosh u \cdot k_{1\mu} + \sinh u \cdot k_{2\mu} \} \quad (3.49a)$$

$$j^2_\mu = -e^{-u} \{ \sinh u \cdot k_{1\mu} + \cosh u \cdot k_{2\mu} \} \quad (3.49b)$$

$$j^3_\mu = e^{-2u} \cdot h_\mu^* \quad (3.49c)$$

$$j^4_\mu = -e^{-2u} \cdot h_\mu. \quad (3.49d)$$

Man sieht, dass in die Maxwell-Ströme j^a_μ neben den Dirac-Strömen $k_{b\mu}$, die ja vom jeweils anderen Teilchen erzeugt werden, auch die Dirac-Ströme $k_{a\mu}$, die vom Teilchen selbst erzeugt werden, mit eingehen. Auf diese Weise werden Selbstwechselwirkungen in die RST eingebunden.

Die Konstante u (*Selbstwechselwirkungsparameter*) bleibt damit als einziger freier Parameter in der Fasermetrik \mathcal{K} (2.36) übrig:

$$\mathcal{K}(u) = \begin{pmatrix} e^u \cdot \sinh u & -e^u \cdot \cosh u & 0 & 0 \\ -e^u \cdot \cosh u & e^u \cdot \sinh u & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -e^{2u} \\ 0 & 0 & -e^{2u} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.50)$$

Setzt man den Selbstwechselwirkungsparameter $u = 0$, so tritt im System keine Selbstwechselwirkung mehr auf; die Diagonalelemente in \mathcal{K} verschwinden und es ergibt sich folgender Kompatibilitätstensor \mathcal{K} ohne Selbstwechselwirkung:

$$\mathcal{K} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.51)$$

Betrachtet man in diesem Fall die Beziehungen zwischen Maxwell- und RST- bzw. Austauschströmen (3.49), so ergibt sich folgende vereinfachte Form, bei der jeweils ein Maxwell-Strom einem RST- bzw. Austauschstrom zugeordnet ist:

$$j^1_\mu = -k_{1\mu} \quad (3.52a)$$

$$j^2_\mu = -k_{2\mu} \quad (3.52b)$$

$$j^3_\mu = \overset{*}{h}_\mu \quad (3.52c)$$

$$j^4_\mu = -h_\mu, \quad (3.52d)$$

d.h. im Gegensatz zu (3.49a) und (3.49b) werden den Maxwell-Strömen jedes Teilchens keine Komponenten des RST-Teilchenstroms des jeweils anderen Teilchens beigemischt.

Die $K_{12}(u) = K_{21}(u)$ Komponente des Kompatibilitätstensors (3.50) wird als *Paarkopplungskonstante* K_p bezeichnet:

$$K_p(u) \doteq -\frac{e^{2u} + 1}{2}, \quad (3.53)$$

und die $K_{11}(u) = \mathcal{K}_{22}(u)$ Komponente als *Selbstkopplungskonstante* $K_s(u)$

$$K_s(u) \doteq \frac{e^{2u} - 1}{2}. \quad (3.54)$$

Für den Fall verschwindender Selbstwechselwirkung ($u = 0$), verschwindet die Selbstkopplungskonstante ($K_s(0) = 0$), die Paarkopplungskonstante wird zu -1 ($K_p(0) = -1$).

3.3.5 Mechanismus der Selbstwechselwirkungen

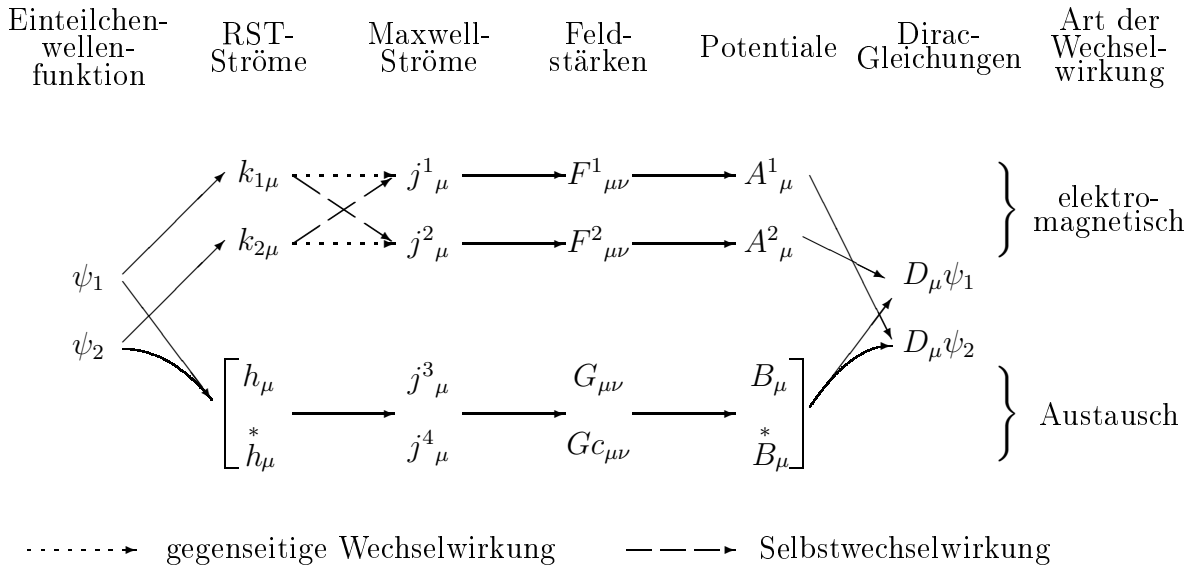


Abbildung 3.1: Mechanismus der Wechselwirkungen

Die Selbstwechselwirkung der Teilchen wird über die Maxwell-Gleichungen (3.36a) und (3.36b) im Sinne einer Eichtheorie durch das Prinzip der Minimalkopplung realisiert. Dabei trägt zur Erzeugung des zweiten Maxwell-Stroms j^2_μ auch das erste Teilchen über seine Wellenfunktion ψ_1 (3.19) bei; dieser Strom j^2_μ erzeugt dann die zweite elektromagnetische Feldstärke $F^2_{\mu\nu}$ entsprechend der zweiten Maxwell-Gleichung (3.36b); und das entsprechende Eichpotential A^2_μ gelangt dann über die kovariante Ableitung $D_\mu\psi_1$ in die Dirac-Gleichung (3.32a) für das *erste* Teilchen; entsprechendes gilt für das zweite Teilchen ($\psi_1 \rightarrow k_{1\mu} \rightarrow k^2_\mu \rightarrow F^2_{\mu\nu} \rightarrow A^2_\mu \rightarrow D_\mu\psi_1$). Außerdem gibt es noch einen weiteren Mechanismus für Selbstwechselwirkung und zwar über die Austauschströme h_μ (3.49d) und $*h_\mu$ (3.49c). Hier lautet die Kette z.B. für das erste Teilchen ($\psi_1 \rightarrow h_\mu \rightarrow \{G_{\mu\nu}, *G_{\mu\nu}\} \rightarrow \{B_\mu, *B_\mu\} \rightarrow D_\mu\psi_1$), vergl.

Abbildung (3.1). Es ist interessant zu sehen, dass die elektromagnetische Selbstwechselwirkung verschwindet, wenn man den Selbstwechselwirkungsparameter $u = 0$ setzt (vergl. (3.49a) und (3.49b)), wohingegen die Selbstwechselwirkung aufgrund des Austauschanteils weiter besteht.

3.3.6 Tabellarischer Überblick über die in der RST auftretenden Ströme

Da sich die Definition der Ströme in der RST doch deutlich von den konventionellen Strömen unterscheidet, soll hier abschließend in Tabelle (3.1) ein tabellarischer Überblick über die in der RST auftretenden Ströme gegeben werden:

$j_{\alpha\mu}$	RST-Ströme	$j_{\alpha\mu} = \bar{\Psi}v_{\alpha\mu}\Psi = i\bar{\Psi}\Gamma_{\mu}\tau_{\alpha}\Psi$
$j_{a\mu}$ ($a = 1, 2$)	Einteilchen-RST-Strom	für Gemische $j_{a\mu} \doteq \text{tr}(\mathcal{I} \cdot v_{a\mu})$ für reine Zustände $j_{a\mu} \doteq \bar{\Psi}v_{a\mu}\Psi = \bar{\psi}_b\gamma_{\mu}\psi_b \doteq k_{b\mu}$ ($b \neq a$)
	Quellgleichung für $j_{a\mu}$	$D^{\mu}j_{a\mu} = 0$ mit der kovarianten Ableitung D_{μ} (2.24)
h_{μ}	Austauschstrom	$h_{\mu} = i\bar{\Psi}\chi\Gamma_{\mu}\Psi = \bar{\psi}_1\gamma_{\mu}\psi_2$
h_{μ}^*	Austauschstrom	$h_{\mu}^* = -i\bar{\Psi}\bar{\chi}\Gamma_{\mu}\Psi = \bar{\psi}_2\gamma_{\mu}\psi_1$
\mathcal{J}_{μ}	Maxwell-Stromoperator	$\mathcal{D}^{\mu}\mathcal{F}_{\mu\nu} = -4\pi\alpha_s i\mathcal{J}_{\nu}$
	\mathcal{J}_{μ} in Komponenten zerlegt nach den Generatoren der Strukturgruppe	$\mathcal{J}_{\mu} = {}^{(ex)}j_{\mu}\mathbf{1} + ij^{\alpha}_{\mu}\tau_{\alpha}$
	Quellgleichung für \mathcal{J}_{μ}	$\mathcal{D}^{\mu}\mathcal{J}_{\mu} = 0$
${}^{(ex)}j_{\mu}$	externer Strom	$\partial^{\mu}{}^{(ex)}F_{\mu\nu} = 4\pi\alpha_s {}^{(ex)}j_{\nu}$
	Erhaltungsgleichung für ${}^{(ex)}j_{\mu}$	$\partial^{(ex)}j_{\mu} = 0$
j^a_{μ}	Maxwell-Teilchenströme	$D^{\mu}F^{\alpha}_{\mu\nu} = 4\pi\alpha_s j^{\alpha}_{\nu}$
	Quellgleichung für j^a_{μ}	$D^{\mu}j^a_{\mu} = 0$
j_{μ}	Gesamtteilchenstrom	$j_{\mu} \doteq \bar{\Psi}v_{\mu}\Psi = j_{1\mu} + j_{2\mu} \equiv -(j^1_{\mu} + j^2_{\mu})$ mit dem Geschwindigkeitsoperator v_{μ}
	Erhaltungsgleichung für j_{μ}	$\partial^{\mu}j_{\mu} = 0$
$\mathcal{K} = \{K_{\alpha\beta}\}$	Kompatibilitätstensor	$j_{\alpha\mu} = K_{\alpha\beta}j^{\beta}_{\mu}$, $j^{\alpha}_{\mu} = K^{\alpha\beta}j_{\beta\mu}$

Tabelle 3.1: Zusammenfassung der Ströme in der RST

Kapitel 4

Energie-Impulsdichten und Energiefunktionale für ein Zwei-Fermionen-System mit externem Potential

Damit die RST eine in sich abgeschlossene Theorie der elementaren Materie darstellen kann, muss es möglich sein, einer stationären Feldkonfiguration einen bestimmten Energieinhalt zuzuordnen. Die Gesamtenergie E_T des Systems ist definiert als das Integral der Zeitkomponente ${}^{(T)}T_{00}$ des Gesamtenergie-Impulstensors ${}^{(T)}T_{\mu\nu}$ über dem gesamten dreidimensionalen Raum

$$E_T = \int d^3\vec{r} {}^{(T)}T_{00}(\vec{r}) . \quad (4.1)$$

Die Gesamtenergie-Impulsdichte ${}^{(T)}T_{\mu\nu}$ wird definiert als die Summe der Energie-Impulsdichten für den Materieanteil ${}^{(D)}T_{\mu\nu}$, für den internen Eichfeldanteil ${}^{(G)}T_{\mu\nu}$ und für den Wechselwirkungsanteil mit der externen Quelle ${}^{(es)}T_{\mu\nu}$

$${}^{(T)}T_{\mu\nu} = {}^{(D)}T_{\mu\nu} + {}^{(G)}T_{\mu\nu} + {}^{(es)}T_{\mu\nu} . \quad (4.2)$$

Entsprechend der Aufspaltung der Energie-Impulsdichte (4.2), ist auch die Gesamtenergie E_T gleich der Summe der Energien der entsprechenden Untersysteme

$$E_T = E_D + E_G + E_{es} , \quad (4.3)$$

wobei für die Energien der Untersysteme folgende Definition gilt

$$E_D = \int d^3\vec{r}^{(D)} T_{00} , \quad (4.4a)$$

$$E_G = \int d^3\vec{r}^{(G)} T_{00} , \quad (4.4b)$$

$$E_{es} = \int d^3\vec{r}^{(es)} T_{00} . \quad (4.4c)$$

In den folgenden Abschnitten werden die expliziten Darstellungen für die Energie-Impulsdichten und Energien aufgestellt; zunächst durch Herleitung aufgrund von intuitiven dynamischen Überlegungen und anschließend mit Hilfe des Noether-Theorems. Es wird sich dann zeigen, dass die externe Wechselwirkungsenergie nur für den Fall einer isotropen, stationären Verteilung des externen Potentials ${}^{(ex)}A_\mu$ (z.B. Coulomb-Potential des Atomkerns) allein durch E_{es} (4.4c) beschrieben wird. Für den allgemeinen Fall wird sich bei einem Vergleich mit dem Energie-Impulstensor aus dem Noether-Theorem in Abschnitt 4.2.2 ergeben, dass eine gewisse Modifikation der Energie-Impulsdichte für die externe Wechselwirkung ${}^{(es)}T_{\mu\nu}$ und damit auch der externen Wechselwirkungsenergie E_{es} nötig ist, um das Gesamtenergiefunktional in Einklang mit dem Noether-Theorem zu bringen, was natürlich auch eine Modifikation des Gesamtenergiefunktionals E_T bedeutet. Man erhält damit die endgültige Form des Gesamtenergiefunktionals E_{TX} , vergl. Abschnitt 4.3.

4.1 Herleitung der Energie-Impulsdichten und Energien

Man erhält die verschiedenen Energie-Impulsdichten, indem man deren Quellgleichungen löst, deshalb werden nun zunächst die Quellgleichungen aufgestellt.

4.1.1 Quellgleichungen für die Energie-Impulsdichten

Die Quellen der Energie-Impulsdichten definieren Kräfte, die auf das entsprechende Untersystem wirken. Für ein abgeschlossenes System von N Teilchen, die nur internen Kräften unterliegen, gilt für die Energie-Impulsdichte ${}^{(S)}T_{\mu\nu}$ folgender Erhaltungssatz:

$$\partial^\mu {}^{(S)}T_{\mu\nu} \equiv 0 . \quad (4.5)$$

Die Energie-Impulsdichte ${}^{(S)}T_{\mu\nu}$ besteht dabei aus einem Materieanteil ${}^{(D)}T_{\mu\nu}$ und der internen Wechselwirkungsichte ${}^{(G)}T_{\mu\nu}$ zwischen den Teilchen

$${}^{(S)}T_{\mu\nu} = {}^{(D)}T_{\mu\nu} + {}^{(G)}T_{\mu\nu} . \quad (4.6)$$

Wirkt auf die N Teilchen allerdings ein externes Feld ${}^{(ex)}\mathcal{F}_{\mu\nu} (\doteq -i {}^{(ex)}F_{\mu\nu} \mathbf{1})$, so erhält man die Gesamtdichte ${}^{(T)}T_{\mu\nu}$ des Zwei-Fermionen-Systems als Summe aus ${}^{(S)}T_{\mu\nu}$ und der externen Wechselwirkungsichte ${}^{(es)}T_{\mu\nu}$:

$${}^{(T)}T_{\mu\nu} = {}^{(S)}T_{\mu\nu} + {}^{(es)}T_{\mu\nu} . \quad (4.7)$$

Für die Energieerhaltung des Gesamtsystems (zwei Fermionen und die externe Quelle) muss außerdem noch die Energie-Impulsdichte ${}^{(ex)}T_{\mu\nu}$ der externen Quelle berücksichtigt werden. Auf diese Weise erhält man wieder ein geschlossenes System. Die Erhaltungsgleichung lautet damit

$$\partial^\mu ({}^{(T)}T_{\mu\nu} + {}^{(ex)}T_{\mu\nu}) = 0 \quad (4.8a)$$

$$\text{bzw. mit (4.7)} \quad \partial^\mu ({}^{(S)}T_{\mu\nu} + {}^{(es)}T_{\mu\nu}) = -\partial^\mu {}^{(ex)}T_{\mu\nu} . \quad (4.8b)$$

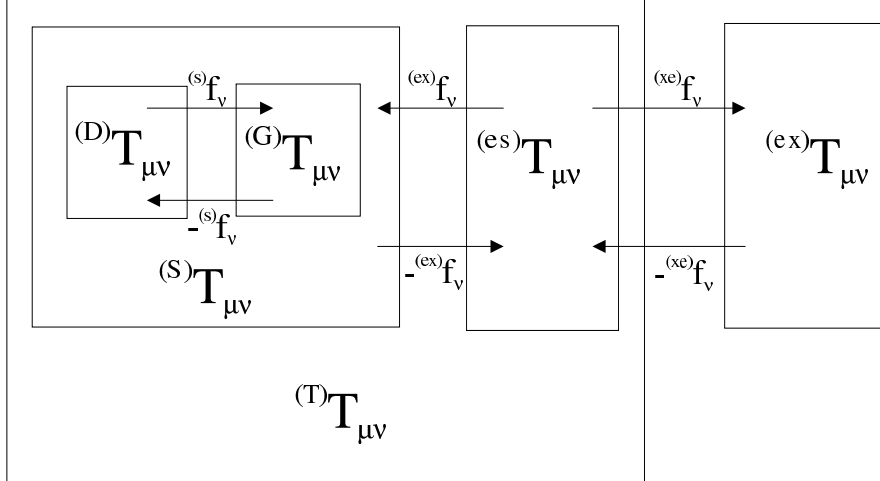


Abbildung 4.1: **Energie-Impulsdichten in der RST**

Das Zwei-Fermionen-System soll auf die externe Quelle (bestimmt durch ihren Viererstrom ${}^{(ex)}j_{\mu}$) über die Lorentz-Kraft ${}^{(xe)}f_{\nu}$ wirken. Dabei wird angenommen, dass die Teilchen als eine Einheit auf die Quelle wirken, und diese damit nur das Gesamtfeld $F_{\mu\nu}$ (3.12) fühlt, aber nicht die *einzelnen* Krümmungskomponenten $F^a{}_{\mu\nu}$ (3.11b) und (3.11c) oder die Austauschfelder $G_{\mu\nu}$ (3.11d) und (3.11e).

$$\partial^\mu {}^{(ex)}T_{\mu\nu} = {}^{(xe)}f_{\nu} \doteq -\hbar c F_{\mu\nu} {}^{(ex)}j^{\mu} . \quad (4.9)$$

Die externe Quelle wirkt dann nach Newton (Actio = Reactio) auf das N -Teilchen-System mit der entgegengesetzten Kraft:

$$\partial^\mu {}^{(T)}T_{\mu\nu} = -{}^{(xe)}f_\nu \doteq \hbar c F_{\mu\nu} {}^{(ex)}j^\mu ; \quad (4.10)$$

mit dieser Annahme ist die Energie-Impulserhaltung (4.8) erfüllt.

Für die Quellgleichung für das Zweiteilchensystem ${}^{(S)}T_{\mu\nu}$ nimmt man an, dass das externe Feld ${}^{(ex)}F_{\mu\nu}$ auf das Zweiteilchensystem *als ganzes* über die Lorentz-Kraft wirkt, d.h der Gesamtstrom j_μ (3.38b) des Zweiteilchensystems bietet einen Ansatzpunkt für das externe Feld ${}^{(ex)}F_{\mu\nu}$

$$\partial^\mu {}^{(S)}T_{\mu\nu} = {}^{(ex)}f_\nu \doteq \hbar c {}^{(ex)}F_{\mu\nu} j^\mu . \quad (4.11)$$

Damit ergibt sich auch die Quellgleichung für die externe Wechselwirkungsichte ${}^{(es)}T_{\mu\nu}$ unter Verwendung von (4.9) und (4.8b):

$$\partial^\mu {}^{(es)}T_{\mu\nu} = \partial^\mu {}^{(T)}T_{\mu\nu} - \partial^\mu {}^{(S)}T_{\mu\nu} = -{}^{(xe)}f_\nu - {}^{(ex)}f_\nu = \hbar c [F_{\mu\nu} {}^{(ex)}j^\mu - {}^{(ex)}F_{\mu\nu} j^\mu] . \quad (4.12)$$

Die interne Energie-Impulsdichte ${}^{(S)}T_{\mu\nu}$ des Zweiteilchensystems besteht nach (4.6) aus der Summe aus kinetischer Energie-Impulsdichte ${}^{(D)}T_{\mu\nu}$ der Teilchen und der Energie des Eichfeldes ${}^{(G)}T_{\mu\nu}$, die von den Eichwechselwirkungen der Teilchen untereinander herrührt: ${}^{(S)}T_{\mu\nu} = {}^{(D)}T_{\mu\nu} + {}^{(G)}T_{\mu\nu}$. Für die Quellgleichung der Materiedichte ${}^{(D)}T_{\mu\nu}$ wird angenommen, dass das Materieteilsystem seine Kraft von den externen und internen Eichfeldern gleichermaßen erhält, d.h man setzt

$$\partial^\mu {}^{(D)}T_{\mu\nu} \doteq f_\nu = {}^{(ex)}f_\nu + {}^{(S)}f_\nu . \quad (4.13)$$

Für die interne Kraftdichte ${}^{(S)}f_\nu$ wird folgende Annahme gemacht in Analogie zur bekannten Lorentz-Form:

$${}^{(S)}f_\nu = \hbar c F^\alpha{}_{\mu\nu} j_\alpha{}^\mu = \hbar c \left\{ F^1{}_{\mu\nu} k_2{}^\mu + F^2{}_{\mu\nu} k_1{}^\mu + G_{\mu\nu} h^\mu + \overset{*}{G}_{\mu\nu} \overset{*}{h}{}^\mu \right\} , \quad (4.14)$$

unter Verwendung der RST-Ströme $j_{\alpha\mu}$, bzw. der Dirac-Ströme $k_{a\mu}$ (3.19) und des Austauschstroms h_μ (3.21).

Aus den Gleichungen (4.13), (4.11) und (4.6) erhält man damit die Quelldichte für die internen Eichfelder ${}^{(G)}T_{\mu\nu}$:

$$\partial^\mu {}^{(G)}T_{\mu\nu} = -{}^{(S)}f_\nu . \quad (4.15)$$

Nachdem nun die Quellgleichungen für alle Teildichten ${}^{(ex)}T_{\mu\nu}$, ${}^{(D)}T_{\mu\nu}$, ${}^{(G)}T_{\mu\nu}$ und ${}^{(es)}T_{\mu\nu}$ bekannt sind

$$\partial^\mu {}^{(ex)}T_{\mu\nu} = {}^{(xe)}f_\nu = -\hbar c F_{\mu\nu} {}^{(ex)}j^\mu \quad (4.16)$$

$$\partial^\mu {}^{(D)}T_{\mu\nu} = {}^{(ex)}f_\nu + {}^{(S)}f_\nu = \hbar c {}^{(ex)}F_{\mu\nu} j^\mu + \hbar c F_{\mu\nu}^\alpha j_\alpha^\mu \quad (4.17)$$

$$\partial^\mu {}^{(G)}T_{\mu\nu} = -{}^{(S)}f_\nu = -\hbar c F_{\mu\nu}^\alpha j_\alpha^\mu \quad (4.18)$$

$$\partial^\mu {}^{(es)}T_{\mu\nu} = -{}^{(xe)}f_\nu - {}^{(ex)}f_\nu = \hbar c F_{\mu\nu} {}^{(ex)}j^\mu - \hbar c {}^{(ex)}F_{\mu\nu} j^\mu, \quad (4.19)$$

können diese in den nächsten Abschnitten nun gelöst und die dazugehörigen Energiefunktionale E_D , E_G und E_{es} ermittelt werden.

4.1.2 Materiedichte ${}^{(D)}T_{\mu\nu}$ und Materieenergie E_D

Die Materiedichte ${}^{(D)}T_{\mu\nu}$ soll wie folgt aus dem kinetischen Energie-Impulsoperator ${}^{(D)}\mathcal{T}_{\mu\nu}$ hervorgehen¹:

$${}^{(D)}T_{\mu\nu} = \text{tr}(\mathcal{I} \cdot {}^{(D)}\mathcal{T}_{\mu\nu}) \quad (4.20a)$$

$${}^{(D)}T_{\mu\nu} = \overline{\Psi} {}^{(D)}\mathcal{T}_{\mu\nu} \Psi \quad (4.20b)$$

für Gemische bzw. reine Zustände. Für den kinetischen Energie-Impulsoperator ${}^{(D)}\mathcal{T}_{\mu\nu}$ wird folgender Ansatz gemacht:

$${}^{(D)}\mathcal{T}_{\mu\nu} = \frac{1}{4} \{ \Gamma_\mu \cdot \mathcal{H}_\nu + \overline{\mathcal{H}}_\nu \cdot \Gamma_\mu + \Gamma_\nu \cdot \mathcal{H}_\mu + \overline{\mathcal{H}}_\mu \cdot \Gamma_\nu \}. \quad (4.21)$$

Man kann unter Verwendung der Integrabilitätsbedingung (2.9) und der Erhaltungsgleichung (2.11b) zeigen, dass die Materiedichte (4.20) mit dem Ansatz (4.21) für den Energie-Impulsoperator eine Lösung der Quellgleichung (4.13) ist. Damit lässt sich auch die Form der Kraftdichte ${}^{(S)}f_\nu$ (4.14) verifizieren. Für einen reinen Zustand lässt sich der Hamilton-Operator \mathcal{H}_μ unter Verwendung der RSG (2.4) ersetzen durch $i\hbar c \mathcal{D}_\mu$. Damit wird die Materiedichte ${}^{(D)}T_{\mu\nu}$ (4.20b) modifiziert zu:

$${}^{(D)}T_{\mu\nu} = \frac{i\hbar c}{4} \{ \overline{\Psi} \Gamma_\mu (\mathcal{D}_\nu \Psi) - (\mathcal{D}_\nu \overline{\Psi}) \Gamma_\mu \Psi + \overline{\Psi} \Gamma_\nu (\mathcal{D}_\mu \Psi) - (\mathcal{D}_\mu \overline{\Psi}) \Gamma_\nu \Psi \}. \quad (4.22)$$

Für die Energiedichte ${}^{(D)}T_{00}$, die ja gleich der 00-Komponente der Materiedichte ${}^{(D)}T_{\mu\nu}$ ist, erhält man damit

$${}^{(D)}T_{00} = \frac{i\hbar c}{2} \{ \overline{\Psi} \Gamma_0 (\mathcal{D}_0 \Psi) - (\mathcal{D}_0 \overline{\Psi}) \Gamma_0 \Psi \}, \quad (4.23)$$

¹Es wird angenommen, dass sich das Konzept der Mittelwertbildung für Observablen aus der Standardtheorie $\langle A \rangle = \text{tr}\{\rho A\}$ (Dichteoperatorformalismus vergl. [21]) analog auf die RST zur Bestimmung der Dichten aus den jeweiligen Operatoren anwenden lässt

wobei sich die kovarianten Zeitableitungen mit Hilfe der Dirac-Gleichung (3.27)

$$i\hbar c\Gamma^0(\mathcal{D}_0\Psi) = Mc^2 - i\hbar c(\Gamma^j\mathcal{D}_j\Psi) \quad (4.24)$$

eliminieren lassen und sich folgende Form für die Energiedichte ${}^{(D)}T_{00}$ ergibt:

$${}^{(D)}T_{00} = Mc^2\bar{\Psi} \cdot \Psi + \frac{i\hbar c}{2} \{(\mathcal{D}_j\bar{\Psi})\Gamma^j\Psi - \bar{\Psi}\Gamma^j(\mathcal{D}_j\Psi)\} . \quad (4.25)$$

Die Materieenergie E_D ist definiert als das Integral über die Energiedichte ${}^{(D)}T_{00}$ (4.4a). Sie wird in Abschnitt (6.5.1) am konkreten Fall stationärer gebundener Zustände noch eingehender untersucht. (Eine nichtrelativistische Näherung für die Materieenergie E_D , die zeigt, dass sich diese im nichtrelativistischen Grenzfall als Summe aus Ruheenergie und kinetischer Energie der beiden Teilchen schreiben lässt, findet sich im Anhang E).

4.1.3 Externe Wechselwirkungsichte ${}^{(es)}T_{\mu\nu}$ und externe Wechselwirkungsenergie E_{es}

Zur Bestimmung von Lösungen der Quellgleichung (4.12) für die externe Wechselwirkungsichte ${}^{(ex)}T_{\mu\nu}$ verwendet man die Annahme, dass die beiden Kraftdichten ${}^{(xe)}f_\mu$ und ${}^{(ex)}f_\nu$ bilineare Konstruktionen von externen und internen Objekten sind, siehe (4.10) und (4.11). Dementsprechend erwartet man eine ähnliche Form der Dichte ${}^{(es)}T_{\mu\nu}$:

$${}^{(es)}T_{\mu\nu} = \frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} \left\{ {}^{(ex)}F_{\mu\lambda}F_\nu^\lambda + F_{\mu\lambda}{}^{(ex)}F_\nu^\lambda - \frac{1}{2}g_{\mu\nu}{}^{(ex)}F_{\lambda\sigma}F^{\lambda\sigma} \right\} , \quad (4.26)$$

wobei man annimmt, dass für die beiden Feldstärken $F_{\mu\nu}$ und ${}^{(ex)}F_{\mu\nu}$ die (abelschen) Maxwell-Gleichungen gelten:

$$\partial^\mu F_{\mu\nu} = -4\pi\alpha_s j_\nu \quad (4.27a)$$

$$\partial^\mu {}^{(ex)}F_{\mu\nu} = 4\pi\alpha_s {}^{(ex)}j_\nu . \quad (4.27b)$$

Das unterschiedliche Vorzeichen rührt daher, dass es sich bei den beiden Systemteilchen um Elektronen und bei der externen Quelle um einen entgegengesetzt geladenen Kern handelt. Somit wird ${}^{(es)}T_{\mu\nu}$ bilinear von der äußeren Feldstärke ${}^{(ex)}F_{\mu\nu}$ und der Gesamtfeldstärke $F_{\mu\nu}$ aufgebaut, wobei letztere ja gleich der Summe der Einzelfeldstärken ist; für ein N -Fermionen-System gilt also:

$$F_{\mu\nu} = \sum_{i=1}^N F_{\mu\nu}^i \quad (4.28)$$

Aus der externen Wechselwirkungs-dichte ${}^{(es)}T_{\mu\nu}$ kann man nun die externe Wechselwirkungsenergie E_{es} durch Integration berechnen, siehe (4.4c). Hierfür ist es hilfreich, die Tensorfelder ${}^{(ex)}F_{\mu\nu}$ und $F_{\mu\nu}$ in ihre elektrischen und magnetischen Anteile aufzuspalten und man setzt wie gewöhnlich:

$$E^j \doteq F_{0j} , \quad (4.29a)$$

$$H^j \doteq \frac{1}{2} \epsilon^{jk} F_k^l . \quad (4.29b)$$

Die Wechselwirkungsenergie-dichte ${}^{(es)}T_{00}$ lässt sich damit folgendermaßen schreiben

$${}^{(es)}T_{00} = \frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} \left\{ \vec{E}_{ex} \cdot \vec{E} + \vec{H}_{ex} \cdot \vec{H} \right\} . \quad (4.30)$$

Sie besteht also aus einem elektrischen und einem magnetischen Anteil. Dies überträgt sich dann natürlich auch auf die externe Wechselwirkungsenergie (4.4c), die somit wie folgt lautet:

$$\begin{aligned} E_{es} = E_{es}^{(e)} + E_{es}^{(m)} &= \frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} \int d^3\vec{r} \left\{ \vec{E}_{ex} \cdot \vec{E} + \vec{H}_{ex} \cdot \vec{H} \right\} \\ (\vec{E} = \{E^j\} \quad ; \quad \vec{H} = \{H^j\}) & . \end{aligned} \quad (4.31)$$

4.1.4 Eichfelddichte ${}^{(G)}T_{\mu\nu}$ und Eichfeldenergie E_G

Die Quellgleichung (4.15) für die Eichfelddichte ${}^{(G)}T_{\mu\nu}$ wird durch folgende Form für ${}^{(G)}T_{\mu\nu}$ gelöst:

$${}^{(G)}T_{\mu\nu} = \frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} \left\{ F^{\alpha}{}_{\mu\lambda} F_{\alpha\nu}{}^{\lambda} - \frac{1}{4} g_{\mu\nu} F^{\alpha}{}_{\sigma\lambda} F_{\alpha}{}^{\sigma\lambda} \right\} . \quad (4.32)$$

Genauer betrachtet ist dabei die Eichfelddichte ${}^{(G)}T_{\mu\nu}$ gleich der Differenz des elektromagnetischen Anteils ${}^{(R)}T_{\mu\nu}$ bezüglich der reellen elektromagnetischen Moden $F^a{}_{\mu\nu}$ und des Austauschanteils ${}^{(C)}T_{\mu\nu}$ bezüglich der Austauschmoden $G_{\mu\nu}$, (vergl. [23]):

$${}^{(G)}T_{\mu\nu} = {}^{(R)}T_{\mu\nu} - {}^{(C)}T_{\mu\nu} \quad (4.33a)$$

$${}^{(R)}T_{\mu\nu} = \frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} K_{ab} \left\{ F^a{}_{\mu\lambda} F^b{}_{\nu}{}^{\lambda} - \frac{1}{4} g_{\mu\nu} F^a{}_{\sigma\lambda} F^{b\sigma\lambda} \right\} \quad (4.33b)$$

$${}^{(C)}T_{\mu\nu} = -\frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} e^{2u} \left\{ G_{\mu\lambda} G_{\nu}{}^{\lambda} + G_{\mu\lambda}^* G_{\nu}{}^{\lambda} - \frac{1}{2} g_{\mu\nu} G_{\sigma\lambda}^* G^{\sigma\lambda} \right\} . \quad (4.33c)$$

Man sieht, dass der Energie-Impulsinhalt ${}^{(C)}T_{\mu\nu}$ der komplexen Feldmoden mit dem umgekehrten Vorzeichen in die Dichte ${}^{(G)}T_{\mu\nu}$ eingeht wie der Beitrag ${}^{(R)}T_{\mu\nu}$ der reellen Moden.

Die Energie-Impulsdichte ${}^{(R)}T_{\mu\nu}$ der elektromagnetischen Feldmoden $F^a_{\mu\nu}$ lässt sich wiederum aufteilen, und zwar in einen direkten Selbstwechselwirkungsanteil ${}^{(R)}\tilde{T}_{\mu\nu}$ verbunden mit den K_{aa} -Komponenten des Kompatibilitätstensors ($a = 1, 2$) und einen wechselseitigen Austauschanteil ${}^{(R)}\hat{T}_{\mu\nu}$ verbunden mit den K_{ab} -Komponenten ($a \neq b$):

$${}^{(R)}T_{\mu\nu} = {}^{(R)}\tilde{T}_{\mu\nu} + {}^{(R)}\hat{T}_{\mu\nu} \quad (4.34a)$$

$${}^{(R)}\tilde{T}_{\mu\nu} = \frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} K_s(u) \left\{ F^1_{\mu\lambda} F^1_{\nu\lambda} + F^2_{\mu\lambda} F^2_{\nu\lambda} - \frac{1}{4} g_{\mu\nu} (F^1_{\sigma\lambda} F^{1\sigma\lambda} + F^2_{\sigma\lambda} F^{2\sigma\lambda}) \right\} \quad (4.34b)$$

$${}^{(R)}\hat{T}_{\mu\nu} = \frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} K_p(u) \left\{ F^1_{\mu\lambda} F^2_{\nu\lambda} + F^2_{\mu\lambda} F^1_{\nu\lambda} - \frac{1}{2} g_{\mu\nu} F^1_{\sigma\lambda} F^{2\sigma\lambda} \right\}, \quad (4.34c)$$

mit der Selbstkopplungskonstanten $K_s(u) = \frac{e^{2u}-1}{2}$ (3.54) und der Paarkopplungskonstanten $K_p = -\frac{e^{2u}+1}{2}$ (3.53). Eine solche Aufteilung der internen Eichfelddichte ${}^{(G)}T_{\mu\nu}$ führt zwangsläufig auch zur äquivalenten Aufspaltung der internen Eichfeldenergie E_G (4.4b)

$$E_G = \tilde{E}_R + \hat{E}_R - E_C \quad (4.35)$$

mit den offensichtlichen Definitionen

$$\tilde{E}_R = \int d^3\vec{r} {}^{(R)}\tilde{T}_{00} \quad (4.36a)$$

$$\hat{E}_R = \int d^3\vec{r} {}^{(R)}\hat{T}_{00} \quad (4.36b)$$

$$E_C = \int d^3\vec{r} {}^{(C)}T_{00}. \quad (4.36c)$$

Um mehr Einsicht in die physikalische Bedeutung der verschiedenen Energiebeiträge zu erhalten, ist es sinnvoll, die elektrischen und magnetischen Feldstärken \vec{E}_a , \vec{H}_a einzuführen durch

$$\vec{E}_a = \{ {}^{(a)}E^j \} \doteq \{ {}^{(a)}F_{0j} \} \quad (4.37a)$$

$$\vec{H}_a = \{ {}^{(a)}H^j \} \doteq \left\{ \frac{1}{2} \epsilon^{jk}_l {}^{(a)}F_k{}^l \right\} \quad (4.37b)$$

und genauso für die Austauschfelder \vec{X} und \vec{Y} :

$$\vec{X} = \{ X^j \} \doteq \{ G_{0j} \} \quad (4.38a)$$

$$\vec{Y} = \{ Y^j \} \doteq \left\{ \frac{1}{2} \epsilon^{jk}_l G_k{}^l \right\}. \quad (4.38b)$$

Diese Aufspaltung von magnetischen und elektrischen Feldern erlaubt dieselbe Aufspaltung der verschiedenen Energiebeiträge

$$\begin{aligned} \tilde{E}_R = \tilde{E}_R^{(e)} + \tilde{E}_R^{(m)} = & -\frac{\hbar c}{8\pi\alpha_s} K_s(u) \int d^3\vec{r} \left\{ \left(\vec{E}_1 \right)^2 + \left(\vec{E}_2 \right)^2 \right\} \\ & -\frac{\hbar c}{8\pi\alpha_s} K_s(u) \int d^3\vec{r} \left\{ \left(\vec{H}_1 \right)^2 + \left(\vec{H}_2 \right)^2 \right\} \end{aligned} \quad (4.39a)$$

$$\begin{aligned} \hat{E}_R = \hat{E}_R^{(e)} + \hat{E}_R^{(m)} = & -\frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} K_p(u) \int d^3\vec{r} \vec{E}_1 \cdot \vec{E}_2 \\ & -\frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} K_p(u) \int d^3\vec{r} \vec{H}_1 \cdot \vec{H}_2 \end{aligned} \quad (4.39b)$$

$$E_C = E_C^{(e)} + E_C^{(m)} = \frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} e^{2u} \int d^3\vec{r} \vec{X}^* \cdot \vec{X} + \frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} e^{2u} \int d^3\vec{r} \vec{Y}^* \cdot \vec{Y}. \quad (4.39c)$$

Der erste Teil \tilde{E}_R ist die Selbstenergie der beiden Teilchen, der zweite Teil \hat{E}_R ist die wechselseitige Austauschenergie, und der dritte Teil E_C ist die Austauschenergie. Die Gleichung (4.39c) zeigt, dass auch die Austauschenergie E_C direkt vom Selbstwechselwirkungsparameter u abhängt.

4.2 Energie-Impulsdichten unter Verwendung des Noether-Theorems

Nachdem die Energie-Impulsdichten aus dynamischen Überlegungen hergeleitet wurden, soll nun eine Herleitung aus der Lagrange-Dichte des Systems unter Verwendung des Noether-Theorems gezeigt werden. Ein Vergleich der Energie-Impulsdichten wird dann zeigen, dass das Noether-Theorem eine gewisse Modifikation der externen Wechselwirkungsenergie ${}^{(es)}T_{\mu\nu}$ (4.26) nahelegt, die aufgrund von intuitiven dynamischen Argumenten konstruiert wurde.

4.2.1 Wirkungsprinzip und Lagrange-Dichte

Die logische Konsistenz der RST-Dynamik wird unterstützt durch die Tatsache, dass sie aus einem Wirkungsprinzip hergeleitet werden kann

$$\delta W_{RST} = 0 \quad (4.40)$$

und somit die RST-Erhaltungssätze aus dem entsprechenden Noether-Theorem folgen. Das Wirkungsintegral W_{RST} lautet mit dem Lagrangian L_{RST} wie gewohnt

$$W_{RST} = \int d^4x L_{RST}[\psi_a, A^a_\mu, A_\mu; B_\mu, {}^{(ex)}A_\mu]. \quad (4.41)$$

Der Lagrangian ist dabei eine Funktion der unabhängigen Felder ψ_a , A^a_μ , B_μ sowie des Gesamtpotentials A_μ (3.13) und des externen Potentials ${}^{(ex)}A_\mu$ (2.19a), das vom externen Gesamtstrom ${}^{(ex)}j_\mu$ generiert wird. ${}^{(ex)}j_\mu$ wird von außen festgelegt, bestimmt aber das externe Potential ${}^{(ex)}A_\mu$ durch die externen Maxwell-Gleichungen (4.27b). Die Unterteilung des Maxwell-RST-Systems in Materie- und Eichsysteme spiegelt auch der Lagrangian L_{RST} wider, der aus der Summe von Einzelbeiträgen besteht, nämlich des Materieanteils L_D , des Eichfeldanteils L_G und des Anteils der externen Wechselwirkung L_{ex} :

$$L_{RST} = L_D + L_G + L_{ex}. \quad (4.42)$$

Da die Eichwechselwirkungen, die durch den Anteil L_G beschrieben werden, sowohl die internen Kräfte zwischen den Teilchen, als auch die Kräfte durch die externe Quelle ${}^{(ex)}j_\mu$ auf die Teilchen beschreiben, spaltet sich der Eichanteil L_G auf in einen internen Anteil L_S und den externen Wechselwirkungsanteil L_{es} :

$$L_G = L_S + L_{es}. \quad (4.43)$$

Die verschiedenen Anteile des Lagrangian L_D , L_S , L_{es} , L_{ex} sehen folgendermaßen aus [23]:

$$L_D = \frac{i\hbar c}{2} [\bar{\Psi}\Gamma^\mu (\mathcal{D}_\mu\Psi) - (\mathcal{D}_\mu\bar{\Psi})\Gamma^\mu\Psi] - Mc^2\bar{\Psi}\Psi \quad (4.44a)$$

$$L_S = \frac{\hbar c}{16\pi\alpha_s} K_{\alpha\beta} F^\alpha{}_{\mu\nu} F^{\beta\mu\nu} \equiv \frac{\hbar c}{16\pi\alpha_s} F^\alpha{}_{\mu\nu} F_\alpha{}^{\mu\nu} \quad (4.44b)$$

$$L_{es} = -\frac{\hbar c}{8\pi\alpha_s} F_{\mu\nu} {}^{(ex)}F^{\mu\nu} \quad (4.44c)$$

$$L_{ex} = -\hbar c A^\mu {}^{(ex)}j_\mu. \quad (4.44d)$$

Es zeigt sich auch hier wieder, dass das Zwei-Fermionen-System als ganzes mit der externen Quelle wechselwirkt: die beiden externen Wechselwirkungsanteile L_{es} und L_{ex} sind bilineare Konstruktionen der *externen* Objekte $\{ {}^{(ex)}j_\mu, {}^{(ex)}F_{\mu\nu} \}$ (3.34a) und (3.11a) und der Gesamtobjekte $\{ A_\mu, F_{\mu\nu} \}$, die additiv aus den Einzelteilchenbeiträgen zusammengesetzt sind, siehe (3.12)-(3.14).

Mit Hilfe des Lagrangian lassen sich nun die RST-Feldgleichungen aus dem Hamiltonschen Wirkungsprinzip (4.40) als die zugehörigen Euler-Lagrange-Gleichungen herleiten:

1. Die Dirac-Gleichung (3.27), bzw. ihre Komponentenform (3.33), erhält man durch die Extremalisierung des Wirkungsintegrals W_{RST} (4.41) in Bezug auf die Wellenfunktion $\Psi = \{\psi_a, a = 1, 2\}$
2. Auf dieselbe Weise erhält man die internen Maxwell-Gleichungen (2.23) als die Euler-Lagrange-Gleichungen durch Extremalisierung von W_{RST} in Bezug auf das interne Eichpotential $\{A^\alpha{}_\mu\} = \{A^a{}_\mu; B_\mu\}$.
3. Die Gesamt-Maxwell-Gleichungen (4.27a) erhält man als Variationsgleichungen durch die Extremalisierung in Bezug auf das externe Potential ${}^{(ex)}A_\mu$.
4. Die externen Maxwell-Gleichungen (4.27b) erhält man durch Variation in Bezug auf das Gesamtpotential A_μ .

4.2.2 Das Noether-Theorem

Ist man im Besitz eines Lagrange-Formalismus für ein dynamisches System, so lassen sich daraus mit Hilfe des Noether-Theorems die zugehörigen Erhaltungssätze ableiten. Im Fall der RST muss man zwischen internen und externen Erhaltungssätzen unterscheiden, die sich aufgrund der internen und externen Symmetrien des Wirkungsintegrals ergeben. Die internen Symmetrien führen zu einer Ladungserhaltung der Form (2.26) (vergl. [23]). Von den externen Erhaltungssätzen sollen nun besonderes diejenigen für die Energie-Impulsdichte betrachtet werden, denn die Gesamtenergie E_T (4.3) ist die entscheidende Größe, um die RST-Vorhersagen mit den experimentellen Daten der Atomphysik vergleichen zu können.

Die allgemeine Definition des ursprünglichen Noether-Theorems für die Energie-Impulsdichte lautet:

$${}^{(N)}\tilde{T}^\mu{}_\nu = \sum_k \frac{\partial L_{RST}}{\partial (\partial_\mu \phi_k)} \cdot \partial_\nu \phi_k - g^\mu{}_\nu L_{RST} . \quad (4.45)$$

Allerdings ist es bekannt, dass bei der Erstellung der Energie-Impulsdichte eines Feldsystems einige notorische Probleme auftreten, vor allem in Bezug auf die Eichinvarianz und Symmetrie ($T_{\mu\nu} = T_{\nu\mu}$). Deshalb wurden einige Standardmethoden in der Literatur entwickelt, um diese Probleme zu umgehen (z.B. die Belinfante-Rosenfeld-Methode [13]), sodass die früher abgeleiteten Energie-Impulsdichten ${}^{(G)}T_{\mu\nu}$ (4.32) und ${}^{(D)}T_{\mu\nu}$ (4.22) durch den Noether-Formalismus (4.45) bestätigt werden. Der Formalismus legt jedoch eine geringfügige Änderung der externen Wechselwirkungsichte ${}^{(es)}T_{\mu\nu}$ nahe, die dann auch physikalisch begründet wird. Die Teildichten

$(G)T_{\mu\nu}$ und $(D)T_{\mu\nu}$ erhält man aus der allgemeinen Noether-Vorschrift (4.45) indem man die entsprechenden Untermengen der Variablen $\{A^\alpha_\mu\}$ und $\{\psi_a\}$ für die allgemeinen RST-Felder $\{\phi_k\}$ einsetzt. In gleicher Weise sollte man die verbleibende Dichte $(es)T_{\mu\nu}$ erhalten, indem man für die allgemeinen Feldvariablen $\{\phi_k\}$ das Gesamtpotential A_μ und das externe Potential $(ex)A_\mu$ einsetzt, d.h. man setzt

$${}^{(sx)}T_{\mu\nu} = \sum_\lambda \left\{ \frac{\partial L_{sx}}{\partial (\partial_\mu A_\lambda)} \cdot (\partial_\nu A_\lambda) + \frac{\partial L_{sx}}{\partial (\partial_\mu (ex)A_\lambda)} \cdot (\partial_\nu (ex)A_\lambda) \right\} - g^\mu{}_\nu L_{sx} , \quad (4.46)$$

wobei L_{sx} genau der Teil des RST-Lagrangians (4.42) ist, der die Potentiale A_μ und $(ex)A_\mu$ und ihre Ableitungen enthält:

$$L_{sx} \doteq L_{es} + L_{ex} . \quad (4.47)$$

Der Unterschied zwischen dem aus dem externen Noether-Tensor resultierenden Tensor $(sx)T_{\mu\nu}$ für die externe Wechselwirkungsichte und dem bisherigen Vorschlag $(es)T_{\mu\nu}$ (4.26) hat folgende Gestalt:

$$\begin{aligned} {}^{(sx)}T_{\mu\nu} &= {}^{(es)}T_{\mu\nu} - \frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} \partial^\lambda \left\{ (ex)A_\nu F_{\mu\lambda} + A_\nu (ex)F_{\mu\lambda} \right\} + \hbar c (ex)A_\nu j_\mu \\ &\quad - \hbar c \left[A_\nu (ex)j_\mu - g_{\mu\nu} A^\lambda (ex)j_\lambda \right] . \end{aligned} \quad (4.48)$$

Der erste Term auf der rechten Seite von (4.48) ist dabei genau der vorherige Vorschlag für die externe Wechselwirkungsichte $(es)T_{\mu\nu}$ (4.26), der zweite Term kann vernachlässigt werden, da er eine verschwindende Divergenz hat und deshalb nichts zur Quellgleichung für $(es)T_{\mu\nu}$ beiträgt, aus der $(es)T_{\mu\nu}$ bestimmt wird (siehe auch [23]). Der dritte Term, der das externe Potential $(ex)A_\mu$ enthält, hebt sich gegen einen entsprechenden Beitrag der Materiedichte $(D)\tilde{T}_{\mu\nu}$ weg, was notwendig ist, um die Eichinvarianz der daraus hervorgehenden Materiedichte $(D)T_{\mu\nu}$ (4.20) zu gewährleisten. Als Abweichung von $(sx)T_{\mu\nu}$ zu $(es)T_{\mu\nu}$ bleibt somit nur der letzte Term $(ms)T_{\mu\nu}$

$${}^{(ms)}T_{\mu\nu} \doteq -\hbar c \left[A_\nu (ex)j_\mu - g_{\mu\nu} A^\lambda (ex)j_\lambda \right] . \quad (4.49)$$

Damit erhält man als endgültige Form für die externe Wechselwirkungsichte $(sx)T_{\mu\nu}$:

$${}^{(sx)}T_{\mu\nu} \doteq {}^{(es)}T_{\mu\nu} + {}^{(ms)}T_{\mu\nu} . \quad (4.50)$$

Da die externe Wechselwirkungsichte $(sx)T_{\mu\nu}$ gleich der Summe zweier Beiträge ist, gilt dies auch für die entsprechende Energie E_{sx}

$$E_{sx} = E_{es} + E_{ms} , \quad (4.51)$$

wobei der erste Teil E_{es} schon durch Gleichung (4.31) festgelegt wurde

$$E_{es} = \frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} \int d^3\vec{r} \left\{ \vec{E}_{ex} \cdot \vec{E} + \vec{H}_{ex} \cdot \vec{H} \right\} \doteq E_{es}^{(e)} + E_{es}^{(m)} .$$

Der zweite Teil E_{ms} ist wie gewohnt definiert als

$$E_{ms} = \int d^3\vec{r} {}^{(ms)}T_{00} . \quad (4.52)$$

Dabei ergibt sich ${}^{(ms)}T_{00}$ aus ${}^{(ms)}T_{\mu\nu}$ (4.49) zu

$${}^{(ms)}T_{00} = -\hbar c \vec{A} \cdot \vec{j}_{ex} . \quad (4.53)$$

Im Gegensatz zur Energie E_{es} , die sich offensichtlich in einen elektrischen Teil $E_{es}^{(e)}$ und einen magnetischen Teil $E_{es}^{(m)}$ aufspalten lässt, ist der zweite Energieanteil E_{ms} rein magnetischer Natur

$$E_{ms} = -\hbar c \int d^3\vec{r} \vec{A} \cdot \vec{j}_{ex} . \quad (4.54)$$

Damit ergibt sich für die externe Wechselwirkungsenergie E_{sx} folgende Form:

$$E_{sx} = E_{es}^{(e)} + E_{es}^{(m)} + E_{ms} = \frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} \int d^3\vec{r} \left\{ \vec{E}_{ex} \cdot \vec{E} + \vec{H}_{ex} \cdot \vec{H} \right\} - \hbar c \int d^3\vec{r} \vec{A} \cdot \vec{j}_{ex} . \quad (4.55)$$

Legitimiert wird diese Änderung nicht nur durch den zugrundeliegenden Noether-Formalismus, sondern auch durch physikalische Argumente, die im folgenden in Verbindung mit dem Energieeigenwertproblem für stationäre gebundene Zustände erläutert werden. Es soll an dieser Stelle lediglich erwähnt werden, dass der Zusatz ${}^{(ms)}T_{\mu\nu}$ (4.49) zur ursprünglichen Gesamtdichte (4.2) weder symmetrisch noch eichinvariant ist. Dies muss dem Umstand zugeschrieben werden, dass es sich hier um ein nichtgeschlossenes System handelt (${}^{(ex)}j_\mu \neq 0$). Für geschlossene Systeme (${}^{(ex)}j_\mu = 0$), dem eigentlichen Anwendungsbereich des Noether-Theorems, kann ein solcher Mangel für die Dichte $T_{\mu\nu}$ vermieden werden.

4.3 Das Gesamtenergiefunktional E_{TX}

Natürlich hat diese Änderung der externen Dichte ${}^{(es)}T_{\mu\nu} \Rightarrow {}^{(sx)}T_{\mu\nu}$ auch Auswirkungen auf das Gesamtenergiefunktional E_T (4.3), das nun zum endgültigen Gesamtenergiefunktional E_{TX} modifiziert wird:

$$\begin{aligned} E_T \Rightarrow E_{TX} &= E_D + E_G + E_{sx} \\ &= E_D + \tilde{E}_R + \hat{E}_R - E_C + E_{es}^{(e)} + E_{es}^{(m)} + E_{ms} . \end{aligned} \quad (4.56)$$

4.4 Tabellarischer Überblick über die Energien und Energie-Impulsdichten in der RST

Zum Abschluss der Diskussion über Energien zeigt Tabelle 4.1 einen kurzen Überblick über alle Energieanteile am Gesamtenergiefunktional E_{TX}

E_{TX}	Gesamtenergiefunktional	$E_{TX} = E_D + E_G + E_{sx}$
E_D	Materieenergie	$E_D \doteq \int d^3\vec{r}^{(D)} T_{00}$ $= \hbar c \frac{i}{2} \int d^3\vec{r} \{ \bar{\Psi} \Gamma_0 (\mathcal{D}_0 \Psi) - (\mathcal{D}_0 \bar{\Psi}) \Gamma_0 \Psi \}$
E_G	Eichfeldenergie	$E_G \doteq \int d^3\vec{r}^{(G)} T_{00} = E_R - E_C$
E_R	elektromagnetischer Anteil der Eichfeldenergie	$E_R \doteq \int d^3\vec{r}^{(R)} T_{00} = \tilde{E}_R + \hat{E}_R$
\tilde{E}_R	Selbstwechselwirkungsanteil des elektromagnetischen Anteils der Eichfeldenergie	$\tilde{E}_R = \tilde{E}_R^{(e)} + \tilde{E}_R^{(m)}$ $= -\frac{\hbar c}{8\pi\alpha_s} K_s(u) \int d^3\vec{r} \left\{ (\vec{E}_1)^2 + (\vec{E}_2)^2 \right\}$ $- \frac{\hbar c}{8\pi\alpha_s} K_s(u) \int d^3\vec{r} \left\{ (\vec{H}_1)^2 + (\vec{H}_2)^2 \right\}$
\hat{E}_R	wechselseitiger Anteil des elektromagnetischen Anteils der Eichfeldenergie	$\hat{E}_R = \hat{E}_R^{(e)} + \hat{E}_R^{(m)}$ $= -\frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} K_p(u) \int d^3\vec{r} \left\{ \vec{E}_1 \cdot \vec{E}_2 + \vec{H}_1 \cdot \vec{H}_2 \right\}$
E_C	Austauschanteil der Eichfeldenergie	$E_C \doteq \int d^3\vec{r}^{(C)} T_{00} = E_C^{(e)} + E_C^{(m)}$ $= \frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} e^{2u} \int d^3\vec{r} \left\{ \vec{X} \cdot \vec{X} + \vec{Y} \cdot \vec{Y} \right\}$
E_{sx}	externe Wechselwirkungsenergie	$E_{sx} \doteq \int d^3\vec{r}^{(sx)} T_{00} = E_{es} + E_{ms}$
E_{es}	externe Wechselwirkungsenergie ohne den aus dem Noether-Theorem folgenden magnetischen Zusatzterm E_{ms}	$E_{es} = E_{es}^{(e)} + E_{es}^{(m)}$ $= \frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} \int d^3\vec{r} \left\{ \vec{E}_{ex} \cdot \vec{E} + \vec{H}_{ex} \cdot \vec{H} \right\}$
E_{ms}	aus dem Noether-Theorem folgender magnetischer Zusatzterm zur externen Wechselwirkungsenergie E_{es}	$E_{ms} = -\hbar c \int d^3\vec{r} \vec{A} \cdot \vec{j}_{ex}$

Tabelle 4.1: Zusammenfassung der Energiefunktionale in der RST

Kapitel 5

Relativistisches Energieeigenwertproblem und nichtrelativistische Näherung

Im folgenden Kapitel soll gezeigt werden, wie der nichtrelativistische Grenzfall der RST in den bekannten Hartree-Fock-Ansatz übergeht. Hierfür werden die Gleichungen des Zwei-Fermionen-Systems der RST auf den Fall gebundener Zustände spezialisiert; man untersucht also ein heliumähnliches System, in dem sich die beiden Elektronen in stationären Zuständen im Coulomb-Feld eines Z -fach geladenen Kerns bewegen.

Dies ist ein erster Schritt hin zur Verifizierung der RST-Voraussagen durch das Experiment - man kann nämlich erwarten, dass die Energieniveaus der RST mindestens genauso gut wie die Hartree-Fock-Ergebnisse sind, wenn bereits die nichtrelativistische Näherung der RST mit dem Hartree-Fock-Ansatz übereinstimmt.

5.1 Stationäre Zustände

Stationäre gebundene Zustände sind nicht komplett zeitunabhängig; nur die messbaren Größen der Theorie (z.B. Ladungsdichte, Stromdichte und Energiedichte) sind zeitunabhängig. Nicht messbare Größen besitzen aber zumeist eine sehr einfache oszillatorische Form der Zeitabhängigkeit

Für die Untersuchung von heliumähnlichen Zuständen betrachtet man zunächst

das Coulomb-Potential ${}^{(ex)}A_\mu$ eines punktförmigen Kerns mit Kernladungszahl z_{ex}

$${}^{(ex)}A_\mu = \{ {}^{(ex)}A_0(\vec{r}); \mathbf{0} \} = A_{ex}(\vec{r})\hat{t}_\mu \quad (5.1a)$$

$${}^{(ex)}A_0(\vec{r}) = z_{ex} \frac{\alpha_s}{r} . \quad (5.1b)$$

Damit ergibt sich aus den externen Maxwell-Gleichungen (2.22), dass der entsprechende Strom ${}^{(ex)}j_\mu$ ebenfalls in die Zeitrichtung $\hat{t}_\mu (= \partial_\mu t)$ zeigt

$${}^{(ex)}j_\mu = j_{ex}(\vec{r})\hat{t}_\mu \quad (5.2a)$$

$$j_{ex}(\vec{r}) = z_{ex}\delta^3(\vec{r}) . \quad (5.2b)$$

Wählt man nun für die Wellenfunktionen des zu untersuchenden Zweiteilchensystems folgende Zeitabhängigkeit:

$$\psi_1(\vec{r}, t) = \exp\left[-i\frac{M_1 c^2}{\hbar}t\right] \cdot \psi_1(\vec{r}) \quad (5.3a)$$

$$\psi_2(\vec{r}, t) = \exp\left[-i\frac{M_2 c^2}{\hbar}t\right] \cdot \psi_2(\vec{r}) , \quad (5.3b)$$

wobei die M_a ($a = 1, 2$) die *Masseneigenwerte* sind, so ergibt sich eine zeitunabhängige Form der Dirac-Ströme $k_{a\mu}$ ($a = 1, 2$) aufgrund ihrer Definition (3.19) ($k_{a\mu} = \overline{\psi}_a \gamma_\mu \psi_a$) und auch der Maxwell-Ströme $j^a{}_\mu$, die ja über den Kompatibilitätstensor mit den Dirac-Strömen verknüpft sind, vergl. (3.49a) und (3.49b)

$$\{k_{a\mu}\} \Rightarrow \left\{ {}^{(a)}k_0(\vec{r}); -\vec{k}_a(\vec{r}) \right\} \quad (5.4a)$$

$$\{j^a{}_\mu\} \Rightarrow \left\{ {}^{(a)}j_0(\vec{r}); -\vec{j}_a(\vec{r}) \right\} . \quad (5.4b)$$

Daraus folgt dann die Zeitunabhängigkeit der elektromagnetischen Potentiale $A^a{}_\mu$, die von den Maxwell-Strömen $j^a{}_\mu$ gemäß den internen Maxwell-Gleichungen (2.23) erzeugt werden:

$$\{A^a{}_\mu\} \Rightarrow \left\{ {}^{(a)}A_0(\vec{r}); -\vec{A}_a(\vec{r}) \right\} , \quad (5.5)$$

und entsprechend gilt für die Feldstärken \vec{E}_a und \vec{H}_a (4.37)

$$\vec{E}_a \Rightarrow \vec{E}_a(\vec{r}) \quad (5.6a)$$

$$\vec{H}_a \Rightarrow \vec{H}_a(\vec{r}) . \quad (5.6b)$$

Gleichzeitig erhält man aus der Zeitabhängigkeit (5.3) der Wellenfunktionen die zeitunabhängige Form der Austauschströme h_μ (3.21), da diese aus *beiden* Dirac-Spinoren ψ_a ($a = 1, 2$) gebildet werden ($h_\mu = \overline{\psi}_1 \gamma_\mu \psi_2$). Diese Zeitabhängigkeit überträgt sich

dann über die Beziehung zwischen Maxwell- und RST-Strömen (3.49c) und (3.49d) auch auf die Maxwell-Ströme j^3_μ und j^4_μ ; man erhält damit:

$$h_\mu(\vec{r}, t) = \exp\left[i\frac{M_1 - M_2}{\hbar}c^2t\right] \cdot h_\mu(\vec{r}) \quad (5.7a)$$

$$h^*_\mu(\vec{r}, t) = \exp\left[-i\frac{M_1 - M_2}{\hbar}c^2t\right] \cdot h^*_\mu(\vec{r}) \quad (5.7b)$$

$$j^3_\mu(\vec{r}, t) = \exp\left[-i\frac{M_1 - M_2}{\hbar}c^2t\right] \cdot j^3_\mu(\vec{r}) \quad (5.7c)$$

$$j^4_\mu(\vec{r}, t) = \exp\left[i\frac{M_1 - M_2}{\hbar}c^2t\right] \cdot j^4_\mu(\vec{r}) . \quad (5.7d)$$

Im Gegensatz zu den elektromagnetischen Potentialen A^a_μ können die Austauschpotentiale B_μ und B^*_μ also nicht zeitunabhängig sein, da sie durch die Maxwell-Gleichungen (2.23) an die Maxwell-Ströme j^3_μ und j^4_μ (5.7) gekoppelt sind, sondern sie müssen dieselbe Zeitabhängigkeit wie die Maxwell-Ströme besitzen:

$$B_\mu(\vec{r}, t) = \exp\left[-i\frac{M_1 - M_2}{\hbar}c^2t\right] \cdot B_\mu(\vec{r}) \quad (5.8a)$$

$$B^*_\mu(\vec{r}, t) = \exp\left[i\frac{M_1 - M_2}{\hbar}c^2t\right] \cdot B^*_\mu(\vec{r}) . \quad (5.8b)$$

Die Austauschfeldstärken $G_{\mu\nu}$ bzw. $G^*_{\mu\nu}$ erhalten ihre Zeitabhängigkeit von den Austauschpotentialen B_μ bzw. B^*_μ nach (3.11d) bzw. (3.11e),

$$G_{\mu\nu}(\vec{r}, t) = \exp\left[-i\frac{M_1 - M_2}{\hbar}c^2t\right] \cdot G_{\mu\nu}(\vec{r}) \quad (5.9a)$$

$$G^*_{\mu\nu}(\vec{r}, t) = \exp\left[i\frac{M_1 - M_2}{\hbar}c^2t\right] \cdot G^*_{\mu\nu}(\vec{r}) , \quad (5.9b)$$

und entsprechend gilt für die Austauschfelder X_μ und Y_μ (4.38):

$$X_\mu(\vec{r}, t) = \exp\left[-i\frac{M_1 - M_2}{\hbar}c^2t\right] \cdot X_\mu(\vec{r}) \quad (5.10a)$$

$$Y_\mu(\vec{r}, t) = \exp\left[-i\frac{M_1 - M_2}{\hbar}c^2t\right] \cdot Y_\mu(\vec{r}) . \quad (5.10b)$$

Damit ergibt sich eine Zeitunabhängigkeit der reellen elektromagnetischen Größen und eine Zeitabhängigkeit der komplexen Austauschgrößen.

5.2 Relativistisches Eigenwertproblem

Setzt man in die Zweiteilchen-Dirac-Gleichung (3.33) die stationäre Form der Wellenfunktionen (5.3), sowie der Potentiale A^a_μ (5.5), B_μ (5.8) und des externen

Coulomb-Potentials ${}^{(ex)}A_\mu$ (5.1) ein, so erhält man als relativistisches Eigenwertproblem zur Bestimmung der Masseeigenwerte M_a das folgende gekoppelte System für den räumlichen Anteil $\psi_a(\vec{r})$ der Wellenfunktionen:

$$i\gamma^j \mathbb{D}_j \psi_1(\vec{r}) + [{}^{(ex)}A_0(\vec{r}) + {}^{(2)}A_0(\vec{r})] \gamma_0 \psi_1(\vec{r}) + B_0(\vec{r}) \gamma_0 \psi_2 = \frac{M - M_1 \gamma_0}{\hbar} c \psi_1(\vec{r}) \quad (5.11a)$$

$$i\gamma^j \mathbb{D}_j \psi_2(\vec{r}) + [{}^{(ex)}A_0(\vec{r}) + {}^{(1)}A_0(\vec{r})] \gamma_0 \psi_2(\vec{r}) + \overset{*}{B}_0(\vec{r}) \gamma_0 \psi_1 = \frac{M - M_2 \gamma_0}{\hbar} c \psi_2(\vec{r}) . \quad (5.11b)$$

Das explizite Auftreten der Masseeigenwerte M_a entsteht durch die Zeitableitungen \mathbb{D}_0 (vergl. (3.32)) der Wellenfunktionen

$$\mathbb{D}_0 \psi_1(\vec{r}) \doteq \partial_0 \psi_1(\vec{r}) - i ({}^{(ex)}A_0(\vec{r}) + {}^{(2)}A_0(\vec{r})) \psi_1(\vec{r}) - i B_0(\vec{r}) \psi_2(\vec{r}) \quad (5.12a)$$

$$\mathbb{D}_0 \psi_2(\vec{r}) \doteq \partial_0 \psi_2(\vec{r}) - i ({}^{(ex)}A_0(\vec{r}) + {}^{(1)}A_0(\vec{r})) \psi_2(\vec{r}) - i \overset{*}{B}_0(\vec{r}) \psi_1(\vec{r}) ; \quad (5.12b)$$

die verbleibenden räumlichen Ableitungen \mathbb{D} sind wie folgt definiert:

$$\mathbb{D}_j \psi_1(\vec{r}) \doteq \partial_j \psi_1(\vec{r}) - i {}^{(2)}A_j(\vec{r}) \psi_1(\vec{r}) - i B_j(\vec{r}) \psi_2(\vec{r}) \quad (5.13a)$$

$$\mathbb{D}_j \psi_2(\vec{r}) \doteq \partial_j \psi_2(\vec{r}) - i {}^{(1)}A_j(\vec{r}) \psi_2(\vec{r}) - i \overset{*}{B}_j(\vec{r}) \psi_1(\vec{r}) . \quad (5.13b)$$

Zur Durchführung von konkreten Berechnungen ist es jedoch einfacher, die (vierkomponentigen) Dirac-Spinoren $\psi_a(\vec{r})$ ($a = 1, 2$) durch jeweils zwei Pauli-Spinoren ${}^{(a)}\phi_\pm(\vec{r})$ zu ersetzen:

$$\psi_a(\vec{r}) = \begin{pmatrix} {}^{(a)}\phi_+(\vec{r}) \\ {}^{(a)}\phi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} . \quad (5.14)$$

Damit lautet das vierkomponentige Dirac-System (5.11) in seiner zweikomponentigen Pauli-Form:

$$\begin{aligned} -i\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} {}^{(1)}\phi_\pm(\vec{r}) + [\vec{A}_{ex}(\vec{r}) + \vec{A}_2(\vec{r})] \cdot \vec{\sigma} {}^{(1)}\phi_\pm(\vec{r}) - [{}^{(ex)}A_0(\vec{r}) + {}^{(2)}A_0(\vec{r})] {}^{(1)}\phi_\mp(\vec{r}) \\ + \vec{B}(\vec{r}) \cdot \vec{\sigma} {}^{(2)}\phi_\pm(\vec{r}) - B_0(\vec{r}) {}^{(2)}\phi_\mp(\vec{r}) = \frac{M_1 \pm M}{\hbar} c {}^{(1)}\phi_\mp(\vec{r}) \end{aligned} \quad (5.15a)$$

$$\begin{aligned} -i\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} {}^{(2)}\phi_\pm(\vec{r}) + [\vec{A}_{ex}(\vec{r}) + \vec{A}_1(\vec{r})] \cdot \vec{\sigma} {}^{(2)}\phi_\pm(\vec{r}) - [{}^{(ex)}A_0(\vec{r}) + {}^{(1)}A_0(\vec{r})] {}^{(2)}\phi_\mp(\vec{r}) \\ + \overset{*}{\vec{B}}(\vec{r}) \cdot \vec{\sigma} {}^{(1)}\phi_\pm(\vec{r}) - \overset{*}{B}_0(\vec{r}) {}^{(1)}\phi_\mp(\vec{r}) = \frac{M_2 \pm M}{\hbar} c {}^{(2)}\phi_\mp(\vec{r}) . \end{aligned} \quad (5.15b)$$

Dieses System von Eigenwertgleichungen stellt die Basis für die Berechnung der Masseeigenwerte dar.

5.2.1 Poisson-Gleichungen

Um das Gleichungssystem zu schließen, sollen im Folgenden noch die Poisson-Gleichungen für den stationären Zustand hergeleitet werden. Um die Maxwell-Gleichungen mit Hilfe der Potentiale A^a_μ und B_μ auszudrücken, ist es hilfreich, zunächst die allgemeinen Eichfeldgleichungen für den stationären Fall (Abschnitt 3.3.2) in Dreiervektorschreibweise darzustellen. Die beiden ersten Gleichungen des RST-Maxwell-Systems (3.36a) und (3.36b) führen dann auf folgende Quellgleichungen für die elektrischen Felder \vec{E}_a (4.37a):

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E}_1(\vec{r}) + i \left[\vec{B}(\vec{r}) \cdot \vec{X}(\vec{r}) - \vec{B}(\vec{r}) \cdot \vec{X}(\vec{r}) \right] = -4\pi\alpha_s {}^{(1)}k_0(\vec{r}) \quad (5.16a)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E}_2(\vec{r}) - i \left[\vec{B}(\vec{r}) \cdot \vec{X}(\vec{r}) - \vec{B}(\vec{r}) \cdot \vec{X}(\vec{r}) \right] = -4\pi\alpha_s {}^{(2)}k_0(\vec{r}) , \quad (5.16b)$$

und ebenso auf folgende Wirbelgleichungen für die magnetischen Felder $\vec{H}_a(\vec{r})$ (4.37b)

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \times \vec{H}_1(\vec{r}) + i \left[B_0 \cdot \vec{X}(\vec{r}) - B_0(\vec{r}) \cdot \vec{X}(\vec{r}) \right] \\ + i \left[\vec{B}(\vec{r}) \times \vec{Y}(\vec{r}) - \vec{B}(\vec{r}) \times \vec{Y}(\vec{r}) \right] = -4\pi\alpha_s \vec{k}_1(\vec{r}) \end{aligned} \quad (5.17a)$$

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \times \vec{H}_2(\vec{r}) - i \left[B_0 \cdot \vec{X}(\vec{r}) - B_0(\vec{r}) \cdot \vec{X}(\vec{r}) \right] \\ - i \left[\vec{B}(\vec{r}) \times \vec{Y}(\vec{r}) - \vec{B}(\vec{r}) \times \vec{Y}(\vec{r}) \right] = -4\pi\alpha_s \vec{k}_2(\vec{r}) . \end{aligned} \quad (5.17b)$$

Addiert man die beiden Quellgleichungen (5.16a) und (5.16b), bzw. die Wirbelgleichungen (5.17a) und (5.17b), so erhält man die gewohnten Abelschen Maxwell-Gleichungen für das elektrische, bzw. das magnetischen Gesamtfeld $\vec{E}(\vec{r})$ (4.29a), bzw. $\vec{H}(\vec{r})$ (4.29a)

$$\vec{E}(\vec{r}) \doteq \vec{E}_1(\vec{r}) + \vec{E}_2(\vec{r}) \quad (5.18a)$$

$$\vec{H}(\vec{r}) \doteq \vec{H}_1(\vec{r}) + \vec{H}_2(\vec{r}) , \quad (5.18b)$$

d.h.

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E}(\vec{r}) = -4\pi\alpha_s j_0(\vec{r}) \quad (5.19a)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}) = -4\pi\alpha_s \vec{j}(\vec{r}) . \quad (5.19b)$$

Unter Verwendung der Bianchi-Identität für die interne Bündelkrümmung ${}^{(S)}\mathcal{F}_{\mu\nu}$ (3.10a)

$$\mathcal{D}_\lambda {}^{(S)}\mathcal{F}_{\mu\nu} + \mathcal{D}_\mu {}^{(S)}\mathcal{F}_{\nu\lambda} + \mathcal{D}_\nu {}^{(S)}\mathcal{F}_{\lambda\mu} \equiv 0 \quad (5.20)$$

erhält man auch noch die verbleibenden Wirbelgleichungen für die elektrischen Felder $\vec{E}_a(\vec{r})$

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \times \vec{E}_1(\vec{r}) &= -\vec{\nabla} \times \vec{E}_2(\vec{r}) \\ &= i \left[\vec{B}_0(\vec{r}) \cdot \vec{Y}(\vec{r}) - B_0(\vec{r}) \cdot \vec{Y}^*(\vec{r}) \right] + i \left[\vec{X}(\vec{r}) \times \vec{B}^*(\vec{r}) - \vec{X}^*(\vec{r}) \times \vec{B}(\vec{r}) \right],\end{aligned}\quad (5.21)$$

und ebenso die Quellgleichungen für die magnetischen Felder \vec{H}_a

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{H}_1(\vec{r}) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{H}_2(\vec{r}) = i \left[\vec{B}(\vec{r}) \cdot \vec{Y}^*(\vec{r}) - \vec{B}^*(\vec{r}) \cdot \vec{Y}(\vec{r}) \right]. \quad (5.22)$$

Daraus ergibt sich, dass beim elektrischen Gesamtfeld $\vec{E}(\vec{r})$ (5.18a) die Rotation verschwindet

$$\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}) \equiv 0, \quad (5.23)$$

und für das magnetische Gesamtfeld $\vec{H}(\vec{r})$ (5.18b) keine Quellen existieren

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{H}(\vec{r}) \equiv 0, \quad (5.24)$$

in Entsprechung zu den gewohnten Maxwell-Gleichungen.

Die Feldgleichungen für die Austauschgrößen erhält man analog unter Verwendung der verbleibenden beiden Gleichungen des Maxwell-Systems (3.36c) und (3.36d); daraus ergibt sich die folgende Quellgleichung für das elektrische Austauschfeld \vec{X} (4.38a):

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{X}(\vec{r}) - i \left[\vec{A}_1(\vec{r}) - \vec{A}_2(\vec{r}) \right] \cdot \vec{X}(\vec{r}) + i \vec{B}(\vec{r}) \cdot \left[\vec{E}_1(\vec{r}) - \vec{E}_2(\vec{r}) \right] = 4\pi\alpha_s \vec{h}_0^*(\vec{r}) \quad (5.25)$$

und folgende Wirbelgleichung für das magnetische Austauschfeld $\vec{Y}(\vec{r})$ (4.38b):

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \times \vec{Y}(\vec{r}) - i \left[{}^{(1)}A_0(\vec{r}) - {}^{(2)}A_0(\vec{r}) \right] \cdot \vec{X}(\vec{r}) - i \left[\vec{A}_1(\vec{r}) - \vec{A}_2(\vec{r}) \right] \times \vec{Y}(\vec{r}) \\ = 4\pi\alpha_s \vec{h}^*(\vec{r}) - \frac{i}{a_M} \vec{X}(\vec{r}) - i B_0(\vec{r}) \cdot \left[\vec{E}_1(\vec{r}) - \vec{E}_2(\vec{r}) \right] - i \vec{B}(\vec{r}) \times \left[\vec{H}_1(\vec{r}) - \vec{H}_2(\vec{r}) \right] \\ \left(a_M \doteq \frac{\hbar}{(M_1 - M_2) \cdot c} \right).\end{aligned}\quad (5.26)$$

Desweiteren erhält man auch hier unter Verwendung der Bianchi-Identität die Wirbelgleichung für das elektrische Austauschfeld $\vec{X}(\vec{r})$

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \times \vec{X}(\vec{r}) + i \left[{}^{(1)}A_0(\vec{r}) - {}^{(2)}A_0(\vec{r}) \right] \cdot \vec{Y}(\vec{r}) - i \left[\vec{A}_1(\vec{r}) - \vec{A}_2(\vec{r}) \right] \times \vec{X}(\vec{r}) \\ = \frac{i}{a_M} \vec{Y}(\vec{r}) + i \left\{ B_0(\vec{r}) \left[\vec{H}_1(\vec{r}) - \vec{H}_2(\vec{r}) \right] + \left[\vec{E}_1(\vec{r}) - \vec{E}_2(\vec{r}) \right] \times \vec{B}(\vec{r}) \right\}\end{aligned}\quad (5.27)$$

und die Quellgleichung für das magnetische Austauschfeld $\vec{Y}(\vec{r})$:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{Y}(\vec{r}) = i\vec{Y}(\vec{r}) \cdot \left[\vec{A}_1(\vec{r}) - \vec{A}_2(\vec{r}) \right] - i\vec{B}(\vec{r}) \cdot \left[\vec{H}_1(\vec{r}) - \vec{H}_2(\vec{r}) \right]. \quad (5.28)$$

Hiermit hat man nun ein geschlossenes statisches System für die Eichfelder $\{\vec{E}_a, \vec{H}_a, \vec{X}, \vec{Y}\}$.

Um die gewünschten Poisson-Gleichungen zu erhalten, werden nun diese Eichfelder durch die Potentiale $\{({}^a)A_0, \vec{A}_a, B_0, \vec{B}\}$ ausgedrückt:

$$\vec{E}_1(\vec{r}) = -\vec{\nabla}({}^1)A_0(\vec{r}) - i \left[B_0(\vec{r}) \cdot \vec{B}^*(\vec{r}) - {}^*B_0(\vec{r}) \cdot \vec{B}(\vec{r}) \right] \quad (5.29a)$$

$$\vec{E}_2(\vec{r}) = -\vec{\nabla}({}^2)A_0(\vec{r}) + i \left[B_0(\vec{r}) \cdot \vec{B}^*(\vec{r}) - {}^*B_0(\vec{r}) \cdot \vec{B}(\vec{r}) \right] \quad (5.29b)$$

$$\vec{H}_1(\vec{r}) = \vec{\nabla} \times \vec{A}_1(\vec{r}) - i\vec{B}(\vec{r}) \times \vec{B}^*(\vec{r}) \quad (5.29c)$$

$$\vec{H}_2(\vec{r}) = \vec{\nabla} \times \vec{A}_2(\vec{r}) + i\vec{B}(\vec{r}) \times \vec{B}^*(\vec{r}) \quad (5.29d)$$

$$\begin{aligned} \vec{X}(\vec{r}) = -\vec{\nabla}B_0(\vec{r}) + \frac{i}{a_M}\vec{B}(\vec{r}) - i \left[({}^1)A_0(\vec{r}) - ({}^2)A_0(\vec{r}) \right] \vec{B}(\vec{r}) \\ + iB_0(\vec{r}) \left[\vec{A}_1(\vec{r}) - \vec{A}_2(\vec{r}) \right] \end{aligned} \quad (5.29e)$$

$$\vec{Y}(\vec{r}) = \vec{\nabla} \times \vec{B}(\vec{r}) - i \left[\vec{A}_1(\vec{r}) - \vec{A}_2(\vec{r}) \right] \times \vec{B}(\vec{r}). \quad (5.29f)$$

Auch hier zeigt es sich wieder, dass für die Gesamtfelder $\vec{E}(\vec{r})$ und $\vec{H}(\vec{r})$ die klassischen elektrodynamischen Beziehungen gelten: indem man die Gleichungen (5.29a) und (5.29b) addiert, erhält man

$$\vec{E}(\vec{r}) = -\vec{\nabla} \cdot A_0(\vec{r}) \quad (5.30)$$

und entsprechend für die Gleichungen (5.29c) und (5.29d)

$$\vec{H}(\vec{r}) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}); \quad (5.31)$$

dabei handelt es sich um die Dreiervektorschreibweise der Lorentz-kovarianten Beziehung (3.13).

Indem man nun die Feldstärken in ihrer Form (5.29a) - (5.29f) in die entsprechenden Quell- und Wirbelgleichungen, wie sie oben eingeführt wurden, einsetzt, erhält man nun die (verallgemeinerten) Poisson-Gleichungen für die Potentiale. Als Poisson-Gleichung für die beiden elektrostatischen Potentiale $({}^a)A_0(\vec{r})$ ergibt sich

damit

$$\begin{aligned} \Delta^{(1,2)}A_0(\vec{r}) = 4\pi\alpha_s^{(1,2)}k_0(\vec{r}) & \pm i \left[\vec{B}(\vec{r}) \cdot \vec{X}(\vec{r}) - \vec{B}(\vec{r}) \cdot \vec{X}(\vec{r}) \right] \\ & \mp i \left[\vec{\nabla} B_0(\vec{r}) \cdot \vec{B}(\vec{r}) - \vec{\nabla} B_0(\vec{r}) \cdot \vec{B}(\vec{r}) \right] \\ & \mp i \left[B_0(\vec{r}) \vec{\nabla} \cdot \vec{B}(\vec{r}) - B_0(\vec{r}) \vec{\nabla} \cdot \vec{B}(\vec{r}) \right], \end{aligned} \quad (5.32)$$

wobei das obere Vorzeichen für das erste Teilchen ($a = 1$) gilt und das unter Vorzeichen für das zweite Teilchen ($a = 2$). Auch hier erhält man durch Addition der Gleichungen für die beiden Teilchen wieder die aus der klassischen Elektrodynamik bekannte Poisson-Gleichung für das Gesamtpotential $A_0(\vec{r})$:

$$\Delta A_0(\vec{r}) = 4\pi\alpha_s j_0(\vec{r}). \quad (5.33)$$

Als Poisson-Gleichung für die magnetostatischen Potentiale $\vec{A}_a(\vec{r})$ erhält man

$$\begin{aligned} \Delta \vec{A}_{1/2}(\vec{r}) = 4\pi\alpha_s \vec{k}_{1/2}(\vec{r}) & \mp i \vec{\nabla} \times \left[\vec{B}(\vec{r}) \times \vec{B}(\vec{r}) \right] \\ & \pm i \left[\vec{B}(\vec{r}) \times \vec{Y}(\vec{r}) - \vec{B}(\vec{r}) \times \vec{Y}(\vec{r}) \right] \\ & \pm i \left[B_0(\vec{r}) \cdot \vec{X}(\vec{r}) - B_0(\vec{r}) \cdot \vec{X}(\vec{r}) \right], \end{aligned} \quad (5.34)$$

wobei die Vorzeichen entsprechend Gleichung (5.32) gelten und die Summe der Gleichungen für die beiden Teilchen die zu (5.33) analoge Form für das magnetostatische Gesamtpotential $\vec{A}(\vec{r})$ ergeben

$$\Delta \vec{A}(\vec{r}) = 4\pi\alpha_s \vec{j}(\vec{r}). \quad (5.35)$$

Für die Austauschpotentiale $B_0(\vec{r})$ und $\vec{B}(\vec{r})$ ergeben sich die Poisson-Gleichungen auf entsprechende Weise und man erhält für das elektrische Austauschpotential $B_0(\vec{r})$

$$\begin{aligned} \Delta B_0 = & \frac{i}{a_M} \vec{\nabla} \cdot \vec{B}(\vec{r}) \\ & - i \left[\vec{\nabla}^{(1)} A_0(\vec{r}) - \vec{\nabla}^{(2)} A_0(\vec{r}) \right] \cdot \vec{B}(\vec{r}) - i \left[{}^{(1)}A_0(\vec{r}) - {}^{(2)}A_0(\vec{r}) \right] \vec{\nabla} \cdot \vec{B}(\vec{r}) \\ & + i \vec{\nabla} B_0(\vec{r}) \cdot \left[\vec{A}_1(\vec{r}) - \vec{A}_2(\vec{r}) \right] + i B_0(\vec{r}) \left[\vec{\nabla} \cdot \vec{A}_1(\vec{r}) - \vec{\nabla} \cdot \vec{A}_2(\vec{r}) \right] \\ & - 4\pi\alpha_s \vec{h}(\vec{r}) - i \left[\vec{A}_1(\vec{r}) - \vec{A}_2(\vec{r}) \right] \cdot \vec{X}(\vec{r}) + i \vec{B}(\vec{r}) \cdot \left[\vec{E}_1(\vec{r}) - \vec{E}_2(\vec{r}) \right] \end{aligned} \quad (5.36)$$

und für das magnetische Austauschpotential $\vec{B}(\vec{r})$

$$\begin{aligned} \Delta \vec{B}(\vec{r}) = & - i \vec{\nabla} \times \left(\left[\vec{A}_1(\vec{r}) - \vec{A}_2(\vec{r}) \right] \times \vec{B}(\vec{r}) \right) \\ & - i \left[{}^{(1)}A_0(\vec{r}) - {}^{(2)}A_0(\vec{r}) \right] \vec{X}(\vec{r}) - i \left[\vec{A}_1(\vec{r}) - \vec{A}_2(\vec{r}) \right] \times \vec{Y}(\vec{r}) \\ & - 4\pi\alpha_s \overset{*}{\vec{h}}(\vec{r}) + \frac{i}{a_M} \vec{X}(\vec{r}) \\ & + iB_0(\vec{r}) \left[\vec{E}_1(\vec{r}) - \vec{E}_2(\vec{r}) \right] + i\vec{B}(\vec{r}) \times \left[\vec{H}_1(\vec{r}) - \vec{H}_2(\vec{r}) \right] . \end{aligned} \quad (5.37)$$

5.2.2 Elektrostatische Näherung

Betrachtet man nun die Komponenten $F^a_{\mu\nu}$ (3.11b), (3.11c) der Feldstärke $\mathcal{F}_{\mu\nu}$ für einen stationären Zustand, so enthalten diese auch einen Anteil mit den Austauschpotentialen B_μ und $\overset{*}{B}_\mu$; aber um die Hartree-Fock-Gleichungen aus den RST-Gleichungen herzuleiten, genügt eine *elektrostatische Näherung*, in der die nichtabelschen und magnetostatischen Effekte vernachlässigt werden, indem man sich mit der folgenden Näherung für die Feldstärken $F^a_{\mu\nu}$ begnügt

$${}^{(a)}F_{0j} \approx -\partial_j {}^{(a)}A_0(\vec{r}) \quad (5.38a)$$

$${}^{(a)}F_{jk} = 0 . \quad (5.38b)$$

Für die Feldstärken $G_{\mu\nu}$ (3.11c) und $\overset{*}{G}_{\mu\nu}$ (3.11d) soll entsprechend die Näherung

$$G_{0j} \approx -\partial_j B_0(\vec{r}) \quad (5.39a)$$

$$\overset{*}{G}_{0j} \approx -\partial_j \overset{*}{B}_0(\vec{r}) \quad (5.39b)$$

$$G_{jk} = 0 \quad (5.39c)$$

$$\overset{*}{G}_{jk} = 0 \quad (5.39d)$$

verwendet werden. Die elektrostatischen Näherungen (5.38) und (5.39) ergeben sich, indem man die räumlichen Komponenten von A^a_μ , B_μ , $F^a_{\mu\nu}$, $G_{\mu\nu}$ vernachlässigt. Zusätzlich werden für diese Näherung auch die nichtabelschen Anteile der Maxwell-Gleichungen (2.23) vernachlässigt, was dann zu gewöhnlichen Poisson-Gleichungen für die elektrostatischen Potentiale ${}^{(a)}A_0(\vec{r})$ (5.5) führt

$$\Delta {}^{(a)}A_0(\vec{r}) = 4\pi\alpha_s {}^{(a)}k_0(\vec{r}) . \quad (5.40)$$

Mit der Forderung, dass die Potentiale für $|\vec{r}| \rightarrow \infty$ verschwinden, erhält man damit folgende Lösung für ${}^{(a)}A_0(\vec{r})$:

$${}^{(a)}A_0(\vec{r}) = -\alpha_s \int d^3\vec{r}' \frac{{}^{(a)}k_0(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} . \quad (5.41)$$

Auch für die Austauschpotentiale B_0 , B_0^* ergeben sich in der elektrostatischen Näherung Poisson-Gleichungen

$$\Delta B_0(\vec{r}) = -4\pi\alpha_s h_0(\vec{r}) \quad (5.42a)$$

$$\Delta B_0^*(\vec{r}) = -4\pi\alpha_s h_0(\vec{r}) \quad (5.42b)$$

mit den offensichtlichen Lösungen

$$B_0(\vec{r}) = \alpha_s \int d^3\vec{r}' \frac{h_0(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (5.43a)$$

$$B_0^*(\vec{r}) = \alpha_s \int d^3\vec{r}' \frac{h_0(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (5.43b)$$

Die elektrostatische Näherung besitzt eine sehr schöne Eigenschaft in Bezug auf die relativistische Orthonormierung der Wellenfunktionen ψ_a (3.44): Das Vernachlässigen der räumlichen Komponenten von $A^a{}_\mu$, B_μ , $F^a{}_{\mu\nu}$, $G_{\mu\nu}$ und damit auch von $k_{a\mu}$ aufgrund der elektrostatischen Näherung führt dazu, dass der Verschränkungsvektor G_μ (3.41) in den Quellgleichungen für die modifizierten Teilchenströme $l_{a\mu}$ (3.42) gleich Null gesetzt werden kann. Als Konsequenz erhält man anstelle der Normierungsbedingung für die modifizierten Teilchenströme $l_{a\mu}$ (3.44) eine genäherte Normierungsbedingung für die Dirac-Ströme $k_{a\mu}$:

$$\int_{(S)} k_{1\mu} dS^\mu = \int_{(S)} k_{2\mu} dS^\mu = 1. \quad (5.44)$$

Für den stationären Zustand wählt man einen Zeitschnitt ($t = const$) als Hyperfläche S , sodass nur die Ladungsdichten ${}^{(a)}k_0(\vec{r})$ (5.4a) in den Normierungsintegralen (5.44) auftreten. Unter Berücksichtigung der Definition der Dirac-Ströme $k_{a\mu} = \bar{\psi}_a \gamma_\mu \psi_a$ (3.19) ergeben sich damit in der elektrostatischen Näherung folgende Bedingungen für den räumlichen Teil der Wellenfunktionen $\psi_a(\vec{r}, t)$ (5.3):

$$\int d^3\vec{r} \psi_1^\dagger(\vec{r}) \psi_1(\vec{r}) = \int d^3\vec{r} \psi_2^\dagger(\vec{r}) \psi_2(\vec{r}) = 1. \quad (5.45)$$

Die relativistische Orthogonalität der Wellenfunktionen $\psi_a(\vec{r})$ ergibt sich, indem man in die Quellgleichung für den Austauschstrom h_μ (3.30c) den stationären Ansatz für den Austauschstrom h_μ (5.7a), das Austauschpotential B_μ (5.8), die elektromagnetischen Ströme $k_{a\mu}$ (5.4a) und die elektromagnetischen Potentiale $A^a{}_\mu$ (5.5) einsetzt und die räumlichen Komponenten dieser Größen wieder aufgrund der elektrostatischen Näherung vernachlässigt. Man erhält so folgende Beziehung für die Austauschdichte h_0 :

$$\frac{M_1 - M_2}{\hbar} c h_0(\vec{r}) = [{}^{(1)}A_0(\vec{r}) - {}^{(2)}A_0(\vec{r})] \cdot h_0(\vec{r}) + B_0(\vec{r}) \cdot [{}^{(1)}k_0(\vec{r}) - {}^{(2)}k_0(\vec{r})]. \quad (5.46)$$

Integriert man nun über den gesamten dreidimensionalen Raum, so ergibt sich unter Verwendung der Lösungen für die elektrostatischen Potentiale ${}^{(a)}A_0(\vec{r})$ (5.41) und für die Austauschpotentiale B_0, B_0^* (5.43) folgende Beziehung:

$$\int d^3\vec{r} h_0(\vec{r}) = 0, \quad (5.47)$$

aus der man die gewünschte Orthogonalitätsrelation in Bezug auf die Wellenfunktionen erhält:

$$\int d^3\vec{r} \psi_1^\dagger(\vec{r}) \cdot \psi_2(\vec{r}) = 0. \quad (5.48)$$

5.2.3 Elektrostatische Näherung des relativistischen Eigenwertproblems

In die Masseeigenwertgleichungen (5.15) wurden die elektrostatischen und magnetostatischen Wechselwirkungen auf dieselbe Weise in das Gleichungssystem eingebunden. Die magnetischen Wechselwirkungen sind allerdings viel schwächer als die elektrostatischen und so lässt sich auch hier eine elektrostatische Näherung durchführen (die noch immer voll relativistisch ist), indem die räumlichen Anteile der Viererpotentiale $\{{}^{(ex)}A_j, A^a_j; B_j\}$ vernachlässigt werden und die zeitlichen Komponenten durch die Lösungen der Poisson-Gleichungen (5.41) und (5.43) ersetzt werden, wobei sich die Ströme wieder mit Hilfe der Wellenfunktionen $\psi_a(\vec{r})$ ausdrücken lassen. Damit lautet die elektrostatische Näherung der Masseeigenwertgleichungen (5.15) für das RST-System:

$$\begin{aligned} & -i\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} {}^{(1)}\phi_{\pm}(\vec{r}) - {}^{(ex)}A_0(\vec{r}) {}^{(1)}\phi_{\mp}(\vec{r}) \\ & + \alpha_s \int d^3\vec{r}' \frac{{}^{(2)}\phi_+(\vec{r}')^\dagger \cdot {}^{(2)}\phi_+(\vec{r}') + {}^{(2)}\phi_-(\vec{r}')^\dagger \cdot {}^{(2)}\phi_-(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \cdot {}^{(1)}\phi_{\mp}(\vec{r}) \\ & - \alpha_s \int d^3\vec{r}' \frac{{}^{(2)}\phi_+(\vec{r}')^\dagger \cdot {}^{(1)}\phi_+(\vec{r}') + {}^{(2)}\phi_-(\vec{r}')^\dagger \cdot {}^{(1)}\phi_-(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \cdot {}^{(2)}\phi_{\mp}(\vec{r}) \\ & = \frac{M_1 \pm M}{\hbar} c {}^{(1)}\phi_{\mp}(\vec{r}) \end{aligned} \quad (5.49a)$$

$$\begin{aligned} & -i\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} {}^{(2)}\phi_{\pm}(\vec{r}) - {}^{(ex)}A_0(\vec{r}) {}^{(2)}\phi_{\mp}(\vec{r}) \\ & + \alpha_s \int d^3\vec{r}' \frac{{}^{(1)}\phi_+(\vec{r}')^\dagger \cdot {}^{(1)}\phi_+(\vec{r}') + {}^{(1)}\phi_-(\vec{r}')^\dagger \cdot {}^{(1)}\phi_-(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \cdot {}^{(2)}\phi_{\mp}(\vec{r}) \\ & - \alpha_s \int d^3\vec{r}' \frac{{}^{(1)}\phi_+(\vec{r}')^\dagger \cdot {}^{(2)}\phi_+(\vec{r}') + {}^{(1)}\phi_-(\vec{r}')^\dagger \cdot {}^{(2)}\phi_-(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \cdot {}^{(1)}\phi_{\mp}(\vec{r}) \\ & = \frac{M_2 \pm M}{\hbar} c {}^{(2)}\phi_{\mp}(\vec{r}). \end{aligned} \quad (5.49b)$$

Das Gleichungssystem ist dabei noch immer vollrelativistisch und ist daher durch die Pauli-Form der Normierungsbedingung (5.45) zu ergänzen:

$$\int d^3\vec{r} \left({}^{(a)}\phi_+(\vec{r})^\dagger \cdot {}^{(a)}\phi_+(\vec{r}) + {}^{(a)}\phi_-(\vec{r})^\dagger \cdot {}^{(a)}\phi_-(\vec{r}) \right) = 1. \quad (5.50)$$

Die relativistische Orthogonalitätsrelation (5.48) lautet in der Pauli-Form:

$$\int d^3\vec{r} \left({}^{(1)}\phi_+(\vec{r})^\dagger \cdot {}^{(2)}\phi_+(\vec{r}) + {}^{(1)}\phi_-(\vec{r})^\dagger \cdot {}^{(2)}\phi_-(\vec{r}) \right) = 0. \quad (5.51)$$

Damit das nichtlineare Gleichungssystem (5.11) eine eindeutige Lösung hat, muss die relativistische Normierungsbedingung (5.50) auf die zeitunabhängigen Lösungen $\psi_a(\vec{r})$ angewandt werden, wohingegen die Orthogonalitätsrelation (5.51) eine Folge der Feldgleichungen ist und damit als Konsistenz-Check für die numerische Integration verwendet werden kann.

5.2.4 Nichtrelativistische Näherung

Es mag zunächst inkonsequent erscheinen, die magnetischen Wechselwirkungen zu vernachlässigen, den vollrelativistischen Charakter jedoch beizubehalten, da beide Effekte von derselben Größenordnung sein können (wenn man die Ergebnisse in eine Potenzreihe der Kopplungskonstanten α_s entwickelt); deshalb wird nun eine weitere Näherung durchgeführt, die zum nichtrelativistischen Limit des Gleichungssystems (5.49) führen wird. Dazu nähert man die Masseeigenwerte M_a durch die Schrödinger-Eigenwerte E_a der Teilchen an:

$$M_a = M + \frac{E_a}{c^2}. \quad (5.52)$$

Weiter wird angenommen, dass die “negativen Pauli-Spinoren” ${}^{(a)}\phi_-(\vec{r})$ ($a = 1, 2$) viel kleiner als die “positiven Pauli-Spinoren” ${}^{(a)}\phi_+(\vec{r})$ sind, was nahelegt, die negativen Spinoren im Pauli-System zu eliminieren. Dazu wird folgende Beziehung verwendet:

$${}^{(a)}\phi_-(\vec{r}) \cong -\frac{i\hbar}{2Mc} \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} {}^{(a)}\phi_+(\vec{r}), \quad (5.53)$$

die sich als näherungsweise Lösung der Pauli-Gleichungen (5.49) für die positiven Spinoren ${}^{(a)}\phi_+(\vec{r})$ ansehen lässt (oberes Vorzeichen). Setzt man dieses Ergebnis in die entsprechenden Pauli-Gleichungen für die negativen Spinoren ein, so erhält man als nichtrelativistischen Grenzfall für das Masseeigenwertgleichungssystem (5.49)

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta {}^{(1)}\phi_+(\vec{r}) - \hbar c^{(ex)} A_0(\vec{r}) \cdot {}^{(1)}\phi_+(\vec{r}) + e^2 \int d^3\vec{r}' \frac{{}^{(2)}\phi_+(\vec{r}')^\dagger \cdot {}^{(2)}\phi_+(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \cdot {}^{(1)}\phi_+(\vec{r})$$

$$-e^2 \int d^3\vec{r}' \frac{{}^{(2)}\phi_+(\vec{r}')^\dagger \cdot {}^{(1)}\phi_+(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \cdot {}^{(2)}\phi_+(\vec{r}) = E_1 \cdot {}^{(1)}\phi_+(\vec{r}) \quad (5.54a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta {}^{(2)}\phi_+(\vec{r}) - \hbar c^{(ex)} A_0(\vec{r}) \cdot {}^{(2)}\phi_+(\vec{r}) + e^2 \int d^3\vec{r}' \frac{{}^{(1)}\phi_+(\vec{r}')^\dagger \cdot {}^{(1)}\phi_+(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \cdot {}^{(2)}\phi_+(\vec{r}) - e^2 \int d^3\vec{r}' \frac{{}^{(1)}\phi_+(\vec{r}')^\dagger \cdot {}^{(2)}\phi_+(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \cdot {}^{(1)}\phi_+(\vec{r}) = E_2 \cdot {}^{(2)}\phi_+(\vec{r}) . \quad (5.54b)$$

Dieses nichtrelativistische System beschreibt dabei zwei physikalisch unterschiedliche Zustände, nämlich den Fall, in dem die Spins der beiden Teilchen parallel sind, z.B.

$${}^{(1)}\phi_+(\vec{r}) = \phi_1(\vec{r}) \uparrow > \quad (5.55a)$$

$${}^{(2)}\phi_+(\vec{r}) = \phi_2(\vec{r}) \uparrow > \quad (5.55b)$$

und den Fall, in dem die Spins antiparallel sind, z.B.

$${}^{(1)}\phi_+(\vec{r}) = \phi_1(\vec{r}) \uparrow > \quad (5.56a)$$

$${}^{(2)}\phi_+(\vec{r}) = \phi_2(\vec{r}) \downarrow > . \quad (5.56b)$$

Für den Fall paralleler Spins (5.55) erhält man aus dem Pauli-System (5.54) für die Ortsfunktionen $\phi_a(\vec{r})$ vor dem (konstanten) Basisspinor $|\uparrow\rangle$ das folgende Orthosystem:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \phi_1(\vec{r}) - \hbar c^{(ex)} A_0(\vec{r}) \cdot \phi_1(\vec{r}) + e^2 \int d^3\vec{r}' \frac{\phi_2^*(\vec{r}') \cdot \phi_2(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \cdot \phi_1(\vec{r}) - e^2 \int d^3\vec{r}' \frac{\phi_2^*(\vec{r}') \cdot \phi_1(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \cdot \phi_2(\vec{r}) = E_1 \cdot \phi_1(\vec{r}) \quad (5.57a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \phi_2(\vec{r}) - \hbar c^{(ex)} A_0(\vec{r}) \cdot \phi_2(\vec{r}) + e^2 \int d^3\vec{r}' \frac{\phi_1^*(\vec{r}') \cdot \phi_1(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \cdot \phi_2(\vec{r}) - e^2 \int d^3\vec{r}' \frac{\phi_1^*(\vec{r}') \cdot \phi_2(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \cdot \phi_1(\vec{r}) = E_2 \cdot \phi_2(\vec{r}) . \quad (5.57b)$$

Der Fall antiparalleler Spins (5.56) führt ganz analog zu dem etwas einfacheren Parasystem, bei dem das Austauschintegral fehlt, das beim Orthosystem, wo die Elektronenspins parallel ausgerichtet sind, die Wechselwirkungsenergie zwischen den Elektronen und somit die Gesamtenergie E_a absenkt:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \phi_1(\vec{r}) - \hbar c^{(ex)} A_0(\vec{r}) \cdot \phi_1(\vec{r}) + e^2 \int d^3\vec{r}' \frac{\phi_2^*(\vec{r}') \cdot \phi_2(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \cdot \phi_1(\vec{r}) = E_1 \cdot \phi_1(\vec{r}) \quad (5.58a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta\phi_2(\vec{r}) - \hbar c^{(ex)}A_0(\vec{r}) \cdot \phi_2(\vec{r}) + e^2 \int d^3\vec{r}' \frac{\phi_1^*(\vec{r}') \cdot \phi_1(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \cdot \phi_2(\vec{r}) = E_2 \cdot \phi_2(\vec{r}) . \quad (5.58b)$$

Dies sind die bekannten Hartree-Fock-Gleichungen, die in den Lehrbüchern zur nichtrelativistischen Quantenmechanik beschrieben sind (vergl. auch Anhang C). Damit ist gezeigt, dass man über eine nichtrelativistische, elektrostatische Näherung der RST-Gleichungen unter Verwendung des Ansatzes (5.55) bzw. (5.56) für die Spinoren den Hartree-Fock-Ansatz aus den RST-Gleichungen herleiten kann. Die RST bietet damit die Möglichkeit einer vollständigen und konsistenten Verallgemeinerung von nichtrelativistischen Konzepten auf den relativistischen Fall. Es zeigt sich, dass Schrödingers Konzept der *Energieeigenwerte* E_a in der RST eine relativistische Entsprechung in Form der *Masseeigenwerte* M_a entsprechend der Beziehung (5.52) erhält (vergl. das Masseeigenwertsystem (5.15)).

Das Fehlen des Austauschterms für den Fall antiparalleler Spins (5.56) wird im nichtrelativistischen Fall auf die Annahme der Orthogonalität der nichtrelativistischen Spinorbasis

$$\langle \uparrow | \downarrow \rangle = 0 \quad (5.59)$$

zurückgeführt, was für den vollrelativistischen Fall im allgemeinen nicht gilt (siehe die ausführliche Diskussion in Abschnitt 6.6). Deshalb erwartet man im relativistischen Bereich, wo das Konzept von (anti-)parallelen Spins gegebenenfalls nicht zutreffend ist, das Auftreten von Austauscheffekten auch für antiparallele Spins.

Was offensichtlich beibehalten wird, wenn man den Hartree-Fock-Ansatz durch die RST verallgemeinert, ist die Orthonormierung der Wellenfunktion in Form der relativistischen Bedingungen für die Normierung (5.45) und Orthogonalität (5.48). Dabei ist die relativistische Normierungsbedingung (5.45) eine Verallgemeinerung der nichtrelativistischen Näherung

$$\int d^3\vec{r} \phi_1^*(\vec{r}) \phi_1(\vec{r}) = \int d^3\vec{r} \phi_2^*(\vec{r}) \phi_2(\vec{r}) = 1 , \quad (5.60)$$

die für parallele und antiparallele Spins gilt; die relativistische Orthogonalitätsrelation (5.48) hat eine nichtrelativistische Entsprechung allerdings nur für den Fall paralleler Spins

$$\int d^3\vec{r} \phi_1^*(\vec{r}) \phi_2(\vec{r}) = 0 \quad (5.61)$$

und zwar wegen der Orthogonalität der nichtrelativistischen Spinorbasis (5.59). Es gibt keinen Grund, warum die nichtrelativistische Orthogonalitätsrelation (5.61)

auch für den Fall antiparalleler Spins gelten sollte; im Gegensatz zum relativistischen Fall, wo die Orthogonalitätsbedingung (5.48) in jedem Fall erfüllt sein muss.

Auf einen besonders interessanten Punkt soll hier noch hingewiesen werden: Die elektrostatische Näherung in der RST besteht nicht nur darin, die elektromagnetischen Dreiervektorpotentiale $\vec{A}_a(\vec{r}) = \{ {}^{(a)}A_j(\vec{r}) \}$ zu vernachlässigen, sondern auch ihr Austauschgegenstück $\vec{B}(\vec{r}) = \{ B_j(\vec{r}) \}$. Die Folge ist, dass die Austauscheffekte im Hartree-Fock-Ansatz (5.57) und (5.58) ausschließlich von der Zeitkomponente $B_0(\vec{r})$ des Austausch-Viererpentials B_μ herrühren. Bei der vollrelativistischen Beschreibung müssen allerdings nicht nur die magnetischen Effekte (erzeugt von den Dreiervektorpotentialen $\vec{A}_a(\vec{r})$) berücksichtigt werden, sondern auch diejenigen Austauscheffekte, die durch die Dreiervektorpotentiale \vec{B} vermittelt werden und beim Hartree-Fock-Ansatz fehlen. Das heißt, dass man in Verbindung mit relativistischem Magnetismus neue Austauscheffekte erwarten kann.

Kapitel 6

Heliumähnliche Systeme

Im folgenden sollen die Überlegungen des vorherigen Kapitels zu den stationären Zuständen nun weiter spezialisiert werden, sodass auf ihrer Basis numerische Berechnungen von atomaren Energieniveaus durchgeführt werden können. Die numerischen Lösungen (siehe Kapitel 7) für die Energieniveaus dieser heliumähnlichen Systeme lassen sich dann mit experimentellen Daten vergleichen, sodass sich die Aussagekraft der RST am Experiment überprüfen lässt. Als einfachstes Beispiel soll insbesondere der Grundzustand der heliumähnlichen Ionen betrachtet werden. Der Grundzustand mit antiparallelen Spins der beiden Elektronen ist ein Zustand des Parasytems, und er ermöglicht durch seine Isotropie eine weitere Vereinfachung des Zwei-Fermionen-Eigenwertsystems, wie im folgenden gezeigt wird. Die Grundzustandsenergie ist zwar nicht direkt messbar, aber die elektronische Wechselwirkungsenergie lässt sich messen, sodass die RST-Ergebnisse mit den experimentellen Werten verglichen werden können. Dabei liegt ein besonderes Augenmerk auf den schweren Ionen, deren Elektronen sich so schnell bewegen, dass relativistische Effekte dominieren und nichtrelativistische Ansätze nicht mehr verwendet werden können. Zunächst soll ein kurzer Überblick über die Termschemata und Übergänge bei heliumähnlichen Ionen gegeben werden (vergl. auch [7]).

6.1 Ortho- und Parazustände bei heliumähnlichen Ionen

In einem heliumähnlichen Ion mit seinen beiden Elektronen gibt es zwei Möglichkeiten für die Ausrichtung der Elektronenspins, wobei die Spinrichtungen nur für den nichtrelativistischen Fall exakt festgelegt werden können und damit für den relativistischen Fall eine Idealisierung darstellen:

1. die beiden Spins zeigen in unterschiedliche Richtungen. Die beiden Elektronen können sich auf derselben Schale aufhalten; im Grundzustand befinden sich beide Elektronen auf der Schale mit der Hauptquantenzahl $n = 1$. Die Multiplizität eines Zustands ist gegeben durch $2S + 1$, wobei S gleich dem Gesamtspin ist. In diesem Fall ist $S = 0$ und somit die Multiplizität gleich 1, deshalb spricht man hier von einem Singulettzustand.
2. die beiden Spins zeigen in dieselbe Richtung. Die beiden Elektronen können sich aufgrund des Pauli-Prinzips im Grundzustand nicht auf derselben Schale aufhalten - man hat hier das zweite Elektron auf der Schale mit der Hauptquantenzahl $n = 2$; da die Multiplizität hier gleich 3 ist, nennt man diesen Zustand Triplettzustand.

Vom Grundzustand des Singulett- oder Triplettzustands ausgehend kann man die Elektronen nun in verschiedene Niveaus anregen. Auf diese Weise erhält man die Termschemata für die beiden Zustände. Das Triplettssystem wird dabei auch als Orthosystem bezeichnet und das Singulettssystem als Parasystem.

Grundsätzlich gilt, dass die Energie für das Triplettssystem kleiner ist als für das entsprechende Singulettssystem; dies liegt an der unterschiedlichen elektrostatischen Wechselwirkungsenergie zwischen den beiden Elektronen bei paralleler und antiparalleler Spineinstellung.

6.2 Symmetrie des Grundzustands

Im folgenden soll der Grundzustand näher betrachtet werden, da dies der Zustand mit der höchstmöglichen Symmetrie ist; hierbei soll für den relativistischen Fall die idealisierte Annahme verwendet werden, dass die Spins der beiden Elektronen in

entgegengesetzte Richtungen zeigen. Aufgrund des zeitlichen und räumlichen Verhaltens der Wellenfunktionen ψ_a (5.3) muss die Symmetrie des Zweiteilchenzustands im räumlichen Anteil $\psi_a(\vec{r})$ der Wellenfunktion $\psi_a(\vec{r}, t)$ verankert sein. Die vierkomponentigen räumlichen Wellenfunktionen $\psi_a(\vec{r})$ werden zunächst wieder durch jeweils zwei Pauli-Spinoren ${}^{(a)}\phi_{\pm}(\vec{r})$ ausgedrückt $\psi_a(\vec{r}) = ({}^{(a)}\phi_+(\vec{r}), {}^{(a)}\phi_-(\vec{r}))^T$, vergl. (5.14). Das erste Teilchen soll Spin nach oben haben, d.h. die beiden Komponenten des Pauli-Spinors werden folgendermaßen gewählt:

$${}^{(1)}\phi_+(\vec{r}) = {}^{(1)}R_+(r) \cdot \zeta_0^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \quad (6.1a)$$

$${}^{(1)}\phi_-(\vec{r}) = -i {}^{(1)}R_-(r) \cdot \zeta_1^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} . \quad (6.1b)$$

Die Einteilchen-Eigen-spinoren $\zeta_l^{j,m}$ des Drehimpulsoperators können wie folgt dargestellt werden:

$$\begin{aligned} \zeta_0^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \zeta_0^{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \zeta_1^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} &= \frac{-1}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} \cos \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta \end{pmatrix} & \zeta_1^{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} -e^{-i\phi} \sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (6.2a)$$

und gehorchen dabei den Relationen [11]

$$\vec{J}^2 \zeta_l^{j,m} = j(j+1) \hbar^2 \cdot \zeta_l^{j,m} \quad (6.3a)$$

$$J_z \zeta_l^{j,m} = m \hbar \cdot \zeta_l^{j,m} \quad (6.3b)$$

$$\vec{L}^2 \zeta_l^{j,m} = l(l+1) \zeta_l^{j,m} \quad (6.3c)$$

$$\vec{S}^2 \zeta_l^{j,m} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \hbar^2 \cdot \zeta_l^{j,m} , \quad (6.3d)$$

mit dem ‘‘Kompositionsgesetz’’ für Spin- $(\frac{1}{2})$ Teilchen

$$j = l \pm \frac{1}{2} . \quad (6.4)$$

Im Moment sollen nur radialsymmetrische Lösungen untersucht werden, deshalb hängen die *radialen Ansatzfunktionen* ${}^{(a)}R_{\pm}$ nur vom Radius r ab. Die Frage nach der Existenz nicht-radialsymmetrischer Lösungen wird in Abschnitt 6.7 erörtert.

Da die Spins der beiden Teilchen antiparallel sind, ergibt sich für das zweite Teilchen folgender Ansatz:

$${}^{(2)}\phi_+(\vec{r}) = {}^{(2)}R_+(r) \cdot \zeta_0^{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} \quad (6.5a)$$

$${}^{(2)}\phi_-(\vec{r}) = -i {}^{(2)}R_-(r) \cdot \zeta_1^{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} . \quad (6.5b)$$

Unter Verwendung der Ansätze für die Pauli-Spinoren lassen sich die entsprechenden Ladungsdichten ${}^{(a)}k_0(\vec{r})$ und die Ströme $\vec{k}_a(\vec{r})$ berechnen

$${}^{(a)}k_0(\vec{r}) \doteq \bar{\psi}_a(\vec{r})\gamma_0\psi_a(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \left(({}^{(a)}R_+(r))^2 + ({}^{(a)}R_-(r))^2 \right) \quad (6.6a)$$

$$\vec{k}_a(\vec{r}) \doteq \bar{\psi}_a(\vec{r})\vec{\gamma}\psi_a(\vec{r}) = k_a(r)\vec{V}_p, \quad (6.6b)$$

wobei das Vektorfeld \vec{V}_p mit den Basisvektoren $\{\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z\}$ eines kartesischen Koordinatensystems $\{x, y, z\}$ folgendermaßen ausgedrückt wird:

$$\vec{V}_p = -\frac{y}{r}\vec{e}_x + \frac{x}{r}\vec{e}_y \quad (6.7)$$

und einen zirkularen Fluss um die z -Achse darstellt. Die sphärisch-symmetrischen Vorfaktoren k_a können mit Hilfe der radialen Ansatzfunktionen ${}^{(a)}R_{\pm}(r)$ folgendermaßen ausgedrückt werden:

$$k_1(r) = \frac{1}{2\pi} ({}^{(1)}R_+(r) \cdot {}^{(1)}R_-(r)) \quad (6.8a)$$

$$k_2(r) = -\frac{1}{2\pi} ({}^{(2)}R_+(r) \cdot {}^{(2)}R_-(r)) . \quad (6.8b)$$

Die Form des Vektorfeldes (6.7) zeigt, dass die elektromagnetischen Kreisströme $\vec{k}_a(\vec{r})$ (6.6) um die z -Achse orientiert sind. Auch die Ladungsdichte h_0 und der Austauschstrom $\vec{h}(\vec{r})$ lassen sich unter Verwendung des obigen Ansatzes (6.1) und (6.5) berechnen. Dabei zeigt es sich, dass die Ladungsdichte h_0 für diesen Ansatz identisch Null wird:

$$h_0(\vec{r}) = i\bar{\psi}_1(\vec{r})\gamma^0\psi_2(\vec{r}) \equiv 0 . \quad (6.9)$$

(Die Folgen der verschwindenden Ladungsdichte $h_0(\vec{r})$ werden im Abschnitt 6.6 näher erläutert.)

Der Austauschstrom $\vec{h}(\vec{r})$ lässt sich in einer ähnlichen Form darstellen, wie die elektromagnetischen Ströme $\vec{k}_a(\vec{r})$ (6.6b):

$$\vec{h}(\vec{r}) = i\bar{\psi}_1(\vec{r})\vec{\gamma}\psi_2(\vec{r}) = ih(r)\vec{W}_p^* , \quad (6.10)$$

wobei das Vektorfeld \vec{W}_p definiert ist als

$$\vec{W}_p \doteq -\frac{z}{r}(\vec{e}_x + i\vec{e}_y) + \frac{x - iy}{r}\vec{e}_z . \quad (6.11)$$

Der Vorfaktor $h(r)$ ergibt sich wie folgt:

$$h(r) \doteq \frac{\mathbb{R}_+(r)}{4\pi} , \quad (6.12)$$

mit der Radialfunktion $\mathbb{R}_+(r)$, die auf folgende Weise mit den radialen Ansatzfunktionen ${}^{(a)}R_{\pm}(r)$ zusammenhängt:

$$\mathbb{R}_+ \doteq {}^{(1)}R_+(r) \cdot {}^{(2)}R_-(r) + {}^{(2)}R_+(r) \cdot {}^{(1)}R_-(r) . \quad (6.13)$$

Der Austauschstrom lässt sich damit in einen Realteil und einen Imaginärteil wie folgt aufspalten:

$$\vec{h}(\vec{r}) = \vec{\xi}(\vec{r}) + i\vec{\eta}(\vec{r}) \quad (6.14a)$$

$$\vec{\xi}(\vec{r}) \doteq \frac{1}{4\pi r} \mathbb{R}_+(r) [-z \cdot \vec{e}_y + y \cdot \vec{e}_z] \quad (6.14b)$$

$$\vec{\eta}(\vec{r}) \doteq \frac{1}{4\pi r} \mathbb{R}_+(r) [-z \cdot \vec{e}_x + x \cdot \vec{e}_z] . \quad (6.14c)$$

Entsprechend dem Ansatz für die elektromagnetischen Ströme $\vec{k}_a(\vec{r})$ (6.6b) verwendet man nun folgenden Ansatz für die elektromagnetischen Vektorpotentiale $\vec{A}_a(\vec{r})$ ($a = 1, 2$):

$$\vec{A}_a(\vec{r}) = rA_a(r) \cdot \vec{V}_p \quad (6.15)$$

und genauso für das Austausch-Vektorpotential $\vec{B}(\vec{r})$ entsprechend dem Ansatz für den Austauschstrom $\vec{h}(\vec{r})$ (6.10):

$$\vec{B}(\vec{r}) = irB(r) \cdot \vec{W}_p . \quad (6.16)$$

Indem die elektromagnetischen Kreisströme $\vec{k}_a(\vec{r})$ (6.6) um die z -Achse orientiert sind, wird diese ausgezeichnet; für den isotropen Grundzustand erwartet man jedoch, dass alle drei Koordinaten-Achsen gleichwertig sind. Dies erreicht man dadurch, dass bei dieser Betrachtung die Austauschströme $\vec{h}(\vec{r})$ hinzugenommen werden:

Offensichtlich beschreiben der Realteil $\vec{\xi}(\vec{r})$ (6.14b) und der Imaginärteil $\vec{\eta}(\vec{r})$ (6.14c) des Austauschstroms $\vec{h}(\vec{r})$ (6.14a) denselben zirkularen Fluss um die x -Achse bzw. die y -Achse wie der elektromagnetische Strom $\vec{k}_a(\vec{r})$ (6.6b) um die z -Achse. Der Betrag dieser Vektoren $\vec{\xi}(\vec{r})$, $\vec{\eta}(\vec{r})$ und $\vec{k}_a(\vec{r})$ stimmt überein, wenn man annimmt, dass die radialen Ansatz-Funktionen ${}^{(a)}R_{\pm}(r)$ paarweise identisch sind und sich die Wellenfunktionen der Elektronen damit nur in ihrer Spinorientierung unterscheiden:

$${}^{(1)}R_+(r) \equiv {}^{(2)}R_+(r) \doteq R_+(r) \quad (6.17a)$$

$${}^{(1)}R_-(r) \equiv {}^{(2)}R_-(r) \doteq R_-(r) . \quad (6.17b)$$

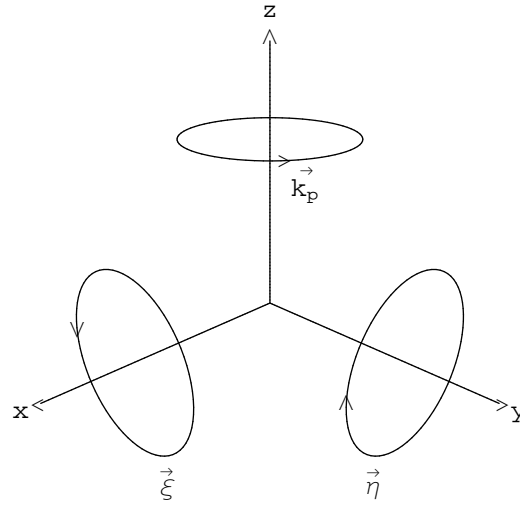


Abbildung 6.1: **Isotropie des Grundzustands**

Die Flüsse $\vec{k}_p(\vec{r})$ (6.18), $\vec{\xi}(\vec{r})$ (6.14b) und $\vec{\eta}(\vec{r})$ (6.14c) zirkulieren auf die gleiche Weise um die drei Koordinaten-Achsen, so dass keine Achse bevorzugt wird.

Damit erhält man folgende Beziehung zwischen den elektromagnetischen Strömen \vec{k}_a (6.6b):

$$\vec{k}_1(\vec{r}) = -\vec{k}_2(\vec{r}) \equiv \vec{k}_p(\vec{r}) . \quad (6.18)$$

Gleichung (6.18) definiert damit die *Grundzustandsisotropie*, die darin besteht, dass die drei identischen Flüsse \vec{k}_p , $\vec{\xi}(\vec{r})$ und $\vec{\eta}(\vec{r})$ geometrisch so um die Koordinatenachsen angeordnet sind, dass keine der Achsen bevorzugt wird, wie Figur 6.1 zeigt (siehe auch [15]). Diese Grundzustandsisotropie (6.17) ermöglicht nun eine *exakte* Lösung des Energieeigenwertproblems für den Ansatz (6.1) und (6.5), denn wenn man nun die Ansätze für die Ströme \vec{k}_a (6.6b), \vec{h} (6.10) zusammen mit dem Ansatz für die Potentiale \vec{A}_a (6.15) und \vec{B} (6.16) in die Quellgleichungen für die RST-Ströme (3.30) einsetzt, so erhält man folgende Bedingung für die Potentiale $A_a(r)$, $B(r)$ und die Ströme $k_a(r)$, $h(r)$:

$$h(r) [A_1(r) - A_2(r)] = B(r) [k_1(r) - k_2(r)] . \quad (6.19)$$

Diese Bedingung wird von der Grundzustandskonfiguration (6.17) erfüllt, indem gilt:

$$h(r) \equiv k_1(r) \equiv -k_2(r) = \frac{R_+(r) \cdot R_-(r)}{2\pi} \quad (6.20a)$$

$$A_1(r) \equiv -A_2(r) \equiv B(r) . \quad (6.20b)$$

Es zeigt sich also, dass man einen beschränkten Satz von exakten Lösungen für das RST-Eigenwertproblem mit Hilfe des Ansatzes (6.1) und (6.5) und unter Verwendung der Grundzustandskonfiguration (6.17) erzeugen kann. Es ist damit klar, dass Ansatz (6.1) und (6.5) für den allgemeinen Fall (${}^{(1)}R_{\pm}(r) \neq {}^{(2)}R_{\pm}(r)$) nicht zu einer exakten Lösung des Eigenwertproblems führen kann (sondern bestenfalls zu einer näherungsweise Lösung).

Im Grundzustand des Parasytems sind aufgrund der Tatsache, dass beide Elektronen von der Spinrichtung abgesehen denselben Quantenzustand besetzen, nicht nur die radialen Ansatzfunktionen ${}^{(a)}R_{\pm}(r)$, vergl. (6.17), identisch, sondern auch die Masseeigenwerte M_a (5.3a)-(5.3b)

$$M_1 = M_2 \doteq M''_{n-1} \quad (6.21)$$

$$(n = 1, 2, 3, \dots);$$

und auch die beiden Ladungsdichten ${}^{(a)}k_0(r)$ fallen zur selben Verteilung ${}^{(p)}k_0(r)$ zusammen:

$${}^{(1)}k_0(r) \equiv {}^{(2)}k_0(r) \doteq {}^{(p)}k_0(r) \quad (6.22)$$

mit

$${}^{(p)}k_0(r) = \frac{(R_+(r))^2 + (R_-(r))^2}{4\pi}; \quad (6.23)$$

womit auch die entsprechenden elektrostatischen Potentiale ${}^{(a)}A_0(r)$ identisch werden:

$${}^{(1)}A_0(r) \equiv {}^{(2)}A_0(r) \doteq {}^{(p)}A_0(r). \quad (6.24)$$

Die moderne spektroskopische Schreibweise für die Singulettzustände, bei denen sich die beiden Elektronen in Zuständen mit derselben Quantenzahl n befinden und die sich also in der RST durch den Ansatz (6.1) und (6.5) exakt beschreiben lassen, lautet $ns^2\ ^1S_0$. Der Grundzustand ($n = 1$) ist der Singulettzustand mit dem niedrigsten Masseeigenwert M''_0 (6.21). Für die Zustände $n_1s n_2s\ ^1S_0$ mit unterschiedlichen Quantenzahlen n_a , kann der gezeigte Ansatz nicht exakt sein, da die radialen Ansatzfunktionen ${}^{(a)}R_{\pm}$ der beiden Elektronen in diesem Fall nicht mehr identisch wären und damit Bedingung (6.20a) nicht mehr erfüllt wäre; er könnte allerdings als eine sinnvolle Testfunktion zur Bestimmung *näherungsweise* Variationslösungen des Eigenwertproblems verwendet werden, siehe [4].

Um nun die Eigenwertgleichungen zu erhalten, setzt man obige Ansätze für Wellenfunktionen, Potentiale und Masseeigenwerte entweder in das Dirac-System (5.15) ein, um daraus Differentialgleichungen für die radialen Ansatzfunktionen ${}^{(a)}R_{\pm}(r)$

abzuleiten, oder man setzt den Ansatz in das Wirkungsintegral W_{RST} (4.41) ein und führt das Variationsverfahren durch. Die daraus resultierenden Differentialgleichungen für die radialen Ansatzfunktionen ${}^{(a)}R_{\pm}(r)$ und die Potentiale $A_a(r)$, $B(r)$ sind dann exakt für die Zustände mit gleichen Hauptquantenzahlen $ns^2\ ^1S_0$.

6.2.1 Eigenschaften der $ns^2\ ^1S_0$ Zustände von heliumähnlichen Ionen

An dieser Stelle sollen Eigenschaften des isotropen Grundzustands von heliumähnlichen Ionen noch einmal tabellarisch zusammengestellt werden:

elektrostatisches Potential ${}^{(a)}A_0(r)$	${}^{(1)}A_0(r) \equiv {}^{(2)}A_0(r) \doteq {}^{(p)}A_0(r)$
magnetostatisches Potential $A_a(r)$	$A_1(r) \doteq A_p(r) \equiv -A_2(r)$
Austauschpotential $B(r)$	$B(r) \equiv A_1(r) \equiv A_p(r)$
Stromdichten ${}^{(a)}k_0(r)$	${}^{(1)}k_0(r) \equiv {}^{(2)}k_0(r) \doteq {}^{(p)}k_0(r)$
Teilchenströme $k_a(r)$	$k_1(r) \doteq k_p(r) \equiv -k_2(r)$
Austauschströme $h(r)$	$h(r) \equiv k_1(r) \equiv k_p(r)$
Austauschstromdichte $h_0(r)$	$h_0(r) \equiv 0$
Masseeigenwerte M_a	$M_1 \equiv M_2 \doteq M''$

Tabelle 6.1: Zusammenfassung der Eigenschaften für $ns^2\ ^1S_0$ -Zustände von heliumähnlichen Ionen

6.3 Masseeigenwertgleichungen

Setzt man in die Lagrange-Funktion (4.44) den obigen stationären Ansatz (5.14), (6.1), (6.5) für die Wellenfunktion $\psi_a(\vec{r})$ und den Ansatz (6.15)-(6.16) für die Potentiale $A^a_{\mu} = \left\{ {}^{(a)}A_0(r); -\vec{A}_a(\vec{r}) \right\}$ und $B_{\mu} = \left\{ B_0(r); -\vec{B}(\vec{r}) \right\}$ ein, so wird die Lagrange-Funktion natürlich zeitunabhängig, d.h. das Wirkungsintegral W_{RST} faktorisiert in einen zeitlichen und einen räumlichen Anteil

$$W_{RST} = \int dt \int d^3\vec{r} L_{RST}(\vec{r}) \doteq \int dt \hat{W}_{RST} \quad (6.25a)$$

$$\hat{W}_{RST} \doteq \int d^3\vec{r} L_{RST}(\vec{r}), \quad (6.25b)$$

sodass sich das Variationsprinzip (4.40) jetzt nur auf den rein räumlichen Anteil \hat{W}_{RST} bezieht:

$$\delta\hat{W}_{RST} = 0. \quad (6.26)$$

Führt man nun das Extremalisierungsverfahren im Detail durch, so erhält man die Masseeigenwertgleichungen für die radialen Funktionen ${}^{(a)}R_{\pm}(r)$ und die verallgemeinerten Poisson-Gleichungen für die elektromagnetischen Potentiale $\{ {}^{(a)}A_0(r); -\vec{A}_a(\vec{r}) \}$ und das Austauschpotential $B(r)$. Dieser gekoppelte Satz von Gleichungen bildet das exakte RST-Eigenwertproblem für die Feldkonfigurationen mit der isotropen Geometrie des Grundzustands (6.17), wie oben aufgestellt. Für andere Feldkonfigurationen (i.e. ${}^{(1)}R_{\pm}(r) \neq {}^{(2)}R_{\pm}(r)$, $M_1 \neq M_2$) sind die folgenden Masseeigenwertgleichungen nur eine Näherung (*sphärisch symmetrische Näherung*).

Der Satz von Masseeigenwertgleichungen sieht wie folgt aus:

$$\begin{aligned} \frac{d{}^{(1)}R_+(r)}{dr} + {}^{(1)}R_-(r) \cdot [{}^{(ex)}A_0(r) + {}^{(2)}A_0(r)] \\ - \frac{2}{3}r \{ A_2(r) \cdot {}^{(1)}R_+(r) - 2B(r) \cdot {}^{(2)}R_+(r) \} = -\frac{(M + M_1)c}{\hbar} \cdot {}^{(1)}R_-(r) \end{aligned} \quad (6.27a)$$

$$\begin{aligned} \frac{d{}^{(2)}R_+(r)}{dr} + {}^{(2)}R_-(r) \cdot [{}^{(ex)}A_0(r) + {}^{(1)}A_0(r)] \\ + \frac{2}{3}r \{ A_1(r) \cdot {}^{(2)}R_+(r) + 2B(r) \cdot {}^{(1)}R_+(r) \} = -\frac{(M + M_2)c}{\hbar} \cdot {}^{(2)}R_-(r) \end{aligned} \quad (6.27b)$$

$$\begin{aligned} \frac{d{}^{(1)}R_-(r)}{dr} + \frac{2}{r} {}^{(1)}R_-(r) - {}^{(1)}R_+(r) \cdot [{}^{(ex)}A_0(r) + {}^{(2)}A_0(r)] \\ + \frac{2}{3}r \{ A_2(r) \cdot {}^{(1)}R_-(r) - 2B(r) \cdot {}^{(2)}R_-(r) \} = \frac{(M_1 - M)c}{\hbar} \cdot {}^{(1)}R_+(r) \end{aligned} \quad (6.27c)$$

$$\begin{aligned} \frac{d{}^{(2)}R_-(r)}{dr} + \frac{2}{r} {}^{(2)}R_-(r) - {}^{(2)}R_+(r) \cdot [{}^{(ex)}A_0(r) + {}^{(1)}A_0(r)] \\ - \frac{2}{3}r \{ A_1(r) \cdot {}^{(2)}R_-(r) + 2B(r) \cdot {}^{(1)}R_-(r) \} = \frac{(M_2 - M)c}{\hbar} \cdot {}^{(2)}R_+(r). \end{aligned} \quad (6.27d)$$

Die Untermenge der isotropen Konfigurationen ($n = 1, 2, 3, \dots$) wurde definiert durch die Gleichungen (6.17) zusammen mit (6.20) und (6.21). Durch diese restriktiven Bedingungen verschmelzen die vier Masseeigenwertgleichungen (6.27) für die radialen Ansatzfunktionen ${}^{(a)}R_{\pm}(r)$ zu nur zwei Gleichungen für die beiden verbleibenden Funktionen $R_{\pm}(r)$ mit nur noch einem Masseeigenwert M'' (6.21)

$$\frac{dR_+(r)}{dr} + R_-(r) \cdot [{}^{(ex)}A_0(r) + {}^{(p)}A_0(r)] + 2rB(r)R_+(r)$$

$$= -\frac{(M + M'')c}{\hbar} \cdot R_-(r) \quad (6.28a)$$

$$\begin{aligned} \frac{dR_-(r)}{dr} + \frac{2}{r}R_-(r) - R_+(r) \cdot [{}^{(ex)}A_0(r) + {}^{(p)}A_0(r)] - 2rB(r)R_-(r) \\ = -\frac{(M - M'')c}{\hbar} \cdot R_+(r) . \end{aligned} \quad (6.28b)$$

6.4 Poisson-Gleichungen

Da die radialen Ansatzfunktionen an die elektrostatischen Potentiale ${}^{(a)}A_0(r)$, magnetostatischen Potentiale $A_a(r)$ und das Austauschpotential $B(r)$ ankoppeln, müssen die Masseeigenwertgleichungen durch die (verallgemeinerten) Poisson-Gleichungen für die Potentiale ergänzt werden.

6.4.1 Poisson-Gleichung für die elektrostatischen Potentiale

$${}^{(a)}A_0(r)$$

Die gewünschten Poisson-Gleichungen erhält man aus den Maxwell-Gleichungen (3.36), indem man die Feldstärken $F^a{}_{\mu\nu}$, $G_{\mu\nu}$ (3.11) durch die Potentiale $A^a{}_{\mu}$, B_{μ} in ihrer stationären isotropen Form ausdrückt. Damit lauten die gewünschten Poisson-Gleichungen für die elektrostatischen Potentiale ${}^{(a)}A_0(r)$ folgendermaßen:

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) {}^{(1)}A_0(r) + \frac{8}{3}r^2B(r)^2 \left[\frac{1}{a_M} - ({}^{(1)}A_0(r) - {}^{(2)}A_0(r)) \right] \\ = 4\pi\alpha_s \cdot e^{-2u} \{ K_s(u) \cdot {}^{(2)}k_0(r) - K_p(u) \cdot {}^{(1)}k_0(r) \} \end{aligned} \quad (6.29a)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) {}^{(2)}A_0(r) - \frac{8}{3}r^2B(r)^2 \left[\frac{1}{a_M} - ({}^{(1)}A_0(r) - {}^{(2)}A_0(r)) \right] \\ = 4\pi\alpha_s \cdot e^{-2u} \{ K_s(u) \cdot {}^{(1)}k_0(r) - K_p(u) \cdot {}^{(2)}k_0(r) \} , \end{aligned} \quad (6.29b)$$

mit der Selbstkopplungskonstanten $K_s(u)$ (3.54), der Paarkopplungskonstanten K_p (3.53) und der *Austauschlänge* a_M , die definiert ist als

$$a_M \doteq \frac{\hbar}{(M_1 - M_2)c} . \quad (6.30)$$

Als einen Konsistenz-Check für die elektrostatischen Poisson-Gleichungen, kann man die beiden Gleichungen (6.29a) und (6.29b) addieren und erhält so die elektrostatische Gesamt-Poisson-Gleichung

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) A_0(r) = 4\pi\alpha_s \cdot j_0(r) , \quad (6.31)$$

d.h. die Poisson-Gleichung für das elektrostatische Gesamtpotential $A_0(r)$ (3.14)

$$A_0(r) = {}^{(1)}A_0(r) + {}^{(2)}A_0(r) ; \quad (6.32)$$

dessen Quelle die Gesamtstromdichte $j_0(r)$

$$j_0(r) = {}^{(1)}k_0(r) + {}^{(2)}k_0(r) \quad (6.33)$$

ist (vergl. (3.20)). Natürlich ist die Gesamt-Poisson-Gleichung nichts anderes als die Zeitkomponente der Gesamt-Maxwell-Gleichung (4.27a).

Im isotropen Fall fallen die elektrostatischen Potentiale ${}^{(a)}A_0(r)$ zu einem Potential ${}^{(p)}A_0$ zusammen (6.24), sodass die beiden elektrostatischen Poisson-Gleichungen (6.29a) und (6.29b) zu einer einzigen für dieses gemeinsame Potential ${}^{(p)}A_0(r)$ zusammenfallen

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) {}^{(p)}A_0(r) = 4\pi\alpha_s {}^{(p)}k_0(r) . \quad (6.34)$$

Hier wurde auch verwendet, dass die Austauschlänge a_M (6.30) unendlich werden muss ($a_M \rightarrow \infty$), wenn beide Teilchen einen Quantenzustand mit demselben Masseigenwert M'' (6.21) besetzen.

6.4.2 Magnetische Poisson-Gleichungen

6.4.2.1 Poisson-Gleichung für die magnetostatischen Potentiale $A_a(r)$

Nun müssen die Poisson-Gleichungen für die magnetostatischen Potentiale $A_a(r)$ (6.15) näher bestimmt werden, was mit derselben Vorgehensweise erfolgt, wie für die elektrostatischen Potentiale. Es ergibt sich damit:

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{4}{r} \frac{d}{dr} \right) A_1(r) + 6B^2(r) \left[1 - \frac{1}{3}r^2 (A_1(r) - A_2(r)) \right] \\ = 4\pi\alpha_s \cdot \frac{e^{-2u}}{r} \{ K_s(u) \cdot k_2(r) - K_p(u) \cdot k_1(r) \} \end{aligned} \quad (6.35a)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{4}{r} \frac{d}{dr} \right) A_2(r) - 6B^2(r) \left[1 - \frac{1}{3}r^2 (A_1(r) - A_2(r)) \right] \\ = 4\pi\alpha_s \cdot \frac{e^{-2u}}{r} \{ K_s(u) \cdot k_1(r) - K_p(u) \cdot k_2(r) \} . \end{aligned} \quad (6.35b)$$

Auch hier lässt sich die Konsistenz der magnetostatischen Poisson-Gleichungen überprüfen, indem man die beiden Gleichungen addiert und so die Poisson-Gleichung für das magnetostatische Gesamtpotential $A(r)$ erhält

$$A(r) = A_1(r) + A_2(r) , \quad (6.36)$$

vergl. (3.14), was nichts anderes ist, als die räumliche Komponente der Gesamt-Maxwell-Gleichung (4.27a):

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{4}{r} \frac{d}{dr}\right) A(r) = 4\pi\alpha_s \cdot \frac{j(r)}{r} \quad (6.37)$$

$$(j(r) \doteq k_1(r) + k_2(r)) .$$

6.4.2.2 Poisson-Gleichung für das magnetische Austauschpotential $B(r)$

Und schließlich erhält man die Poisson-Gleichung für das magnetische Austauschpotential $B(r)$

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{4}{r} \frac{d}{dr}\right) B(r) + B(r) \left\{ \left[\frac{1}{a_M} - ({}^{(1)}A_0(r) - {}^{(2)}A_0(r)) \right]^2 + \right. \\ \left. + 3(A_1(r) - A_2(r)) - r^2 \left[2B^2(r) + \frac{1}{2}(A_1(r) - A_2(r)) \right]^2 \right\} = \alpha_s \cdot e^{-2u} \frac{\mathbb{R}_+(r)}{r}, \quad (6.38)$$

wobei die radiale Ansatzfunktion $\mathbb{R}_+(r)$ wie in (6.13) definiert ist.

Man könnte vermuten, dass man auch für die Zeitkomponente $B_0(r)$ des Austauschpotentials $B_\mu(\vec{r})$ (5.8a) eine Poisson-Gleichung aufstellen muss. Diese würde dann jedoch an die Zeitkomponente $h_0(\vec{r})$ des Austauschstroms $h_\mu(\vec{r})$ (5.7b) ankopeln, wobei diese Komponente für den momentan betrachteten stationären Zustand mit $h_0(\vec{r}) \equiv 0$ (6.9) verschwindet. Deshalb ist es konsistent, auch die Zeitkomponente des Austauschpotentials gleich 0 zu setzen ($B_0(r) \equiv 0$). Dies passt auch zu der Annahme, dass der Grundzustand über die höchst mögliche Symmetrie verfügt; betrachtet man z.B. das elektrostatische Feld $\vec{E}_a(\vec{r}) = \{ {}^{(a)}E^j(\vec{r}) \} \doteq \{ {}^{(a)}F_{0j}(\vec{r}) \}$ (4.37a), dann lautet dieses ausgedrückt mit Hilfe der entsprechenden Potentiale:

$$\vec{E}_1(\vec{r}) = -\vec{\nabla} {}^{(1)}A_0(\vec{r}) - i \left[B_0(\vec{r}) \cdot \vec{B}^*(\vec{r}) - \dot{B}_0(\vec{r}) \cdot \vec{B}(\vec{r}) \right] \quad (6.39a)$$

$$\vec{E}_2(\vec{r}) = -\vec{\nabla} {}^{(2)}A_0(\vec{r}) + i \left[B_0(\vec{r}) \cdot \vec{B}^*(\vec{r}) - \dot{B}_0(\vec{r}) \cdot \vec{B}(\vec{r}) \right], \quad (6.39b)$$

d.h., sogar wenn beide elektrostatischen Potentiale ${}^{(a)}A_0(\vec{r})$ und das elektrische Austauschpotential $B_0(\vec{r})$ sphärisch symmetrisch wären, wäre das resultierende elektrische Feld $\vec{E}_a(\vec{r})$ nicht sphärisch symmetrisch wegen der Anwesenheit des magnetischen Austauschfeldes $\vec{B}(\vec{r})$. Damit die elektrostatischen Felder $\vec{E}_a(\vec{r})$ sphärisch symmetrisch sind, setzt man deshalb $B_0(\vec{r}) \equiv 0$ und nimmt sphärische Symmetrie für die elektrostatischen Potentiale ${}^{(a)}A_0(\vec{r})$ an.

6.4.2.3 Isotrope magnetische Poisson-Gleichung

Unter Berücksichtigung der Isotropie fallen nun alle magnetischen Poisson-Gleichungen (6.35) und (6.38) zu einer einzigen für das Austauschpotential $B(r)$ zusammen, sodass beide magnetischen Potentiale $A_a(r)$ mit dem Austauschpotential $B(r)$ (6.20b) übereinstimmen:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{4}{r} \frac{d}{dr} \right) B(r) + 6B^2(r) \left[1 - \frac{2}{3} r^2 B(r) \right] = 2\alpha_s e^{-2u} \frac{R_+(r) \cdot R_-(r)}{r}. \quad (6.40)$$

6.5 Energiefunktionale

In Kapitel 3 wurde bereits die Form des Energiefunktionals E_{TX} (4.56) für den Zwei-Fermionenfall hergeleitet. Mit Hilfe dieses Energiefunktionals sollen nun die Energieniveaus eines heliumähnlichen Systems im Grundzustand bestimmt werden. Dies erreicht man, indem man das Energiefunktional E_{TX} zunächst auf stationäre Zustände (vergl. Kapitel 5) spezialisiert und dazu von einem externen Potential in Form des Coulomb-Potentials des Kerns (5.1) mit ${}^{(ex)}A_0(\vec{r}) = z_{ex} \frac{\alpha_s}{r}$ ($\vec{A}_{ex}(\vec{r}) \doteq \{ {}^{(ex)}A^j(\vec{r}) \} \equiv 0$) ausgeht, wobei der Spin des Kerns vernachlässigt wird. Hierbei ist es hilfreich, die verschiedenen Beiträge zur Gesamtenergie (4.56) ($E_{TX} = E_D + E_G + E_{sx}$) einzeln zu untersuchen. Bezieht man zusätzlich noch die Isotropie der $n s^2 {}^1S_0$ -Konfigurationen mit ein, so erhält man das Gesamtenergiefunktional, das für die späteren numerischen Berechnungen der Energieniveaus eines heliumähnlichen Systems im Grundzustand ausschlaggebend ist.

6.5.1 Materieenergie E_D

Zunächst betrachtet man die Materieenergie E_D ; sie läßt sich aus der Energiedichte ${}^{(D)}T_{00}(\vec{r})$ (4.25) durch Integration herleiten (vergl. 4.4a). Setzt man nun in die Gleichung für die Energiedichte ${}^{(D)}T_{00}(\vec{r})$ den stationären Ansatz für die Wellenfunktionen und Potentiale ein, so läßt sich die Materieenergiedichte ${}^{(D)}T_{00}(\vec{r})$ als Summe von Einteilchenbeiträgen ${}^{(D)}T_{00(a)}$ folgendermaßen schreiben:

$${}^{(D)}T_{00}(\vec{r}) = {}^{(D)}T_{00(1)} + {}^{(D)}T_{00(2)}, \quad (6.41)$$

mit den Einteilchenbeiträgen

$${}^{(D)}T_{00(1)} = \hbar c {}^{(1)}k_0(\vec{r}) \left[\frac{M_1 c}{\hbar} + {}^{(ex)}A_0(\vec{r}) - {}^{(2)}A_0(\vec{r}) \right] \quad (6.42a)$$

$${}^{(D)}T_{00(2)} = \hbar c {}^{(2)}k_0(\vec{r}) \left[\frac{M_2 c}{\hbar} + {}^{(ex)}A_0(\vec{r}) - {}^{(1)}A_0(\vec{r}) \right], \quad (6.42b)$$

d.h. die Materieenergie E_D (4.4a) besteht ebenfalls aus einer Summe von zwei Einzelteilchenbeiträgen, die wie folgt definiert sind:

$$E_{D(1)} = \int d^3\vec{r} {}^{(D)}T_{00(1)} \quad (6.43a)$$

$$E_{D(2)} = \int d^3\vec{r} {}^{(D)}T_{00(2)}; \quad (6.43b)$$

und damit setzt sich E_D folgendermaßen zusammen:

$$\begin{aligned} E_D &= E_{D(1)} + E_{D(2)} \\ &= \hat{z}_1 M_1 c^2 + \hat{z}_2 M_2 c^2 + \hbar c \int d^3\vec{r} {}^{(ex)}A_0(\vec{r}) \cdot ({}^{(1)}k_0(\vec{r}) + {}^{(2)}k_0(\vec{r})) \\ &\quad + \hbar c \int d^3\vec{r} {}^{(2)}A_0(\vec{r}) \cdot {}^{(1)}k_0(\vec{r}) + \hbar c \int d^3\vec{r} {}^{(1)}A_0(\vec{r}) \cdot {}^{(2)}k_0(\vec{r}). \end{aligned} \quad (6.44)$$

Die Normierungsparameter \hat{z}_a der Masseterme in der Materieenergie E_D (6.44) können leicht hergeleitet werden durch Integration über die Dichten ${}^{(D)}T_{00(a)}$ (6.42) mit ($a = 1, 2$)

$$\hat{z}_a = \int d^3\vec{r} {}^{(a)}k_0(\vec{r}). \quad (6.45)$$

Allerdings stimmt dieses Integral im allgemeinen nicht mit der Normierungsbedingung (3.44) überein, die ja nur für die modifizierten Teilströme ${}^{(a)}l_0(\vec{r})$ und nicht für die Dirac-Ströme ${}^{(a)}k_0(\vec{r})$ gilt. Man kann jedoch ausnützen, dass hier ein stationäres System betrachtet wird und damit ein Zeitschnitt $t = const$ als Hyperfläche für die Integration in (3.44) gewählt werden kann, was zu folgender Form der Normierungsbedingung führt:

$$\int d^3\vec{r} {}^{(a)}l_0(\vec{r}) = 1. \quad (6.46)$$

wobei für die modifizierten Teilchenströme ${}^{(a)}l_0$ gilt:

$${}^{(1)}l_0(\vec{r}) = {}^{(1)}k_0(\vec{r}) + G_{0j}(\vec{r}) \quad (6.47a)$$

$${}^{(2)}l_0(\vec{r}) = {}^{(2)}k_0(\vec{r}) - G_{0j}(\vec{r}). \quad (6.47b)$$

Für den hier betrachteten Fall, bei dem sich die beiden Elektronen in Zuständen mit derselben Materieenergie $M_1 = M_2 \equiv M''$ befinden, lässt sich die Normierungsbedingung (6.45) weiter vereinfachen, da dann die Austauschpotentiale B_μ (5.8a) nicht mehr von t abhängen und damit die Austauschfeldstärke G_{0j} (5.9a) verschwindet, d.h. man erhält eine Normierungsbedingung direkt für die Dirac-Ströme

$$\int d^3\vec{r} {}^{(a)}k_0(\vec{r}) = 1, \quad (6.48)$$

sodass sich für diesen Fall für den Normierungsparameter (6.45) $\hat{z}_a = 1$ ergeben würde.

Das elektrische Masseäquivalent $M_{a,e}^{(es)}$ der *externen* Wechselwirkungsenergien wird definiert als

$$\hat{z}_1 \cdot M_{1,e}^{(es)} c^2 = -\hbar c \int d^3\vec{r}^{(ex)} A_0(\vec{r}) \cdot {}^{(1)}k_0(\vec{r}) \quad (6.49a)$$

$$\hat{z}_2 \cdot M_{2,e}^{(es)} c^2 = -\hbar c \int d^3\vec{r}^{(ex)} A_0(\vec{r}) \cdot {}^{(2)}k_0(\vec{r}) , \quad (6.49b)$$

und analog wird das Masseäquivalent $M_a^{(e)}$ der *internen* elektromagnetischen Wechselwirkungsenergien definiert als

$$\hat{z}_1 \cdot M_1^{(e)} c^2 = -\hbar c \int d^3\vec{r}^{(2)} A_0(\vec{r}) \cdot {}^{(1)}k_0(\vec{r}) \quad (6.50a)$$

$$\hat{z}_2 \cdot M_2^{(e)} c^2 = -\hbar c \int d^3\vec{r}^{(1)} A_0(\vec{r}) \cdot {}^{(2)}k_0(\vec{r}) . \quad (6.50b)$$

Damit erhält man für die Materieenergie E_D (6.44) folgende Darstellung:

$$E_D = \hat{z}_1 \cdot \left(M_1 - M_{1,e}^{(es)} - M_1^{(e)} \right) c^2 + \hat{z}_2 \cdot \left(M_2 - M_{2,e}^{(es)} - M_2^{(e)} \right) c^2 . \quad (6.51)$$

Berücksichtigt man schließlich noch die Bedingungen für die $ns^2\ ^1S_0$ -Zustände (vergl. Tabelle (6.1)), so vereinfacht sich E_D (6.44) zu:

$$\begin{aligned} E_D &= E_{D(1)} + E_{D(2)} \\ &= 2\hat{z}_p M'' c^2 + 2\hbar c \int d^3r^{(ex)} A_0(r) \cdot {}^{(p)}k_0(r) \\ &\quad + 2\hbar c \int d^3r^{(p)} A_0(r) \cdot {}^{(p)}k_0(r) . \end{aligned} \quad (6.52)$$

mit

$$\hat{z}_p = \int d^3\vec{r}^{(p)} k_0(\vec{r}) \equiv 1 \quad (6.53a)$$

$$M_{p,e}^{(es)} = \hbar c \int d^3r^{(ex)} A_0(r) \cdot {}^{(p)}k_0(r) \quad (6.53b)$$

$$M_p^{(e)} = \hbar c \int d^3r^{(p)} A_0(r) \cdot {}^{(p)}k_0(r) \quad (6.53c)$$

und man erhält folgende Form für die Materieenergie E_D :

$$E_D'' = 2 \cdot \left(M'' - M_{p,e}^{(es)} - M_p^{(e)} \right) c^2 , \quad (6.54)$$

d.h. die Materieenergie E_D besteht aus der Summe der Masseeigenwerte der beiden Teilchen, von der dann für jedes Teilchen noch das Masseäquivalent für die interne elektromagnetische und die externe Wechselwirkungsenergie abgezogen werden muss. Daher besteht E_D erwartungsgemäß nur aus kinetischer Energie und der Energie der Ruhemasse.

6.5.2 Interne Wechselwirkungsenergie E_G

Die interne Wechselwirkungsenergie $E_G = \tilde{E}_R + \hat{E}_R - E_C$ (4.35) lässt sich auch schreiben als $E_G = E_R^{(e)} + E_R^{(m)} - E_C$, wobei sich die interne elektrostatische Energie $E_R^{(e)}$ aus den elektrischen Beiträgen $\tilde{E}_R^{(e)}$ und $\hat{E}_R^{(e)}$ (4.39) und die interne magnetostatische Energie $E_R^{(m)}$ aus den magnetischen Beiträgen $\tilde{E}_R^{(m)}$ und $\hat{E}_R^{(m)}$ (4.39) zusammensetzt:

$$E_R^{(e)} \doteq \hat{E}_R^{(e)} + \tilde{E}_R^{(e)} = -\frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} K_p(u) \int d^3\vec{r} \vec{E}_1(\vec{r}) \cdot \vec{E}_2(\vec{r}) - \frac{\hbar c}{8\pi\alpha_s} K_s(u) \int d^3\vec{r} \left\{ \left(\vec{E}_1(\vec{r}) \right)^2 + \left(\vec{E}_2(\vec{r}) \right)^2 \right\} \quad (6.55a)$$

$$E_R^{(m)} \doteq \hat{E}_R^{(m)} + \tilde{E}_R^{(m)} = -\frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} K_p(u) \int d^3\vec{r} \vec{H}_1(\vec{r}) \cdot \vec{H}_2(\vec{r}) - \frac{\hbar c}{8\pi\alpha_s} K_s(u) \int d^3\vec{r} \left\{ \left(\vec{H}_1(\vec{r}) \right)^2 + \left(\vec{H}_2(\vec{r}) \right)^2 \right\}. \quad (6.55b)$$

Die interne elektrostatische Energie $E_R^{(e)}$ (6.55a) vereinfacht sich für die $ns^2\ ^1S_0$ -Zustände zu

$$E_R^{(e)} \Rightarrow \frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} \int d^3\vec{r} \left(\vec{E}_p(\vec{r}) \right)^2 \equiv -\hbar c \int d^3\vec{r} {}^{(p)}A_0(\vec{r}) \cdot {}^{(p)}k_0(\vec{r}), \quad (6.56)$$

unter Berücksichtigung, dass anstelle der beiden elektrostatischen Felder ein einfaches elektrostatisches Gradientenfeld $\vec{E}_a(\vec{r})$ verbleibt:

$$\vec{E}_1(\vec{r}) \equiv \vec{E}_2(\vec{r}) = -\vec{\nabla} {}^{(p)}A_0(\vec{r}) \doteq \vec{E}_p(\vec{r}) \quad (6.57)$$

(siehe Erläuterungen unter Gleichung (6.39)). Dies erlaubt es nun, die elektrostatische Energie $E_R^{(e)}$ (6.56) in ihr Masseäquivalent (6.50) zu konvertieren, und zwar durch partielle Integration und unter Verwendung der elektrostatischen Poisson-Gleichung (6.34) und der Beziehungen (6.53)

$$E_R^{(e)} = 2 \cdot \frac{1}{2} \hat{z}_p \cdot M_p^{(e)} c^2 \equiv M_p^{(e)} c^2. \quad (6.58)$$

mit $M_p^{(e)} c^2 \doteq \hbar c \int d^3r {}^{(p)}A_0(r) \cdot {}^{(p)}k_0(r)$ aus Gleichung (6.53c).

Auch die interne magnetostatische Energie $E_R^{(m)}$ (6.55a) vereinfacht sich für die $ns^2\ ^1S_0$ -Zustände:

$$E_R^{(m)} \Rightarrow -\frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} e^{2u} \int d^3\vec{r} \left(\vec{H}_p(\vec{r}) \right)^2 \equiv \hbar c \int d^3\vec{r} \vec{A}_p(\vec{r}) \cdot \vec{k}_p(\vec{r})$$

$$-i \frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} e^{2u} \int d^3\vec{r} \vec{H}_p(\vec{r}) \cdot \left[\vec{B}(\vec{r}) \times \vec{B}^*(\vec{r}) \right] \quad (6.59)$$

unter Verwendung folgender Beziehungen:

$$\vec{H}_1(\vec{r}) = \vec{\nabla} \times \vec{A}_p(\vec{r}) + i\vec{B}(\vec{r}) \times \vec{B}^*(\vec{r}) \equiv \vec{H}_p(\vec{r}) \quad (6.60a)$$

$$\vec{H}_2(\vec{r}) = - \left(\vec{\nabla} \times \vec{A}_p(\vec{r}) + i\vec{B}(\vec{r}) \times \vec{B}^*(\vec{r}) \right) \equiv -\vec{H}_p(\vec{r}) . \quad (6.60b)$$

Es fällt auf, dass die elektrostatische Energie $E_R^{(e)}$ (6.56) hier nicht mehr vom Selbstwechselwirkungsparameter u abhängt, im Gegensatz zur magnetostatischen Energie $E_R^{(m)}$ (6.59), die von den Selbstwechselwirkungseffekten weiterhin explizit beeinflusst wird. Der Grund dafür, dass die Symmetrie zwischen elektrostatischer und magnetostatischer Energie hier aufgehoben ist, liegt darin begründet, dass die elektrischen Felder der beiden Elektronen in dieselbe Richtung ausgerichtet sind $\vec{E}_1 = \vec{E}_2 \equiv \vec{E}_p$ (6.57), wohingegen die magnetischen Felder in entgegengesetzte Richtungen weisen $\vec{H}_1 = -\vec{H}_2 \equiv \vec{H}_p$ (6.60a). Damit heben sich für die elektrostatische Energie $E_R^{(e)}$, wenn man die Summe $E_R^{(e)} = \tilde{E}_R^{(e)} + \hat{E}_R^{(e)}$ (6.55a) bildet, die Anteile, die den Selbstwechselwirkungsparameter u enthalten, gerade heraus, wohingegen sie für die magnetostatische Energie $E_R^{(m)} = \tilde{E}_R^{(m)} + \hat{E}_R^{(m)}$ (6.55b) erhalten bleiben.

Betrachtet man nun noch die Austauschenergie E_C (4.39c), so zeigt es sich, dass für den hier vorliegenden Fall, bei dem beide Teilchen denselben Energiezustand besetzten, das elektrische Feld $\vec{X}(\vec{r})$ verschwindet und damit auch der elektrische Anteil $E_C^{(e)} = 0$ der Austauschenergie E_C . E_C wird damit ausschließlich durch das magnetische Austauschfeld \vec{Y} getragen:

$$E_C \Rightarrow E_C^{(m)} = \frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} e^{2u} \int d^3\vec{r} \vec{Y}(\vec{r}) \cdot \vec{Y}(\vec{r}) . \quad (6.61)$$

Interessant ist nun, dass folgende Beziehung zwischen der magnetische Austauschenergie E_C und der magnetostatischen Energie $E_R^{(m)}$ ($\doteq \tilde{E}_R^{(m)} + \hat{E}_R^{(m)}$) (4.39) existiert:

$$E_C = -2E_R^{(m)} = \frac{\hbar c}{2\pi\alpha_s} e^{2u} \int d^3\vec{r} \left(\vec{H}_p(\vec{r}) \right)^2 . \quad (6.62)$$

Dies lässt sich wie folgt zeigen: Aus Gleichung (3.11d) und der Definition des magnetischen Austauschfeldes \vec{Y} (4.38b) ergibt sich für \vec{Y} , ausgedrückt in Potentialen:

$$\vec{Y}(\vec{r}) = \vec{\nabla} \times \vec{B}(\vec{r}) - 2i\vec{A}_p(\vec{r}) \times \vec{B}(\vec{r}) . \quad (6.63)$$

Setzt man diese Gleichung in (6.62) ein, so erhält man folgende Darstellung für die magnetische Austauschenergie

$$E_C = \frac{\hbar c}{2} \int d^3\vec{r} \left\{ \vec{B}^*(\vec{r}) \cdot \vec{h}(\vec{r}) + \vec{B}(\vec{r}) \cdot \vec{h}(\vec{r}) \right\}$$

$$+ i \frac{\hbar c}{2\pi\alpha_s} e^{2u} \int d^3\vec{r} \vec{H}_p(\vec{r}) \cdot \left[\vec{B}(\vec{r}) \times \vec{B}^*(\vec{r}) \right]. \quad (6.64)$$

Der zweite Teil aus Gleichung (6.64) ist damit gleich (minus) zweimal dem zweiten Teil der rechten Seite aus Gleichung (6.59) für $E_R^{(m)}$. Dies gilt ebenfalls für die jeweils ersten Teile der Gleichungen:

$$\frac{\hbar c}{2} \int d^3\vec{r} \left\{ \vec{B}^*(\vec{r}) \cdot \vec{h}^*(\vec{r}) + \vec{B}(\vec{r}) \cdot \vec{h}(\vec{r}) \right\} = -2\hbar c \int d^3\vec{r} \vec{A}_p(\vec{r}) \cdot \vec{k}_p(\vec{r}), \quad (6.65)$$

und man erhält

$$E_C = -2E_R^{(m)}. \quad (6.66)$$

Damit ergibt sich für die interne Wechselwirkungsenergie E_G für die $ns^2\ ^1S_0$ -Zustände:

$$E_G'' = E_R^{(e)} + 3E_R^{(m)}. \quad (6.67)$$

Dieses Ergebnis hat Bestand unabhängig vom Wert des Selbstwechselwirkungsparameters u .

6.5.3 Externe Wechselwirkungsenergie E_{sx}

Nach Gleichung (4.55) besteht die externe Wechselwirkungsenergie E_{sx} aus drei Anteilen, nämlich $E_{es}^{(e)}$, $E_{es}^{(m)}$ und E_{ms} . Zunächst wird die externe elektrische Wechselwirkungsenergie $E_{es}^{(e)}$ betrachtet

$$E_{es}^{(e)} = \frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} \int d^3\vec{r} \vec{E}_{ex}(\vec{r}) \cdot \vec{E}(\vec{r}). \quad (6.68)$$

Mit folgenden Beziehungen für das externe elektrostatische Feld ${}^{(ex)}\vec{E}$ und das elektrostatische Gesamtfeld \vec{E}

$$\vec{E}_{ex} = -\vec{\nabla} {}^{(ex)}A_0 \quad (6.69a)$$

$$\vec{E} = -\vec{\nabla} A_0 \quad (6.69b)$$

erhält man für $E_{es}^{(e)}$ nun durch partielle Integration

$$E_{es}^{(e)} = \frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} \int d^3\vec{r} \vec{E}_{ex} \cdot \vec{E} = -\hbar c \int d^3\vec{r} {}^{(ex)}A_0(\vec{r}) \cdot j_0(\vec{r}). \quad (6.70)$$

Drückt man nun die $j_0(\vec{r})$ als Summe der Einzelstromdichten ${}^{(a)}k_0(\vec{r})$ (6.33) aus, so ergibt sich

$$E_{es}^{(e)} = -\hbar c \int d^3\vec{r} {}^{(ex)}A_0(\vec{r}) \left\{ {}^{(1)}k_0(\vec{r}) + {}^{(2)}k_0(\vec{r}) \right\}. \quad (6.71)$$

Vergleicht man nun (6.71) mit Gleichung (6.49a) und (6.49b) für das Masseäquivalent $\hat{z}_a \cdot M_{a,e}^{(es)}$ (6.49), so ergibt sich folgende Darstellung für die externe elektrische Wechselwirkungsenergie $E_{es}^{(e)}$:

$$E_{es}^{(e)} = -\hbar c \int d^3\vec{r}^{(ex)} A_0(\vec{r}) \cdot \left({}^{(1)}k_0(\vec{r}) + {}^{(2)}k_0(\vec{r}) \right) = \hat{z}_1 \cdot M_{1,e}^{(es)} c^2 + \hat{z}_2 \cdot M_{2,e}^{(es)} c^2 . \quad (6.72)$$

Da die Masseäquivalente $\hat{z}_a \cdot M_{a,e}^{(es)}$ in der Materieenergie mit umgekehrtem Vorzeichen vorkommen, wie in der externen Wechselwirkungsenergie, heben sich diese beiden Anteile in der Gesamtenergie E_{TX} weg für beliebige Werte des Selbstwechselwirkungsparameters u .

Die magnetischen Anteile $E_{es}^{(m)}$ und E_{ms} der externen Wechselwirkungsenergie E_{sx} (4.55) heben sich bereits für stationäre Zustände gegeneinander weg, selbst wenn ein nichttriviales (aber wohllokalisiertes) externes magnetisches Feld \vec{H}_{ex} vorhanden ist. Betrachtet man nämlich den Umstand, dass das magnetische Gesamtfeld gleich der Rotation des Gesamtvektorfeldes \vec{A} ist

$$\vec{H} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \quad (6.73)$$

und integriert partiell unter Verwendung des räumlichen Teils der externen Maxwell-Gleichungen (4.27b)

$$\vec{\nabla} \times \vec{H}_{ex}(\vec{r}) = 4\pi\alpha_s \vec{j}_{ex}(\vec{r}) , \quad (6.74)$$

so erhält man als Ergebnis, dass die externe magnetische Energie E_{ms} (4.54) gleich dem Negativen von $E_{es}^{(m)}$ (4.54) ist

$$E_{es}^{(m)} = \frac{\hbar c}{4\pi\alpha_s} \int d^3\vec{r} \vec{H}_{ex}(\vec{r}) \cdot \vec{H}(\vec{r}) = \hbar c \int d^3\vec{r} \vec{A}(\vec{r}) \cdot \vec{j}_{ex}(\vec{r}) = -E_{ms} . \quad (6.75)$$

(Wenn man als externes Potential des Problems das Coulomb-Potential des Kerns annimmt, sind die magnetischen Anteile von E_{sx} aufgrund von $\vec{H}_{ex}(\vec{r}) \equiv \vec{j}_{ex} \equiv 0$ offensichtlich sowieso beide gleich Null)

Damit verbleibt für die externe Wechselwirkungsenergie E_{sx}

$$E_{sx} \equiv E_{es}^{(e)} . \quad (6.76)$$

Dies gilt natürlich auch für die $ns^2\ ^1S_0$ -Zustände in folgender Form:

$$E_{sx}'' = E_{es}^{(e)} \equiv 2\hbar c \int d^3\vec{r}^{(ex)} A_0(r) \cdot {}^{(p)}k_0(r) = 2M_{p,e}^{(es)} c^2 , \quad (6.77)$$

vergl. (6.53).

6.5.4 Gesamtenergie E''_{TX} der $ns^2\ ^1S_0$ -Zustände

Das Energiefunktional E_{TX} (4.56), spezialisiert auf die $ns^2\ ^1S_0$ -Zustände, wird nun als E''_{TX} bezeichnet und lautet in seiner abschließenden Form, indem man die Beiträge aus der Materieenergie E''_D (6.54), der internen Wechselwirkungsenergie E''_G (6.67) und der externen Wechselwirkungsenergie E''_{sx} (6.77) addiert:

$$E_{TX} \Rightarrow E''_{TX} = E''_D + E''_G + E''_{sx} = 2M''c^2 - E_R^{(e)} + 3E_R^{(m)}. \quad (6.78)$$

Es versteht sich, dass die Gesamtenergie E''_{TX} nicht einfach aus der Summe der beiden Masseeigenwerte bestehen kann (d.h. $E''_{TX} \neq 2M''c^2$), denn jede der beiden Eigenwertgleichungen (5.15a) und (5.15b) enthält die Wechselwirkung mit dem jeweils anderen Teilchen, sodass die Summe der Eigenwerte die zwischenelektronische Wechselwirkung doppelt enthalten würde, wobei die elektrischen und die magnetischen Beiträge allerdings mit unterschiedlichem Vorzeichen vorkommen. Aus diesem Grund muss man die elektrische Wechselwirkungsenergie $E_R^{(e)}$ von der Summe der beiden Masseeigenwerte abziehen und die magnetische Wechselwirkungsenergie $E_R^{(m)}$ hinzu addieren, um das richtige Ergebnis für die Gesamtenergie E''_{TX} zu erhalten. Für ein einzelnes Teilchen entfällt die interne Wechselwirkungsenergie ($E_G = 0$), sodass man hier als Gesamtenergie E_{TX} auf das erwartete Einteilchenergebnis $E_{TX} = M_*c^2$ stößt (vergl. Anhang D). Man kann zeigen, dass der Faktor 3 in Verbindung mit der magnetischen Energie $E_R^{(m)}$ auf die Isotropie zurückzuführen ist, die jeder der drei Raumrichtungen denselben magnetischen Beitrag $E_R^{(m)}$ zuordnet [15].

Setzt man nun in die Gleichung für das magnetische Feld $\vec{H}_p(\vec{r}) = \vec{\nabla} \times \vec{A}_p(\vec{r}) + i\vec{B}(\vec{r}) \times \vec{B}^*$ (6.60a) die Lösungen der entsprechenden Poisson-Gleichung (6.40) ein, so ergibt sich folgende Form für \vec{H}_p in Kugelkoordinaten:

$$\vec{H}_p = H_r \vec{e}_r + H_\theta \vec{e}_\theta \quad (6.79)$$

mit den Komponenten

$$H_r = 2B(r) \cos \theta [1 - r^2 B(r)] \quad (6.80a)$$

$$H_\theta = -\frac{\sin \theta}{r} \cdot \frac{d}{dr} (r^2 B(r)). \quad (6.80b)$$

Damit erhält man für den magnetischen Teil $E_R^{(m)}$ (6.59) des Energiefunktionals in Kugelkoordinaten (vergl. auch [23])

$$E_R^{(m)} = \frac{4}{3} \hbar c \left\{ \int_0^\infty dr r^3 B(r) R_+(r) R_-(r) - \frac{e^{2u}}{\alpha_s} \int_0^\infty dr r^4 B^3(r) \cdot [1 - r^2 B(r)] \right\}. \quad (6.81)$$

Für den elektrischen Teil $E_R^{(e)}$ (6.58) erhält man in Kugelkoordinaten unter Verwendung der expliziten Darstellung der $M_p^{(e)}$ (6.53c) und der Beziehung zwischen ${}^{(p)}k_0$ und den radialen Ansatzfunktionen $R_{\pm}(r)$ (6.23)

$$E_R^{(e)} = -\hbar c \int_0^{\infty} dr r^2 {}^{(p)}A_0(r) \{ (R_+(r))^2 + (R_-(r))^2 \} . \quad (6.82)$$

Die Ergebnisse (6.82) und (6.81) für das Energiefunktional des isotropen Zustandes sind die Grundlage für die numerischen Berechnungen des folgenden Kapitels. Für den semiklassischen RST-Ansatz setzt man den Selbstwechselwirkungsparameter u gleich Null und für den RST-Ansatz, der Selbstwechselwirkungen enthält, wird der Wert von u so festgelegt, dass eine optimale Übereinstimmung zwischen den RST-Vorhersagen und den experimentellen Daten erzielt wird, vergl. Kapitel 7.

Die Konsequenzen aus der Tatsache, dass bei dem spezielle RST-Ansatz (6.1) und (6.5) für das Parasytem die elektrische Austauschenergie $E_C^{(e)}$ verschwindet, soll im folgenden Abschnitt genauer untersucht werden.

6.6 Problem mit der Korrelationsenergie E_C in der RST beim Grundzustand des Parasytems

Je nach Spinausrichtung der beiden Elektronen spricht man von Para- bzw. Orthosystemen (vergl. Abschnitt 6.1), wobei sich die beiden Systeme energetisch unterscheiden: Beim Parasytem wird die Energie in niedrigster störungstheoretischer Ordnung um die ‐Austauschenergie‐ E_C angehoben, während beim Orthosystem die Energie um E_C abgesenkt wird; jeweils im Vergleich zum Energiewert für ein heliumähnliches System, bei dem Spineffekte vernachlässigt werden. Das Problem ist nun, dass beim Hartree-Fock-Ansatz, ebenso wie bei dem in diesem Kapitel verwendeten RST-Ansatz (6.1) und (6.5), der ja im nichtrelativistischen Grenzfall auf den Hartree-Fock-Ansatz führt, bei Teilchen mit unterschiedlichem Spin keine ‐elektrischen‐ Austauschwechselwirkungen auftreten, d.h. für den Singulettzustand ist $E_C^{(e)} = 0$. Beim RST-Ansatz (6.1) und (6.5) liegt das daran, dass die Ladungsdichte des Austauschstroms verschwindet $h_0 = \overline{\psi_1} \gamma^0 \psi_2 = 0$, was dazu führt, dass man auch die Zeitkomponente des Austauschpotentials B_0 gleich Null setzen kann, womit die ‐elektrische‐ Austauschenergie ebenfalls verschwindet: $E_C^{(e)} = 0$. Dies ist aber nicht richtig (vergl. auch [3]). Wie man aus der konventionellen QM sehen kann, benötigt man zur korrekten Berechnung der Energieniveaus eine Verschiebung der Singulettzustände um denselben Betrag E_C wie bei den Triplettzuständen, allerdings mit

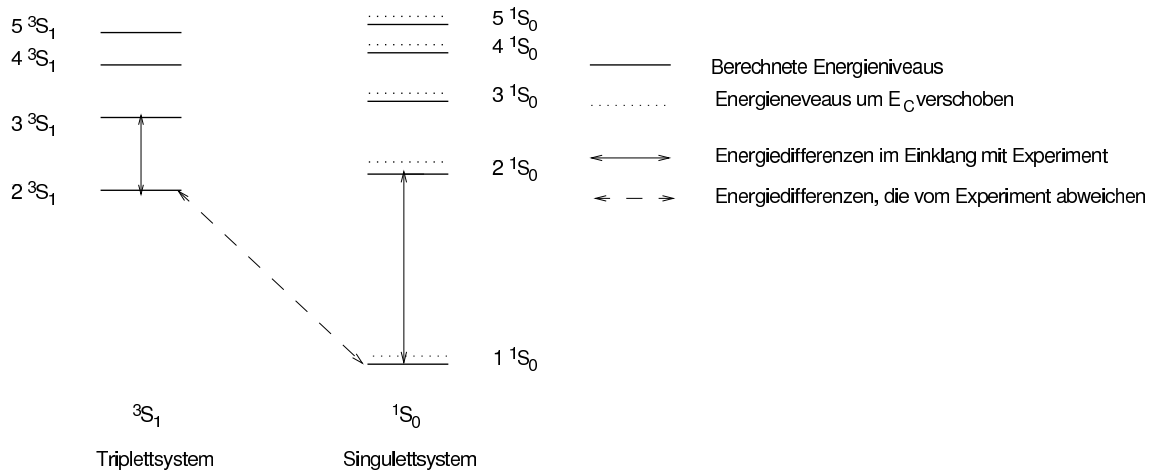


Abbildung 6.2: Vergleich von Singulett- und Triplett-Termschemata der RST mit dem Experiment

dem anderen Vorzeichen. Da das RST-Singulettssystem damit als Ganzes um E_C verschoben ist, erhält man bei der Berechnung von Energiedifferenzen die korrekten Werte - nur die absoluten Energiewerte der einzelnen Niveaus sind um E_C verschoben. Da die Energieniveaus des Triplettsystems richtig berechnet werden, sind auch die Energien der Interkombinationslinien zwischen Triplett- und Singulettssystem verschoben, siehe Abbildung 6.2. Es stellt sich nun die Frage, inwieweit es andere RST-Ansätze gibt, die nicht zu einem Verschwinden von h_0 führen. Eine Möglichkeit wäre, die Spinoren ${}^{(a)}\phi_{\pm}$ aus (6.1) und (6.5) so als Linearkombination von Einteilcheneigen-spinoren $\zeta_l^{k,m}$ anzusetzen, dass $h_0 = \overline{\psi_1}\gamma^0\psi_2 \neq 0$ ist. Der so gefundene Ansatz ließe sich dann natürlich nicht mehr nichtrelativistisch in den Hartree-Fock-Ansatz überführen. Damit besteht aber die Möglichkeit, dass ein solcher Ansatz die RST-Voraussagen von Hartree-Fock weg und näher an Schrödinger heranrückt.

6.7 Existieren auch nichtradialsymmetrische Lösungen?

Im folgenden Kapitel sollen die Grundzustandsenergieniveaus des Singulettsystems numerisch berechnet werden auf der Basis der Eigenwertgleichungen und Energiefunktionale, die in diesem Kapitel unter Verwendung eines radialsymmetrischen Ansatzes für die Ansatzfunktionen R_{\pm} (6.1) und (6.5) aufgestellt wurden.

Es stellt sich nun die Frage, inwieweit auch nichtradialsymmetrische Lösungen existieren. Dazu soll das Eigenwertgleichungssystem für das Singulettssystem aus

[3] untersucht werden, das an Stelle der radialsymmetrischen Ansatzfunktionen aus (6.1) und (6.5) Ansatzfunktionen verwendet, die sowohl von r als auch von θ abhängen:

$${}^{(1)}\phi_+(\vec{r}) = {}^{(1)}R_+(r, \theta) \cdot \zeta_0^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \quad (6.83a)$$

$${}^{(1)}\phi_-(\vec{r}) = -i {}^{(1)}R_-(r, \theta) \cdot \zeta_1^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \quad (6.83b)$$

$${}^{(2)}\phi_+(\vec{r}) = {}^{(2)}R_+(r, \theta) \cdot \zeta_0^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \quad (6.83c)$$

$${}^{(2)}\phi_-(\vec{r}) = -i {}^{(2)}R_-(r, \theta) \cdot \zeta_1^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} . \quad (6.83d)$$

Dies führt nach [3] auf folgendes Eigenwertproblem für das Singulettssystem:

$$\begin{aligned} \frac{\partial {}^{(1)}R_+}{\partial r} + [{}^{(ex)}A_0 + {}^{(2)}A_0] \cdot {}^{(1)}R_- + r [B \cdot {}^{(2)}R_+ - A_2 \cdot {}^{(1)}R_+] \\ + r \cos^2 \theta [A_2 \cdot {}^{(1)}R_+ + B \cdot {}^{(2)}R_+] = -\frac{M_1 + M}{\hbar} c \cdot {}^{(1)}R_- \end{aligned} \quad (6.84a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial {}^{(1)}R_-}{\partial r} + \frac{2}{r} {}^{(1)}R_- - [{}^{(ex)}A_0 + {}^{(2)}A_0] \cdot {}^{(1)}R_+ \\ - r [B \cdot {}^{(2)}R_- - A_2 \cdot {}^{(1)}R_-] - r \cos^2 \theta [A_2 \cdot {}^{(1)}R_- + B \cdot {}^{(2)}R_-] = \frac{M_1 - M}{\hbar} c \cdot {}^{(1)}R_- \end{aligned} \quad (6.84b)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial {}^{(2)}R_+}{\partial r} + [{}^{(ex)}A_0 + {}^{(1)}A_0] \cdot {}^{(2)}R_- + r [B \cdot {}^{(1)}R_+ + A_1 \cdot {}^{(2)}R_+] \\ + r \cos^2 \theta [-A_1 \cdot {}^{(2)}R_+ + B \cdot {}^{(1)}R_+] = -\frac{M_2 + M}{\hbar} c \cdot {}^{(2)}R_- \end{aligned} \quad (6.84c)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial {}^{(2)}R_-}{\partial r} + \frac{2}{r} {}^{(2)}R_- - [{}^{(ex)}A_0 + {}^{(1)}A_0] \cdot {}^{(2)}R_+ \\ - r [B \cdot {}^{(1)}R_- + A_1 \cdot {}^{(2)}R_-] + r \cos^2 \theta [A_1 \cdot {}^{(2)}R_- - B \cdot {}^{(1)}R_-] = \frac{M_2 - M}{\hbar} c \cdot {}^{(2)}R_- \end{aligned} \quad (6.84d)$$

für den Radialteil der Ansatzfunktionen und

$$\frac{\partial {}^{(1)}R_+}{\partial \theta} = r^2 \sin^2 \theta \cos^2 \theta [A_2 \cdot {}^{(1)}R_+ + B \cdot {}^{(2)}R_+] \quad (6.85a)$$

$$\frac{\partial {}^{(1)}R_-}{\partial \theta} = r^2 \sin^2 \theta \cos^2 \theta [A_2 \cdot {}^{(1)}R_- + B \cdot {}^{(2)}R_-] \quad (6.85b)$$

$$\frac{\partial {}^{(2)}R_+}{\partial \theta} = r^2 \sin^2 \theta \cos^2 \theta [B \cdot {}^{(1)}R_+ - A_1 \cdot {}^{(2)}R_+] \quad (6.85c)$$

$$\frac{\partial {}^{(2)}R_-}{\partial \theta} = r^2 \sin^2 \theta \cos^2 \theta [B \cdot {}^{(1)}R_- - A_1 \cdot {}^{(2)}R_-] \quad (6.85d)$$

für den Winkelanteil; wobei die Gleichungen (6.84a) - (6.84b), sowie (6.85a) - (6.85b) zum ersten Teilchen ($a = 1$) gehören und die Gleichungen (6.84c) - (6.84d), sowie (6.85c) - (6.84d) zum zweiten Teilchen ($a = 2$).

Da für den Grundzustand davon ausgegangen wurde, dass die radialen Ansatzfunktionen für beide Teilchen paarweise identisch sind, genauso wie die beiden Masseeigenwerte (siehe Abschnitt 6.2), sollen die Ansatzfunktionen ${}^{(a)}R_{\pm}$ durch R_{\pm} (6.17) ersetzt werden. Damit erhält man den folgenden Satz an Eigenwertgleichungen für das erste Teilchen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_+}{\partial r} + [{}^{(ex)}A_0 + {}^{(2)}A_0] \cdot R_- + r [B - A_2] \cdot R_+ \\ + r \cos^2 \theta [A_2 + B] \cdot R_+ = -\frac{M_1 + M}{\hbar} c \cdot {}^{(1)}R_- \end{aligned} \quad (6.86a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_-}{\partial r} + \frac{2}{r} s R_- - [{}^{(ex)}A_0 + {}^{(2)}A_0] \cdot R_+ - r [B - A_2] \cdot R_- \\ - r \cos^2 \theta [A_2 + B] \cdot R_- = \frac{M_1 - M}{\hbar} c \cdot R_- \end{aligned} \quad (6.86b)$$

$$\frac{\partial R_+}{\partial \theta} = r^2 \sin^2 \theta \cos^2 \theta [B + A_2] \cdot R_+ \quad (6.86c)$$

$$\frac{\partial R_-}{\partial \theta} = r^2 \sin^2 \theta \cos^2 \theta [B + A_2] \cdot R_- \quad (6.86d)$$

und für das zweite Teilchen

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_+}{\partial r} + [{}^{(ex)}A_0 + {}^{(1)}A_0] \cdot R_- + r [B + A_1] \cdot R_+ \\ + r \cos^2 \theta [-A_1 + B] \cdot R_+ = -\frac{M_2 + M}{\hbar} c \cdot R_- \end{aligned} \quad (6.87a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_-}{\partial r} + \frac{2}{r} R_- - [{}^{(ex)}A_0 + {}^{(1)}A_0] \cdot R_+ - r [B + A_1] \cdot R_- \\ - r \cos^2 \theta [-A_1 + B] \cdot R_- = \frac{M_2 - M}{\hbar} c \cdot R_- \end{aligned} \quad (6.87b)$$

$$\frac{\partial R_+}{\partial \theta} = r^2 \sin^2 \theta \cos^2 \theta [B - A_1] \cdot R_+ \quad (6.87c)$$

$$\frac{\partial R_-}{\partial \theta} = r^2 \sin^2 \theta \cos^2 \theta [B - A_1] \cdot R_- \quad (6.87d)$$

Differenziert man nun die Eigenwertgleichungen für den Radialteil (6.86a) und (6.86b) bzw. (6.87a) und (6.87b) nach θ und die Eigenwertgleichungen für den Winkelanteil (6.86c) und (6.86d) bzw. (6.87c) und (6.87d) nach r , so erhält man jeweils einen Term $\frac{\partial^2 R_{\pm}}{\partial \theta \partial r}$ und einen Term $\frac{\partial^2 R_{\pm}}{\partial r \partial \theta}$. Da r und θ unabhängige Variablen sind, darf man die Reihenfolge der Differenziation vertauschen und so kann man die abgeleiteten Eigenwertgleichungen nach $\frac{\partial^2 R_{\pm}}{\partial \theta \partial r}$ bzw. $\frac{\partial^2 R_{\pm}}{\partial r \partial \theta}$ auflösen und gleichsetzen. Damit

ergibt sich ein Gleichungssystem, das es ermöglicht, Aussagen über die elektromagnetischen Potentiale und die Austauschpotentiale und deren Winkelabhängigkeiten zu machen. Ein Vergleich der Koeffizienten vor den jeweiligen radialen Ansatzfunktionen führt zu den folgenden Bedingungen:

Für die die Masseeigenwerte M_a erhält man

$$M_1 \equiv M_2 \quad (6.88)$$

und für die elektrostatischen Potentiale ${}^{(a)}A_0$

$${}^{(1)}A_0 \equiv {}^{(2)}A_0 \quad (6.89a)$$

$$\frac{\partial ({}^{(ex)}A_0 - {}^{(a)}A_0)}{\partial \theta} = 0. \quad (6.89b)$$

Aus den Bedingungen (6.89) ergibt sich, dass die elektrostatischen Potentiale identisch sind und nicht vom Winkel θ abhängen. Für die magnetostatischen Potentiale A_a und das Austauschpotential B ergeben sich folgende Bedingungen:

$$A_p = A_1 \equiv -A_2 \quad (6.90a)$$

$$r^2 \sin(2\theta) \cdot \left(\frac{\partial B}{\partial r} - \frac{\partial A_p}{\partial r} \right) = 0 \quad (6.90b)$$

$$r \left(\frac{\partial B}{\partial \theta} + \frac{\partial A_p}{\partial \theta} \right) + r \cos^2 \theta \left(\frac{\partial B}{\partial \theta} - \frac{\partial A_p}{\partial \theta} \right) = 2r \sin \theta \cos \theta (B - A_p), \quad (6.90c)$$

wobei sich Bedingung (6.90a) auch bereits aus dem Vergleich zwischen (6.86c) bzw. (6.86d) mit (6.87c) bzw. (6.87d) ergäbe. Aus Bedingung (6.90b) folgt folgende Beziehung zwischen den magnetostatischen Potentialen A_a und dem Austauschpotential B

$$A_1 = A_p = B \quad (6.91a)$$

$$A_2 = -A_p = -B. \quad (6.91b)$$

Dabei liegt die Annahme zugrunde, dass die Potentiale keine Terme enthalten, die nicht von r abhängen, um ein Verschwinden der Potentiale für $r \rightarrow \infty$ zu gewährleisten.

Setzt man die Beziehung (6.91) in die Bedingung (6.90c) ein, so lässt sich die daraus resultierende Gleichung nur erfüllen, wenn die magnetostatischen Potentiale A_a über *keine* θ -Abhängigkeit verfügen.

Genauso erhält man, wenn man die Bedingung (6.91) in die Gleichungen (6.86c) und (6.86d) bzw. (6.87c) und (6.87d) einsetzt, dass die Ableitung nach θ für die

beiden radialen Ansatzfunktionen R_{\pm} gleich Null ist und somit die radialen Ansatzfunktionen R_{\pm} von θ unabhängig sind. Verwendet man nun alle gefundenen Bedingungen für die Potentiale, so ergibt sich aus den Gleichungen (6.86a) und (6.86b) bzw. (6.87a) und (6.87b) das bereits für den Ansatz (6.1) und (6.5) abgeleitete Eigenwertsystem (6.28).

Verzichtet man auf die Forderung, dass die radialen Ansatzfunktionen ${}^{(a)}R_{\pm}$ paarweise identisch sind, so erhält man auf analoge Weise Bedingungen für die Potentiale, die in diesem Falle wie folgt lauten:

$$M_1 \equiv M_2 \quad (6.92a)$$

$$\frac{\partial {}^{(1)}A_0}{\partial \theta} = 0 \quad (6.92b)$$

$$\frac{\partial {}^{(2)}A_0}{\partial \theta} = 0 \quad (6.92c)$$

$$A_1 = -A_2 \quad (6.92d)$$

$$A_1 \propto \frac{1}{r^2(1 - \cos^2 \theta)} \quad (6.92e)$$

$$A_2 \propto \frac{1}{r^2(1 - \cos^2 \theta)} \quad (6.92f)$$

$$B \propto \frac{1}{r^2(1 + \cos^2 \theta)}. \quad (6.92g)$$

Hier ergibt sich abweichend vom Grundzustandsfall also eine mögliche Abhängigkeit der Potentiale von θ . Die so gewonnenen Abhängigkeiten der Potentiale lassen sich dann wieder in die Eigenwertgleichungen (6.84) und (6.85) einsetzen und man erhält Lösungen für die radialen Ansatzfunktionen ${}^{(1)}R_{\pm}$ und ${}^{(2)}R_{\pm}$. Allerdings sind diese Lösungen für den hier betrachteten Zwei-Fermionen-Fall als nichtphysikalisch anzusehen, da die elektromagnetischen Potentiale A_1 und A_2 eine stärkere Singularität in r aufweisen als z.B. das Coulomb-Potential und das, obwohl in den RST-Berechnungen *nicht* von einer punktförmigen Ladungsverteilung ausgegangen wird.

Damit ist gezeigt, dass der rein radialsymmetrische Ansatz (6.1) und (6.5) zur Beschreibung des Singulettsystems 1S_0 gerechtfertigt ist, aber keine nichtradialsymmetrischen Lösungen erlaubt. Um die nichtradialsymmetrischen Lösungen zu erhalten, muss ein allgemeinerer Ansatz verwendet werden (siehe z.B. [3]).

Kapitel 7

Relativistische Ionisierungsenergien

Die Spezialisierung der RST-Gleichungen in den vorausgegangenen Kapiteln auf den Fall des isotropen Grundzustands von heliumähnlichen Ionen erlaubt nun die explizite numerische Berechnung von Energieeigenwerten in der RST. Indem man diese Ergebnisse mit experimentellen Daten und theoretischen Vorhersagen anderer Ansätze vergleicht, lässt sich die physikalische Relevanz der RST aufzeigen.

Im folgenden Kapitel sollen nun zunächst semiklassische Ionisierungsenergien auf der Basis der RST den entsprechenden Ionisierungsenergien aus anderen theoretischen Ansätzen gegenübergestellt werden. Dann werden die Grundzustandswechselwirkungsenergien auf der Basis der verschiedenen theoretischen Ansätze mit experimentellen Daten verglichen, sowie die Ionisierungsenergien unter Berücksichtigung relativistischer Effekte und der RST-Selbstwechselwirkung.

Da die bestehenden Hartree-Fock-Programme nicht auf die relativistischen RST-Gleichungen angewendet werden konnten, war es für die numerischen Berechnungen notwendig, ein eigens auf die RST-Gleichungen abgestimmtes Programm zur Berechnung zu verwenden.

Um die Güte der RST-Vorhersagen zu überprüfen, wurden diese verglichen mit experimentellen Daten der NIST-Datenbank [12] und den Experimenten von R. E. Marrs, S. R. Elliott und Th. Stoeckler [10] und mit vergleichbaren bekannten theoretischen Ansätzen wie der $1/Z$ -Entwicklung von Drake [2] und der “all order technique in many body perturbation theory” (“all order MBPT”) von D. R. Plante, W. R. Johnson und J. Sapirstein [14];

7.1 Semiklassische Ionisierungsenergien

Als erstes sollen nun die *semiklassischen* RST-Ergebnisse untersucht werden. Da hier QED-Korrekturen wie die Lamb-Shift per Definition vernachlässigt werden, ist zu erwarten, dass die Ergebnisse mit steigendem z_{ex} immer weiter vom Experiment abweichen. Deshalb liegt das Augenmerk hier mehr auf einem Vergleich der Ergebnisse der verschiedenen semiklassischen Theorien untereinander.

Die Ionisierungsenergie, die nötig ist, um ein heliumähnliches Ion in ein wasserstoffähnliches Ion plus ein freies Elektron zu ionisieren, soll für den semiklassischen Fall mit $\overset{\circ}{J}_{(2)}^{(n)}$ bezeichnet werden und lautet wie folgt:

$$\begin{aligned}\overset{\circ}{J}_{RST(2)}^{(n)} &= Mc^2 + \overset{\circ}{E}_{T(1)}^{(n)} - \overset{\circ}{E}_{T(2)}^{(n)} \\ &= (M + M_*^{(n)}) c^2 - \overset{\circ}{E}_{T(2)}^{(n)}.\end{aligned}\quad (7.1)$$

Die Bezeichnung $\overset{\circ}{J}_{(a)}^{(n)}$ ist folgendermaßen zu lesen: Der Ring über dem J bezeichnet die Tatsache, dass semiklassisch gerechnet wurde; n gibt die gemeinsame Hauptquantenzahl der beiden Elektronen an: Für den hier untersuchten Grundzustand des Parasytems ist $n = 1$ - die Bezeichnung von $\overset{\circ}{E}_{T(a)}^{(n)}$ entspricht der von $\overset{\circ}{J}_{(a)}^{(n)}$, dabei handelt es sich bei $\overset{\circ}{E}_{T(2)}^{(n)}$ um die Zweiteilchenenergie des Anfangszustands von der die Einteilchenenergie $\overset{\circ}{E}_{T(1)}^{(n)}$ des Endzustands plus der Energie (Mc^2) eines freien Elektrons abgezogen wird.

Die Einteilchenenergien $\overset{\circ}{E}_{T(1)}^{(n)} \doteq M_*^{(n)} c^2$ in Abhängigkeit von der Hauptquantenzahl n und der Kernladungszahl z_{ex} können jedem Lehrbuch über relativistische Quantenmechanik entnommen werden, z.B. [5]

$$M_*^{(n)} c^2 = \frac{Mc^2}{\sqrt{1 + \frac{(z_{ex}\alpha_s)^2}{(n-1 + \sqrt{1-(z_{ex}\alpha_s)^2})^2}}}. \quad (7.2)$$

Im folgenden werden nun die semiklassischen Vorhersagen der RST für die Ionisierungsenergie aus dem Grundzustand des Parasytems ($n = 1$) $\overset{\circ}{J}_{RST(2)}^{(1)}$ mit denen der $1/Z$ -Entwicklung $\overset{\circ}{J}_{1/Z(2)}^{(1)}$ und der "all order MBPT" $\overset{\circ}{J}_{all(2)}^{(1)}$ verglichen und zwar für die Kernladungszahlen $z_{ex} = 2$ (Helium) bis $z_{ex} = 100$ (Fermium). Dazu werden zunächst die RST-Gleichungen (6.28), (6.34) und (6.40) für $n = 1$ numerisch gelöst und das Ergebnis in das Energiefunktional $E_{T(2)}$ (6.78) für $u = 0$, da im semiklassischen Fall keine Selbstwechselwirkung berücksichtigt werden soll, eingesetzt. Für die

Elektronenmasse und die Feinstrukturkonstante α_s wurden mit $Mc^2 = 510\,998,918$ eV und $\alpha_s \doteq \frac{e}{\hbar c} = 0,007\,297\,352\,568$ die neuesten NIST-Werte verwendet. Allerdings wurden die Ergebnisse aus der Literatur mit den vom jeweiligen Autor verwendeten Werten für α_s und Mc^2 übernommen; die Unterschiede, die davon herrühren, sind so gering, dass sie keinen Einfluss auf die Interpretation der Ergebnisse haben.

Die semiklassischen Ionisierungsenergien $\overset{\circ}{J}_{(2)}^{(n)}$ beziehen sich ausschließlich auf das relativistische Coulomb-Problem für unendlich schwere, punktförmige Kerne. Das bedeutet, dass Effekte wie Massenpolarisierung, endliche Kerngröße und QED-Korrekturen von den Vorhersagen der “all order MBPT” abgezogen werden müssen, um sie korrekt mit den RST-Vorhersagen vergleichen zu können. Erfreulicherweise wurden zumindest einige dieser Korrekturen in die “all order MBPT” dadurch integriert, dass die entsprechenden Werte der $1/Z$ -Entwicklung von Drake addiert wurden; so dass man nun die entsprechenden Drake-Werte einfach wieder abziehen kann. Auf diese Weise erhält man die in Tabelle 7.1 aufgelisteten Ionisierungsenergien $\overset{\circ}{J}_{all(2)}^{(1)}$. Die entsprechenden semiklassischen Werte von Drake $\overset{\circ}{J}_{1/Z(2)}^{(1)}$ können direkt aus der Literatur [14] übernommen werden.

Tabelle 7.1 zeigt eine Gegenüberstellung der semiklassischen Werte für die Ionisierungsenergien der RST $\overset{\circ}{J}_{RST(2)}^{(1)}$, der “all order MBPT” $\overset{\circ}{J}_{all(2)}^{(1)}$, und der $1/Z$ -Entwicklung von Drake $\overset{\circ}{J}_{1/Z(2)}^{(1)}$, sowie der experimentellen Daten von NIST [12] bzw. Stöhlker [10] - die experimentellen Daten sind natürlich nicht “semiklassisch”, aber sie sind hier aufgeführt, um die Abweichung der semiklassischen theoretischen Ansätze von den tatsächlichen Energien aufzuzeigen. Da sich die $1/Z$ -Entwicklung von Drake einer großen Akzeptanz erfreut, sind außerdem die Abweichungen der anderen Werte von den $1/Z$ -Werten für die Ionisierungsenergie angegeben.

Die experimentellen Daten von Stöhlker beinhalten allerdings nur die Grundzustandswechselwirkungsenergien $\Delta E_{exp}^{(1)}$, d.h. es müssen die Ionisierungsenergien $\overset{\circ}{J}_{(1)}^{(1)}$ für wasserstoffähnlichen Ionen hinzuaddiert werden. Da von den meisten von Stöhlker untersuchten Kernladungszahlen diese Ionisierungsenergien in der NIST-Datenbank nicht vorliegen, wurden die theoretischen Ionisierungsenergien von W. R. Johnson und G. Soff [8] für die Elektronen der wasserstoffähnlichen Ionen $J_{Soff(1)}^{(1)}$ hinzuaddiert:

$$J_{exp(2)}^{(1)} = \Delta E_{exp}^{(1)} + J_{Soff(1)}^{(1)}. \quad (7.3)$$

Abbildung 7.1 zeigt die Abweichung der Werte von $\overset{\circ}{J}_{all(2)}^{(1)}$, $\overset{\circ}{J}_{RST(2)}^{(1)}$, $J_{NIST(2)}^{(1)}$ und $J_{exp(2)}^{(1)}$ von der $1/Z$ -Entwicklung $\overset{\circ}{J}_{1/Z(2)}^{(1)}$.

z_{ex}	$\overset{\circ}{J}_{1/Z(2)}^{(1)}$ [2]	$\overset{\circ}{J}_{RST(2)}^{(1)}$ (7.1)	$\overset{\circ}{J}_{all(2)}^{(1)}$ [14]	$\overset{\circ}{J}_{1/Z(2)}^{(1)}$ $-\overset{\circ}{J}_{RST(2)}^{(1)}$	$\overset{\circ}{J}_{1/Z(2)}^{(1)}$ $-\overset{\circ}{J}_{all(2)}^{(1)}$	$J_{NIST(2)}^{(1)}$ [12]	$J_{exp(2)}^{(1)}$ [10], (7.3)
2	24,588	23,415		1,173		24,587	
3	75,642	74,439	75,648	1,203	-0,006	75,640	
4	153,901	152,677	153,910	1,223	-0,010	153,895	
5	259,384	258,154	259,398	1,231	-0,013	259,375	
6	392,110	390,881	392,128	1,230	-0,018	392,087	
7	552,102	550,878	552,124	1,224	-0,022	552,072	
8	739,384	738,149	739,410	1,235	-0,026	739,290	
9	953,986	952,767	954,014	1,219	-0,028	953,907	
10	1195,937	1194,708	1195,970	1,229	-0,033	1195,822	
20	5130,373	5129,120	5130,449	1,253	-0,076	5128,700	
30	11871,034	11869,787	11871,169	1,247	-0,135	11865,100	
32	13565,012	13563,688	13565,157	1,324	-0,145	13557,330	13556,935
34	15376,816	15375,525	15376,977	1,291	-0,161	15367,345	
36	17307,736	17306,455	17307,920	1,281	-0,184	17297,140	
40	21532,628	21531,351	21532,868	1,276	-0,240		
42	23829,745	23828,427	23830,013	1,317	-0,268	23791,674	
50	34291,824	34290,486	34292,262	1,339	-0,437		
54	40317,097	40315,838	40317,657	1,259	-0,560		40272,522
60	50405,610	50404,484	50406,429	1,126	-0,819		
66	61831,326	61830,318	61832,505	1,008	-1,178		61731,912
70	70242,367	70241,407	70243,891	0,960	-1,523		
74	79331,627	79330,850	79333,603	0,777	-1,976		79187,649
76	84144,078	84143,373	84146,319	0,705	-2,242		84006,468
80	94335,731	94335,281	94338,665	0,450	-2,934		
83	102503,547	102503,218		0,329			102256,878
90	123484,294	123484,766	123490,330	-0,472	-6,035		
100	158953,708	158955,796	158967,592	-2,087	-13,884		
ALLE DATEN IN eV							

Tabelle 7.1: Vergleich zwischen den semiklassischen Ionisierungsenergien der verschiedenen theoretischen Ansätze

Die Ionisierungsenergien $\overset{\circ}{J}_{all(2)}^{(1)}$ der “all order MBPT” werden aus den Daten von [14] berechnet, indem die Korrekturen für Massenpolarisierung, Kernaussdehnung und QED, wie sie bei Drake [2] spezifiziert sind, von den dortigen Werten wieder abgezogen wurden. Zum Vergleich mit den tatsächlich gemessenen Werten wurden die experimentellen Werte bis zu einer Kernladungszahl von $z_{ex} = 42$ aus dem NIST-Archiv [12] aufgelistet und für $z_{ex} = 32, 54, 66, 74, 76, 83$ aus Stöhlker [10] unter Verwendung der Grundzustandsionisierungsenergien $J_{So\text{ff}(1)}^{(1)}$ für wasserstoffähnliche Ionen nach [8].

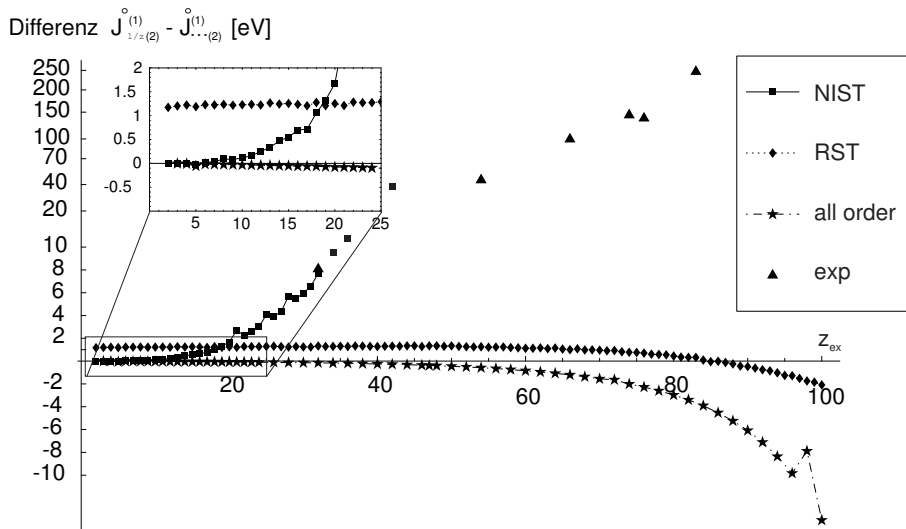


Abbildung 7.1: Vergleich zwischen den semiklassischen Ionisierungsenergien der verschiedenen theoretischen Ansätze

Nur für hinreichend kleine Werte der Kernladungszahl $z_{ex} \lesssim 20$ zeigen die semiklassischen Ionisierungsenergien $\overset{\circ}{J}_{all(2)}^{(1)}$ und $\overset{\circ}{J}_{1/Z(2)}^{(1)}$ eine gute Annäherung an die experimentellen Werte $J_{NIST(2)}^{(1)}$ [12]. In diesem Bereich ergibt sich für die RST-Werte eine nahezu konstante Abweichung von $1,2 \text{ eV}$, aufgrund der bei dem hier verwendeten RST-Ansatz fehlenden Korrelationsenergie. Für größere Werte für z_{ex} ($z_{ex} \gtrsim 80$) liegen die theoretischen Vorhersagen der drei Theorien sehr dicht beieinander (innerhalb ca. 10 eV), weichen vom Experiment aber mit mehr als 250 eV sehr stark ab. Die semiklassischen RST-Vorhersagen $\overset{\circ}{J}_{RST(2)}^{(1)}$ fallen bei $z_{ex} \approx 20$ mit den experimentellen Werten zusammen und für $z_{ex} \approx 83$ mit den semiklassischen Vorhersagen $\overset{\circ}{J}_{1/Z(2)}^{(1)}$ der $1/Z$ -Theorie [2].

Auswertung Tabelle 7.1 und Abbildung 7.1:

1. Für kleine und mittlere Werte von z_{ex} (z.B. $z_{ex} \lesssim 30$) liegen die Werte von "all order MBPT" und $1/Z$ -Entwicklung sehr dicht beieinander und unterscheiden sich um weniger als 0,15 eV. Die Werte der RST unterscheiden sich hingegen von den beiden anderen Theorien um einen nahezu konstanten Wert von ca. 1,2 eV. Diese Energiedifferenz ist auf die fehlende Korrelationsenergie zwischen den beiden Elektronen (vergl. Abschnitt 6.6) zurückzuführen.
2. Die Tatsache, dass die fehlende Korrelationsenergie über eine so große Spanne von z_{ex} -Werten konstant bei ca. 1,2 eV liegt (bis $z_{ex} \lesssim 32$), ist erstaunlich. Betrachtet man nun die relative Abweichung $\Delta_{aR}^{(1)}$, z.B. zwischen RST und "all order MBPT"

$$\Delta_{aR}^{(1)} \doteq \frac{\overset{\circ}{J}_{all(2)}^{(1)} - \overset{\circ}{J}_{RST(2)}^{(1)}}{\overset{\circ}{J}_{RST(2)}^{(1)}} \quad (7.4)$$

so zeigt es sich, dass sie für steigende z_{ex} schnell sinkt. Für das Lithium-Ion ($z_{ex} = 3$) bzw. für das hochionisierte Quecksilber-Ion ($z_{ex} = 80$) im Grundzustand $n = 1$ erhält man aus Tabelle 7.1

$$\Delta_{aR}^{(1)} \Big|_{z_{ex}=3} \frac{75,6483 - 74,4388}{74,4388} \Rightarrow 1,6\% \quad (7.5a)$$

$$\Delta_{aR}^{(1)} \Big|_{z_{ex}=3} \frac{94338,7 - 94335,3}{94335,3} \Rightarrow 0,0036\% \quad (7.5b)$$

Die Korrelationsenergie wird für den relativistischen Bereich also vernachlässigbar.

Es zeigt sich also, dass die RST im Vergleich zu anderen semiklassischen Theorien ähnlich gute Ergebnisse liefert - trotz einer anderen mathematischen Struktur.

3. Vergleicht man die semiklassischen Ergebnisse $\left\{ \overset{\circ}{J}_{all(2)}^{(1)}, \overset{\circ}{J}_{1/Z(2)}^{(1)}, \overset{\circ}{J}_{RST(2)}^{(1)} \right\}$ mit dem Experiment, so zeigt es sich, dass aufgrund der fehlenden Lamb-Shift und anderer QED-Korrekturen, alle semiklassischen Werte sehr stark vom Experiment abweichen - während sich die semiklassischen Werte untereinander um ca. 10 eV unterscheiden, liegt der Unterschied zu den experimentellen Daten bei ca. 250 eV.

7.2 Selbstwechselwirkung

Wie oben erwähnt, reicht eine semiklassische Beschreibung vor allem im Bereich großer z_{ex} nicht aus, um die experimentellen Ionisierungsenergien zu erklären. In diesem Abschnitt werden deshalb nun QED-Korrekturen mit berücksichtigt. Für $1/Z$ und “all order MBPT” [2, 14] wurden dazu Standardverfahren der QED verwendet. Für die RST jedoch wurden die Strukturen der Theorie selbst genutzt, um Selbstwechselwirkungen in die Theorie einzubetten, anstatt den semiklassischen Werten $\overset{\circ}{J}_{RST(2)}^{(n)}$ irgendwelche Korrekturwerte aus einer anderen Theorie (z.B. QED) zu überlagern. Dabei wird die Selbstwechselwirkung in die RST, wie bereits in Abschnitt 3.3.5 beschrieben, über den Kompatibilitätstensor \mathcal{K} (3.45) eingebunden; dieser beinhaltet einen freien Parameter u (3.50), den sogenannten Selbstwechselwirkungsparameter, über den die Stärke der Selbstwechselwirkung festgelegt werden kann, wobei für den Fall $u = 0$ keine Selbstwechselwirkungen auftreten. Für den hier betrachteten Fall von stationären isotropen Zuständen lässt sich der Einfluss des Selbstwechselwirkungsparameters klar aufzeigen: Betrachtet man die Poisson-Gleichung für das elektrostatische Potential (6.34), so ist diese unabhängig von u , wohingegen u in der magnetischen Poisson-Gleichung (6.40) explizit vorkommt, d.h. nur die magnetischen Wechselwirkungen werden von u beeinflusst. Man sieht hier auch, dass für den Fall $u \rightarrow \infty$ die magnetischen Potentiale zu Null werden und man so eine elektrostatische Näherung erhält. Natürlich schlägt sich diese besondere Wirkungsweise der Selbstwechselwirkung in der RST auch in den Energiefunktionalen nieder: Über den magnetischen Anteil $E_R^{(m)}$ beeinflusst u das Gesamtenergiefunktional E_T'' (6.78), wohingegen sowohl der elektrische Teil $E_R^{(e)}$ (6.82), als auch der materielle Anteil E_D (6.44), von u unabhängig sind.

Die Selbstwechselwirkung wird wie folgt in die Berechnung der Ionisierungsenergie integriert: Zunächst wird die semiklassische Beziehung (7.1) in exakter Form dargestellt

$$J_{RST(2)}^{(n)} = Mc^2 + E_{T(1)}^{(n)} - E_{T(2)}^{(n)}, \quad (7.6)$$

wobei hier angenommen wird, dass sich $J_{RST(2)}^{(n)}$ und $E_{T(2)}^{(n)}$ auf das vollständige *Dreikörpersystem* beziehen (zwei Elektronen und der Kern inklusive aller Selbstwechselwirkungen) und die Einelektronenbindungsenergie $E_{T(1)}^{(n)}$ auf das *Zweikörpersystem* (Elektron und der (punktförmige) Kern). Es wird weiterhin angenommen, dass für das Dreikörperproblem die Austauschwechselwirkungen B_μ zwischen den beiden Elektronen neben den elektromagnetischen Kräften A_μ aktiviert sind und zusätzlich die Selbstwechselwirkungen für alle drei Teilchen berücksichtigt werden (d.h. $u \neq 0$).

Die Austauschwechselwirkungen können natürlich nur zwischen den beiden Elektronen wirken, da sie nur zwischen identischen Teilchen auftreten. Zur exakten Berechnung des Dreikörperproblems siehe [22]. Hier soll eine semiphänomenologische Näherung genügen; dazu wird angenommen, dass sich die Dreiteilchenbindungsenergie für die zwei Elektronen durch die Summe aus Zweiteilchenbindungsenergie (${}^{[u]}E_{T(2)}^{(n)}$) und dem doppelten Beitrag der Einelektronen-Selbstwechselwirkungsenergie ($\delta E_{T(1)}^{(n)}$) nähern lässt:

$$E_{T(2)}^{(n)} \Rightarrow {}^{[u]}E_{T(2)}^{(n)} + 2\delta E_{T(1)}^{(n)} . \quad (7.7)$$

Der erste Beitrag ${}^{[u]}E_{T(2)}^{(n)}$ ist der Wert des Gesamtenergiefunctionals E''_{TX} (6.78) für die Lösung des Zweiteilcheneigenwertproblems (6.27) mit den Poisson-Gleichungen (6.29), (6.35) und (6.38). Hierbei wirkt der Kern als eine feste externe Quelle und tritt in der Dynamik des Zweiteilchensystems nicht auf; das Zweiteilchensystem soll jedoch sowohl Austausch- ($B \neq 0$) als auch Selbstwechselwirkungen (d.h. $u \neq 0$) beinhalten. Der zweite Term auf der rechten Seite von (7.7) ist der phänomenologische Anteil des Ansatzes bedingt durch die Selbstwechselwirkungen und beträgt zweimal die Energiedifferenz $\delta E_{T(1)}^{(n)}$ der Einelektronenbindungsenergie

$$\delta E_{T(1)}^{(n)} = E_{T(1)}^{(n)} - \overset{\circ}{E}_{T(1)}^{(n)} , \quad (7.8)$$

wobei $\overset{\circ}{E}_{T(1)}$ gleich der semiklassischen Einelektronenbindungsenergie (7.2) ist. Die phänomenologische Annahme (7.7) basiert dabei auf der Additivität der Einteilchen RST-Lamb-Shifts (7.8) um damit die *Dreiteilchen*-Energie $E_{RST(2)}^{(n)}$ (7.7) zu erhalten (Kern plus zwei Elektronen). Natürlich ist eine solche Konstruktion nur eine Näherung der tatsächlichen Energie, es wird sich aber zeigen, dass es sich um eine sinnvolle Annahme handelt. Betrachtet man nämlich die elektronische Wechselwirkungsenergie ΔE_{RST}

$$\Delta E_{RST}^{(n)} \doteq E_{T(2)}^{(n)} - 2E_{T(1)}^{(n)} \equiv J_{(2)}^{(n)} - J_{(1)}^{(n)} \quad (7.9)$$

mit

$$J_{(1)}^{(n)} = Mc^2 - E_{T(1)}^{(n)} , \quad (7.10)$$

und $J_{(2)}^{(n)}$ aus (7.6) so zeigt es sich, dass sich diese additiven Einteilchenbeiträge wegheben, wenn man die elektronische Wechselwirkungsenergie ΔE_{RST} für den $ns^2 \ ^1S_0$ Zustand betrachtet:

$$\begin{aligned} \Delta E_{RST}^{(n)} &\Rightarrow \left({}^{[u]}E_{T(2)}^{(n)} + 2\delta E_{T(1)}^{(n)} \right) - 2 \left(\overset{\circ}{E}_{T(1)}^{(n)} + \delta E_{T(1)}^{(n)} \right) \\ &= {}^{[u]}E_{T(2)}^{(n)} - 2\overset{\circ}{E}_{T(1)}^{(n)} . \end{aligned} \quad (7.11)$$

Es scheint, als sei es gerade dieses Wegheben der Einteilchenbeiträge $\delta E_{T(1)}^{(n)}$ in den Wechselwirkungsenergien ΔE_{exp} , das es für die Experimentatoren attraktiv macht, ΔE_{exp} zu bestimmen und mit den verschiedenen theoretischen Vorhersagen $\Delta E_{theo}^{(1)}$ zu vergleichen, siehe entsprechende Bemerkungen in [10].

Mit Hilfe von Gleichung (7.11) lässt sich nun unter Kenntnis der semiklassischen Einteilchenbindungsenergien $\overset{\circ}{E}_{T(1)}^{(n)} = M_*^{(n)} c^2$ (7.2) der Wert des Selbstwechselwirkungsparameters u bestimmen, indem man die RST-Vorhersagen $\Delta E_{RST}^{(n)}$ (7.11) mit den experimentellen Werten $\Delta E_{exp}^{(n)}$ gleichsetzt

$$\Delta E_{exp}^{(n)} \Leftrightarrow \left([^u]E_{T(2)}^{(n)} - 2M_*^{(n)} c^2 \right) . \quad (7.12)$$

Aus dieser Gleichsetzung lässt sich der Wert von u für den $ns^2 \ ^1S_0$ Zustand bestimmen:

7.2.1 Bestimmung des Selbstwechselwirkungsparameters u

Gleichung (7.12) gibt an, wie sich der Wert von u aus experimentellen Daten bestimmen lässt. Allerdings gibt es im Moment nur sehr wenige experimentelle Werte im Bereich großer z_{ex} , wo die RST ja besonders nah an das Experiment heranreichen soll, da die relativistischen Effekte für große z_{ex} immer entscheidender werden. Deshalb sollen hier zwei verschiedene Werte für den Selbstwechselwirkungsparameter u auf unterschiedliche Weise ermittelt werden.

Zum einen lässt sich argumentieren, dass die RST-Ergebnisse am besten mit dem experimentellen Wert für die größte gemessene Kernladungszahl $z_{ex} = 83$ übereinstimmen sollen; für diesen Fall wird mit Hilfe von Gleichung (7.12) ein Wert des Selbstwechselwirkungsparameters von $u = 0,030523$ ermittelt. Allerdings kann dieser Messwert natürlich mit Messfehlern behaftet sein und so wurde des weiteren eine Bestimmung von u über eine Minimierung der Fehlerquadrate zwischen den RST-Werten und den experimentellen Daten aus [10]) für $z_{ex}=32,54,66,74,76$ und 83 durchgeführt. Aus Graphik 7.2 erhält man hier einen Wert von $u \approx 0,047$.

7.2.2 Vergleich der verschiedenen Ansätze mit Selbstwechselwirkung

Um die elektrische Wechselwirkungsenergie $\Delta E^{(1)}$ zwischen den verschiedenen theoretischen Ansätzen vergleichen zu können, muß man die Daten von Drake [2] und

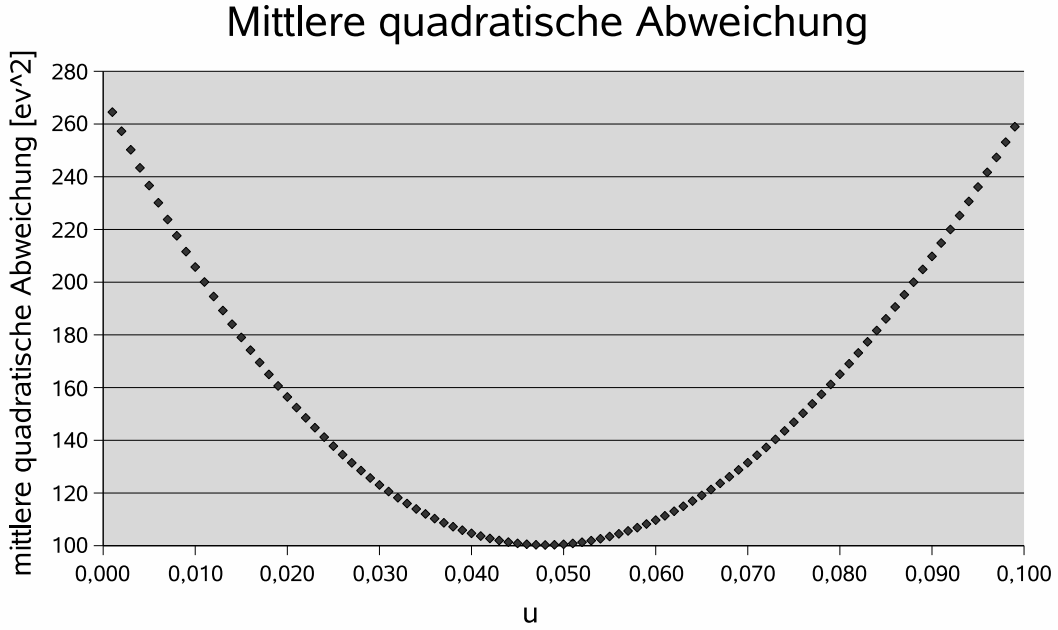


Abbildung 7.2: Mittlere quadratische Abweichung für die Grundzustandswechselwirkungsenergie der RST $\Delta E_{RST}^{(1)}$ von den experimentellen Daten $\Delta E_{exp}^{(1)}$ aus [10] in Abhängigkeit vom Selbstwechselwirkungsparameter u

der “all order MBPT” [14] zunächst entsprechend der Beziehung

$$\Delta E^{(1)} \doteq E_{T(2)}^{(1)} - 2E_{T(1)}^{(1)} \equiv J_{(2)}^{(1)} - J_{(1)}^{(1)} \quad (7.13)$$

umrechnen. Dabei wurden jeweils die Ionisierungsenergien für Elektronen von heliumähnlichen Ionen inklusive aller Korrekturen $J_{(2)}^{(1)}$ aus deren Arbeiten entnommen und davon wurden die theoretischen Ionisierungsenergien von W. R. Johnson und G. Soff [8] für die Elektronen von wasserstoffähnlichen Ionen $J_{Soff(1)}^{(1)}$ abgezogen.

Tabelle 7.2 zeigt die genäherten RST-Vorhersagen für $\Delta E_{RST}^{(1)}$ (7.11), sowie die entsprechenden Vorhersagen $\Delta E_{1/Z}^{(1)}$ aus [2] und $\Delta E_{all}^{(1)}$ aus [14] und die experimentellen Werte, die bis zu einer Kernladungszahl von $z_{ex} = 42$ dem NIST-Archiv [12] entnommen wurden und für $z_{ex} = 32, 54, 66, 74, 76, 83$ aus [10]. Außerdem ist die Differenz der jeweiligen Werte zu $\Delta E_{1/Z}^{(1)}$ aufgelistet, sowie die relative Abweichung zu den $\Delta E_{1/Z}^{(1)}$ -Werten, vergl. auch [10]

$$\tilde{\Delta}_{RST}^{(1)} = \frac{\Delta E_{RST}^{(1)} - \Delta E_{1/Z}^{(1)}}{\Delta E_{1/Z}^{(1)}} \quad (7.14a)$$

$$\tilde{\Delta}_{all}^{(1)} = \frac{\Delta E_{all}^{(1)} - \Delta E_{1/Z}^{(1)}}{\Delta E_{1/Z}^{(1)}} \quad (7.14b)$$

$$\tilde{\Delta}_{NIST}^{(1)} = \frac{\Delta E_{NIST}^{(1)} - \Delta E_{1/Z}^{(1)}}{\Delta E_{1/Z}^{(1)}} \quad (7.14c)$$

$$\tilde{\Delta}_{exp}^{(1)} = \frac{\Delta E_{exp}^{(1)} - \Delta E_{1/Z}^{(1)}}{\Delta E_{1/Z}^{(1)}} . \quad (7.14d)$$

Die RST-Werte wurden mit den Selbstwechselwirkungsparametern $u = 0$, $u = 0,030523$ und $u = 0,047$ bestimmt.

Abbildung 7.3 zeigt die Differenz zwischen den $1/Z$ -Werten $\Delta E_{1/Z}^{(1)}$ und den RST-Werten $\Delta E_{RST}^{(1)}$ für die Selbstwechselwirkungsparameter $u = 0$, $u = 0,030523$ und $u = 0,047$. Es soll hier ein Einblick gegeben werden, wie der Wert des Selbstwechselwirkungsparameters u die RST-Vorhersagen beeinflusst. Allerdings zeigt sich der Einfluss von u vor allem bei größeren z_{ex} -Werten, d.h. die nahezu konstante Differenz zu den $1/Z$ -Werten $\Delta_{1/Z}^{(1)}$ von ca. $1,2 \text{ eV}$ für kleine z_{ex} aufgrund der fehlenden Korrelationsenergie bleibt von u unbeeinflusst.

Abbildung 7.4 zeigt die Kurven der relativen Abweichungen $\tilde{\Delta}_{RST}^{(1)}$, $\tilde{\Delta}_{all}^{(1)}$, $\tilde{\Delta}_{NIST}^{(1)}$ und $\tilde{\Delta}_{exp}^{(1)}$ von den $1/Z$ -Werten $\tilde{\Delta}_{1/Z}^{(1)}$. Es zeigt sich, dass die RST, indem man den Selbstwechselwirkungsparameter u entsprechend wählt - hier als $u = 0,030523$, für große z_{ex} die beste Übereinstimmung mit den experimentellen Daten liefern kann; allerdings sind die experimentellen Daten in diesem Bereich nicht völlig zuverlässig und auch nicht besonders zahlreich. Ein veränderter Verlauf der experimentellen Werte ließe sich jedoch durch eine andere Wahl von u ebenfalls aus der RST erhalten.

Z_{ex}	$\Delta E_{1/Z}$ [2] [eV]	ΔE_{RST} [eV]	$\Delta E_{1/Z} -$ ΔE_{RST} [eV]	$\hat{\Delta}_{\text{RST}}$ (7.14a)	ΔE_{RST} [eV]	$\Delta E_{1/Z} -$ ΔE_{RST} [eV]	$\hat{\Delta}_{\text{RST}}$ (7.14a)	ΔE_{RST} [eV]	$\Delta E_{1/Z} -$ ΔE_{RST} [eV]	$\hat{\Delta}_{\text{RST}}$ (7.14a)
		u=0,030523			u=0,047			u=0,0		
2	29,830	31,011	1,180	0,039566	31,011	1,181	0,039590	31,011	1,180	0,039569
3	46,814	48,027	1,213	0,025900	48,032	1,218	0,026010	48,027	1,213	0,025907
4	63,822	65,059	1,237	0,019380	65,065	1,243	0,019472	65,060	1,238	0,019395
5	80,852	82,100	1,248	0,015441	82,101	1,250	0,015458	82,102	1,250	0,015466
6	97,903	99,156	1,253	0,012801	99,160	1,258	0,012845	99,160	1,257	0,012838
7	114,979	116,231	1,252	0,010891	116,239	1,261	0,010963	116,237	1,258	0,010943
8	132,083	133,350	1,267	0,009592	133,336	1,253	0,009484	133,359	1,276	0,009661
9	149,219	150,472	1,252	0,008393	150,475	1,256	0,008415	150,485	1,266	0,008482
10	166,391	167,654	1,262	0,007587	167,662	1,271	0,007636	167,678	1,286	0,007730
20	341,015	342,280	1,265	0,003710	342,216	1,201	0,003522	342,453	1,438	0,004216
30	524,056	525,146	1,089	0,002079	524,868	0,812	0,001550	525,682	1,626	0,003102
32	562,097	563,116	1,019	0,001813	562,753	0,656	0,001167	563,838	1,741	0,003097
34	600,707	601,667	0,961	0,001599	601,207	0,500	0,000833	602,463	1,756	0,002923
36	639,935	640,758	0,822	0,001285	640,268	0,333	0,000520	641,734	1,799	0,002811
40	720,431	721,047	0,615	0,000854	720,300	-0,132	-0,000183	722,333	1,902	0,002640
42	761,775	762,178	0,403	0,000529	761,403	-0,372	-0,000488	763,784	2,009	0,002637
50	935,819	935,367	-0,453	-0,000484	933,904	-1,915	-0,002047	938,101	2,282	0,002438
54	1028,813	1027,673	-1,140	-0,001108	1025,837	-2,976	-0,002893	1031,156	2,342	0,002277
60	1177,222	1174,907	-2,316	-0,001967	1172,273	-4,949	-0,004204	1179,683	2,460	0,002090
65	1310,385	1306,848	-3,538	-0,002700	1303,548	-6,837	-0,005218	1313,003	2,617	0,001997
66	1338,186	1334,338	-3,848	-0,002875	1330,667	-7,519	-0,005619	1340,800	2,614	0,001954
70	1453,648	1448,648	-5,000	-0,003439	1444,407	-9,241	-0,006357	1456,451	2,803	0,001928
74	1576,616	1570,199	-6,417	-0,004070	1565,115	-11,501	-0,007295	1579,537	2,921	0,001853
76	1641,209	1634,025	-7,184	-0,004377	1628,435	-12,774	-0,007783	1644,249	3,040	0,001853
80	1777,423	1768,553	-8,870	-0,004991	1761,985	-15,439	-0,008686	1780,606	3,183	0,001791
83	1886,331	1876,059	-10,273	-0,005446	1868,635	-17,696	-0,009381	1889,764	3,433	0,001820
90	2166,945	2152,973	-13,972	-0,006448	2143,109	-23,836	-0,011000	2170,878	3,933	0,001815
100	2651,839	2632,095	-19,743	-0,007445	2617,565	-34,274	-0,012924	2658,022	6,183	0,002332

Z_{ex}	ΔE_{all} [14] [eV]	$\Delta E_{1/Z}$ $-\Delta E_{\text{all}}$ [eV]	$\hat{\Delta}_{\text{all}}$ (7.14b)	ΔE_{NIST} [12] [eV]	$\Delta E_{1/Z}$ $-\Delta E_{\text{NIST}}$ [eV]	$\hat{\Delta}_{\text{NIST}}$ (7.14c)	ΔE_{exp} [10] [eV]	$\Delta E_{1/Z}$ $-\Delta E_{\text{exp}}$ [eV]	$\hat{\Delta}_{\text{exp}}$ (7.14d)
2			0,000000	29,830	0,000	-0,000001			
3	46,808	-0,006	-0,000138	46,814	0,000	-0,000001			
4	63,813	-0,010	-0,000153	63,824	0,002	0,000027			
5	80,838	-0,013	-0,000164	80,851	-0,001	-0,000010			
6	97,884	-0,018	-0,000186	97,906	0,003	0,000035			
7	114,957	-0,022	-0,000190	114,975	-0,004	-0,000038			
8	132,057	-0,026	-0,000194	132,120	0,037	0,000279			
9	149,192	-0,028	-0,000187	149,210	-0,010	-0,000065			
10	166,358	-0,033	-0,000198	166,377	-0,014	-0,000086			
20	340,939	-0,076	-0,000223	341,163	0,148	0,000434			
30	523,921	-0,135	-0,000258	523,830	-0,226	-0,000432			
32	561,952	-0,145	-0,000257	562,100	0,003	0,000005	562,500	0,403	0,000717
34	600,546	-0,161	-0,000268	600,331	-0,376	-0,000625			
36	639,752	-0,184	-0,000287	639,070	-0,865	-0,001352			
40	720,191	-0,240	-0,000334						
42	761,507	-0,268	-0,000352	780,546	18,771	0,024641			
50	935,382	-0,437	-0,000467						
54	1028,254	-0,560	-0,000544				1027,200	-1,613	-0,001568
60	1176,403	-0,819	-0,000696						
66	1337,008	-1,178	-0,000881				1341,600	3,414	0,002551
70	1452,125	-1,523	-0,001048						
74	1574,640	-1,976	-0,001253				1568,000	-8,616	-0,005465
76	1638,967	-2,242	-0,001366				1608,000	-33,209	-0,020234
80	1774,489	-2,934	-0,001651						
83							1876,000	-10,331	-0,005477
89	122062,984	0,000	0,000000				0,000	0,000	0,000000
90	2160,910	-6,035	-0,002785						
100	2637,955	-13,884	-0,005235						

Tabelle 7.2: Grundzustandswechselwirkungsenergien ΔE ($n = 1$)

Die genäherten RST-Vorhersagen $\Delta E_{\text{RST}}^{(1)}$ (7.11) für Werte des Selbstwechselwirkungsparameters von $u = 0,030523$ und $0,047$ bzw. ohne Selbstwechselwirkung ($u = 0$), sowie die entsprechenden Vorhersagen von $\Delta E_{1/Z}^{(1)}$ aus [2] und $\Delta E_{\text{all}}^{(1)}$ aus [14], werden mit den experimentellen Werten aus [10, 12] verglichen. Zusätzlich ist die Differenz der übrigen Werte zu den $\Delta E_{1/Z}^{(1)}$ -Werten, bzw. die relative Abweichung (7.14) von den $\Delta E_{1/Z}^{(1)}$ -Werten, aufgelistet.

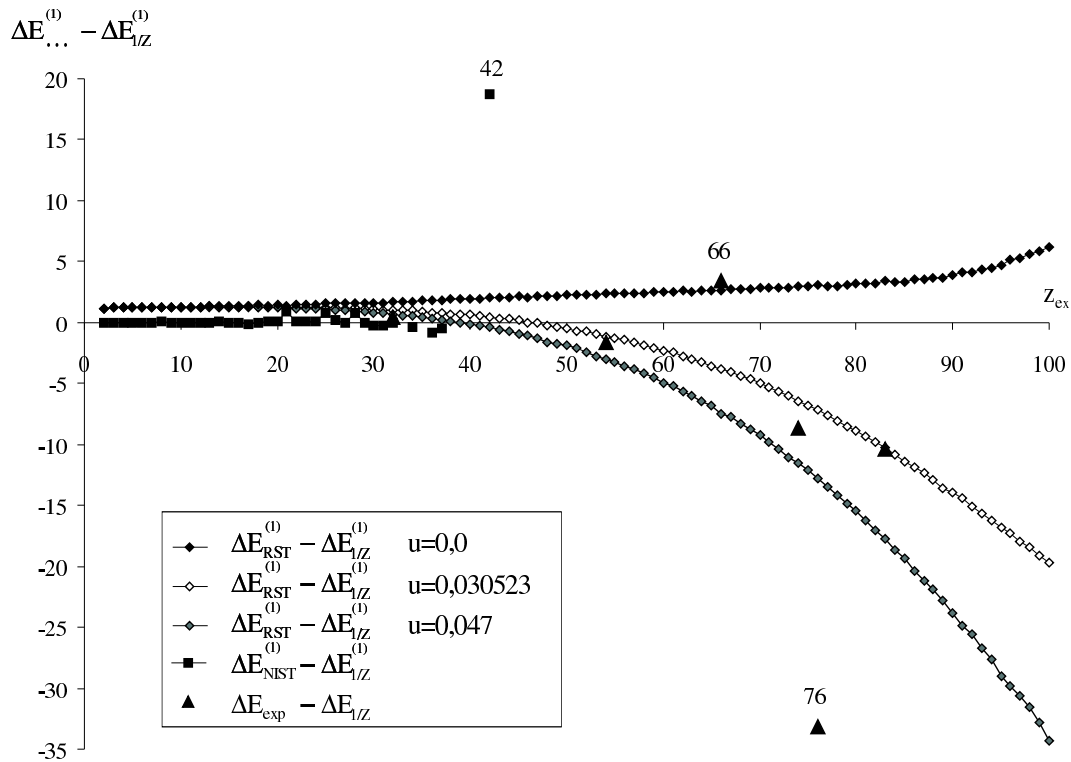


Abbildung 7.3: Grundzustandswechselwirkungsenergien

Die hier aufgetragene Differenz zwischen den $1/Z$ -Werten $\Delta E_{1/Z}^{(1)}$ und den RST-Werten $\Delta E_{RST}^{(1)}$ für die Selbstwechselwirkungsparameter $u = 0$, $u = 0,030523$ und $u = 0,047$ gibt einen Einblick, wie der Wert des Selbstwechselwirkungsparameters u die RST-Vorhersagen beeinflusst; dabei ergeben sich Änderungen vor allem im Bereich großer z_{ex} , wohingegen die Abweichung zu den $1/Z$ -Werten $\Delta E_{1/Z}^{(1)}$ für kleine z_{ex} nahezu unabhängig vom Wert von u ist. Die Übereinstimmung zwischen RST und experimentellen Daten ist für $u = 0,030523$ sehr gut.

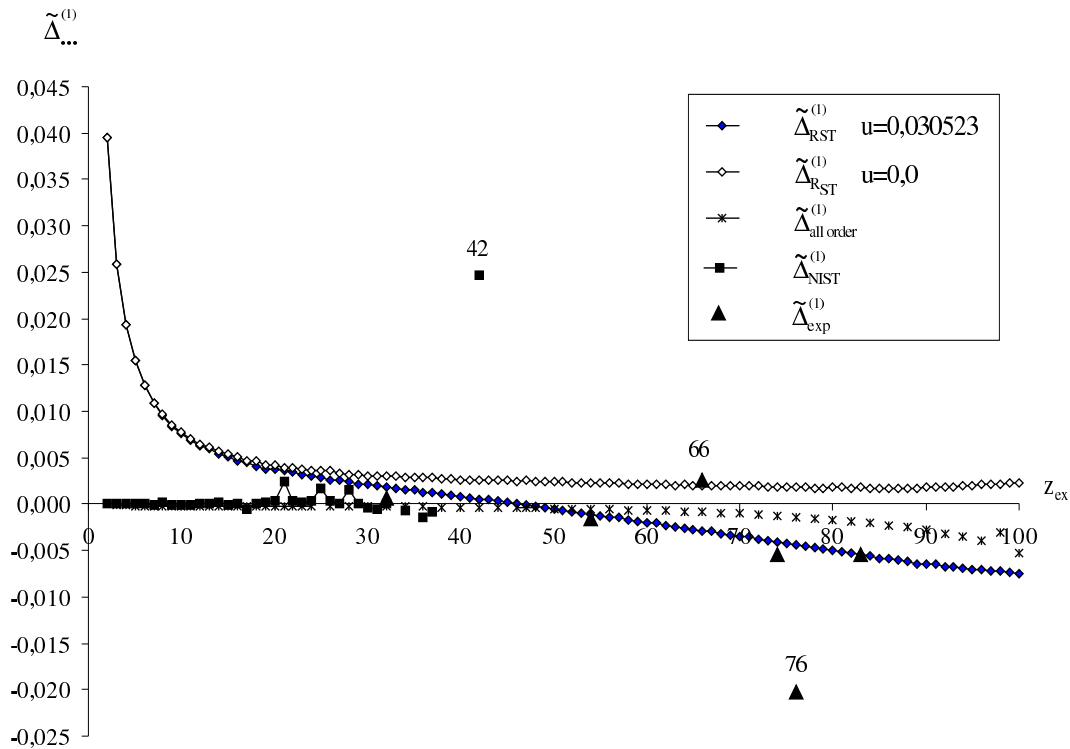


Abbildung 7.4: **Relative Abweichungen der Grundzustandswechselwirkungsenergien bezüglich der $1/Z$ -Vorhersagen**

Die relative Abweichung $\tilde{\Delta}_{...}^{(1)}$ (7.14) der Grundzustandswechselwirkungsenergien $\Delta E_{...}^{(1)}$ von den Vorhersagen der $1/Z$ -Entwicklung $\Delta E_{1/Z}^{(1)}$ zeigen die große Genauigkeit der RST-Vorhersagen für den Bereich größerer z_{ex} ($z_{ex} \gtrsim 50$). In diesem relativistischen Bereich liegen die RST-Vorhersagen (mit einem Wert von $u = 0.030523$) deutlich besser am Experiment als die anderen theoretischen Vorhersagen. Im nichtrelativistischen Bereich kleiner z_{ex} ($z_{ex} \lesssim 20$) werden die RST-Vorhersagen allerdings schlecht aufgrund der fehlenden Korrelationsenergie. Es fällt außerdem auf, dass die experimentellen Werte für $z_{ex} = 42, 66, 76$ sehr weit von allen theoretischen Vorhersagen entfernt liegen.

7.3 Ionisierungsenergien mit Selbstwechselwirkung

Eine weitere Möglichkeit zur Überprüfung der atomaren RST-Vorhersagen ergibt sich durch die Berechnung der RST-Ionisierungsenergien ${}^{[u]}J_{RST(2)}^{(1)}$ von heliumähnlichen Ionen nach Gleichung (7.6). Die RST-Vorhersagen kann man dann wieder mit den experimentellen Werten aus [10] und [12], oder auch mit den Vorhersagen der anderen theoretischen Ansätze [14, 2] vergleichen. Für diesen Vergleich beschränkt man sich auch hier auf den semiphänomenologischen RST-Ansatz, der darin besteht, die Näherungen (7.7) und (7.8) in die exakte Beziehung (7.6) einzusetzen. Damit erhält man näherungsweise Vorhersagen der RST für ${}^{[u]}J_{RST(2)}^{(n)}$, die wie folgt definiert sind:

$$J_{RST(2)}^{(n)} \Rightarrow {}^{[u]}J_{RST(2)}^{(n)} = (M + M_*^{(n)}) c^2 - {}^{[u]}E_{T(2)}^{(n)} - \delta E_{T(1)}^{(n)}. \quad (7.15)$$

Dabei unterscheidet sich dieses Ergebnis von seinem semiklassischen Analogon (7.1) nicht nur durch die Ersetzung der semiklassischen Bindungsenergie $\overset{\circ}{E}_{T(2)}^{(n)}$ durch ihre Selbstwechselwirkungs-Verallgemeinerung ${}^{[u]}E_{T(2)}^{(n)}$, sondern auch durch das Auftreten des letzten Terms $\delta E_{T(1)}^{(n)}$, der phänomenologisch die QED-Lamb-Shift der Wasserstoffenergieniveaus berücksichtigen soll. Grundsätzlich muss es möglich sein, die Lamb-Shift innerhalb des Rahmens der RST zu berechnen, indem man das entsprechende Zweikörperproblem löst (d.h. man betrachtet ein Elektron plus den Kern als dynamisches Zweikörpersystem mit $u \neq 0$). Für den hier verwendeten semiphänomenologischen Ansatz nehmen wir allerdings an, dass das RST-Ergebnis ungefähr mit der entsprechenden QED-Lamb-Shift $\delta_L E_{(1)}^{(n)}$ aus [8] übereinstimmt, d.h. man setzt

$$\delta E_{T(1)}^{(n)} \Rightarrow \delta_L E_{(1)}^{(n)}. \quad (7.16)$$

Damit erlangt die semiphänomenologische Beziehung (7.15) ihre endgültige Form:

$$\begin{aligned} {}^{[u]}J_{RST(2)}^{(n)} &= M c^2 + \left[M_*^{(n)} c^2 + \delta_L E_{(1)}^{(n)} \right] - \left[{}^{[u]}E_{T(2)}^{(n)} + 2\delta_L E_{(1)}^{(n)} \right] \\ &= (M + M_*^{(n)}) c^2 - {}^{[u]}E_{T(2)}^{(n)} - \delta_L E_{(1)}^{(n)}. \end{aligned} \quad (7.17)$$

Durch die Beschränkung auf den Grundzustand ($n = 1$) lässt sich die semiklassische Einteilchenbindungsenergie $M_*^{(n)}$ aus dem Spektrum (7.2) übernehmen, die Zweiteilchen-RST-Bindungsenergie ${}^{[u]}E_{T(2)}^{(1)}$ wird aus der Lösung des RST-Eigenwertsystems (6.26) bestimmt und als QED-Lamb-Shift $\delta_L E_{(1)}^{(n)}$ wird der Wert aus [8] übernommen. Tabelle 7.3 zeigt Werte für den Grundzustand ($n = 1, u = 0, 030523$) und Abbildung 7.5 ist wieder eine graphische Veranschaulichung der Ergebnisse.

Interessant an den RST-Werten für die Ionisierungsenergie ist, dass sie unter Verwendung desselben Selbstwechselwirkungsparameters $u = 0, 030523$ dieselben

z_{ex}	$J_{1/Z(2)}^{(1)}$	${}^{[u]}J_{RST(2)}^{(1)}$ $u = 0, 00$	${}^{[u]}J_{RST(2)}^{(1)}$ $u = 0, 030523$	$J_{all(2)}^{(1)}$ [14]	$J_{NIST(2)}^{(1)}$ [12]	$J_{exp(2)}^{(1)}$ [10]
2	24,59	23,4145	23,4146		24,59	
3	75,64	74,4369	74,4372	75,65	75,64	
4	153,9	152,6717	152,6726	153,91	153,89	
5	259,37	258,1410	258,1430	259,39	259,38	
6	392,09	390,8562	390,8598	392,11	392,09	
7	552,07	550,8355	550,8414	552,09	552,07	
8	739,33	738,0810	738,0900	739,35	739,29	
9	953,9	952,6646	952,6779	953,93	953,91	
10	1195,81	1194,5594	1194,5833	1195,84	1195,82	
20	5128,85	5127,4857	5127,6583	5128,92	5128,7	
30	11864,88	11863,3572	11863,8936	11865,01	11865,1	
32	13557,34	13555,7014	13556,4232	13557,48	13557,33	13556,93
34	15367,38	15365,7357	15366,5313	15367,54	15367,34	
36	17296,28	17294,5971	17295,5737	17296,46	17297,14	
40	21516,25	21514,4771	21515,7639	21516,49		
42	23810,39	23808,5156	23810,1219	23810,66	23791,67	
50	34256,59	34254,4683	34257,2028	34257,02		
54	40270,91	40268,7362	40272,2185	40271,47		40272,52
60	50338,38	50336,1190	50340,8949	50339,2		
66	61735,33	61732,9162	61739,3781	61736,5		61731,91
70	70121,17	70118,5760	70126,3788	70122,69		
74	79179,03	79176,3657	79185,7037	79181,01		79187,65
76	83973,26	83970,5393	83980,7635	83975,5		84006,47
80	94120,3	94117,4410	94129,4943	94123,23		
83	102246,55	102243,3473	102257,0530			102256,88
90	123086,53	123082,9332	123100,8386	123092,56		
100	158152,63	158146,7983	158172,7251	158166,51		
ALLE DATEN IN eV						

z_{ex}	$J_{1/Z(2)}^{(1)} - {}^{[u]}J_{RST(2)}^{(1)}$ $u = 0, 00$	$J_{1/Z(2)}^{(1)} - {}^{[u]}J_{RST(2)}^{(1)}$ $u = 0, 030523$	$J_{1/Z(2)}^{(1)} - J_{all(2)}^{(1)}$	$J_{1/Z(2)}^{(1)} - J_{NIST(2)}^{(1)}$	$J_{1/Z(2)}^{(1)} - J_{exp(2)}^{(1)}$
2	1,172882	1,172810		-0,00001	
3	1,203259	1,202920	-0,006459	-0,00006	
4	1,224543	1,223613	-0,009771	0,00176	
5	1,233452	1,231481	-0,013273	-0,00073	
6	1,234451	1,230874	-0,018233	0,00347	
7	1,232051	1,226121	-0,021902	-0,00426	
8	1,246120	1,237076	-0,025686	0,03710	
9	1,233821	1,220490	-0,027959	-0,00881	
10	1,248836	1,224961	-0,032976	-0,01372	
20	1,362764	1,190188	-0,076149	0,14845	
30	1,519836	0,983403	-0,134958	-0,22297	
32	1,636358	0,914601	-0,144670	0,00778	0,4
34	1,646807	0,851185	-0,160872	0,03801	
36	1,682750	0,706174	-0,183770	-0,86015	
40	1,777242	0,490437	-0,240312		
42	1,873594	0,267273	-0,267848	18,71566	
50	2,119295	-0,615209	-0,437152		
54	2,172287	-1,310027	-0,559566		-1,61
60	2,260829	-2,515116	-0,819402		
66	2,410133	-4,051764	-1,178352		3,41
70	2,590329	-5,212454	-1,523264		
74	2,667637	-6,670355	-1,976006		-8,62
76	2,719664	-7,504516	-2,241522		-33,21
80	2,856796	-9,196495	-2,933647		
83	3,199878	-10,505860			-10,33
90	3,591767	-14,313592	-6,035414		
100	5,827401	-20,099429	-13,883552		
ALLE DATEN IN eV					

Tabelle 7.3: Ionisierungsenergien mit Selbstwechselwirkung

Die RST-Ionisierungsenergien ${}^{[u]}J_{RST(2)}^{(1)}$ (7.15) für $u = 0$ und $u = 0, 030523$ werden mit den Ionisierungsenergien $J_{all(2)}^{(1)}$ aus [14] und $J_{1/Z(2)}^{(1)}$ aus [2] verglichen unter Berücksichtigung der QED-Lamb-Shift. Die RST-Vorhersagen mit $u = 0, 030523$ liegen für größere z_{ex} ($z_{ex} \gtrsim 50$) näher am Experiment als die anderen theoretischen Ansätze, wohingegen im Niedrigenergiebereich ($z_{ex} \lesssim 40$) die fehlende Korrelationsenergie die RST-Vorhersagen wieder um ca. 1, 2 eV verschiebt.

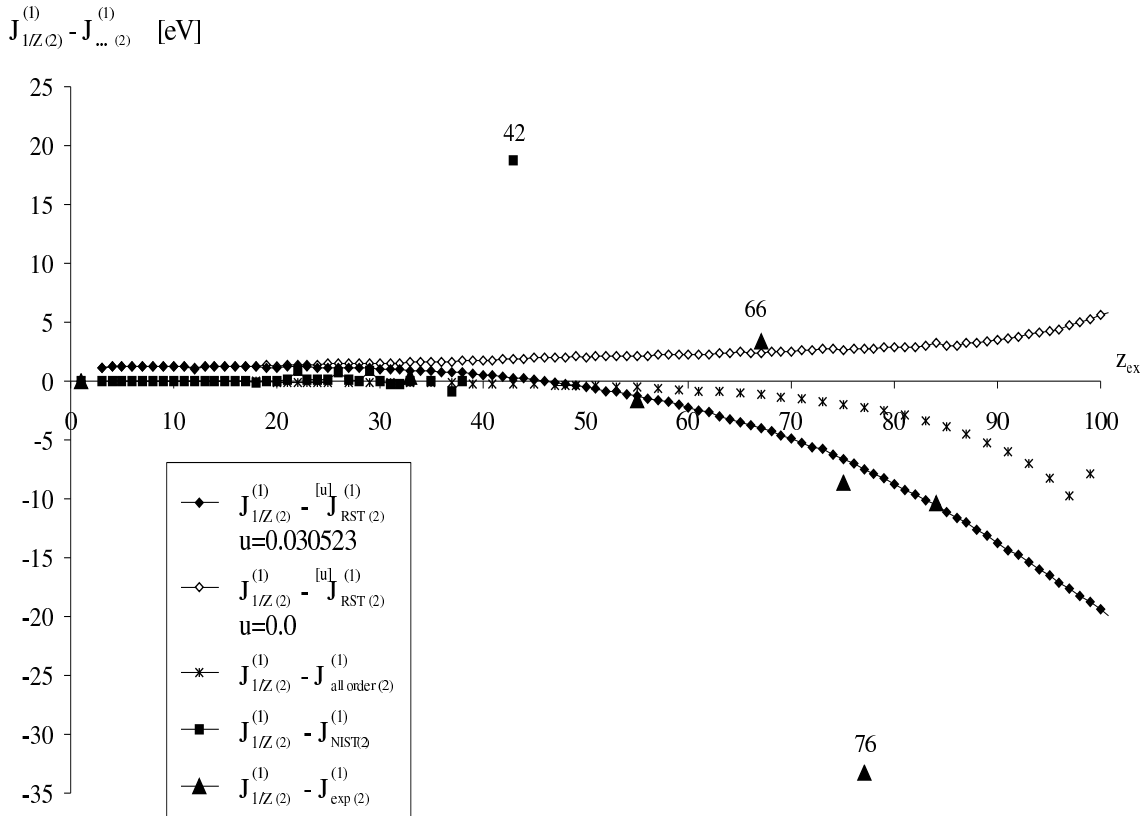


Abbildung 7.5: **Ionisierungsenergien mit Selbstwechselwirkung**

Die RST-Ionisierungsenergien ${}^{[u]}J_{RST(2)}^{(1)}$ (7.15) zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten im Bereich größerer z_{ex} ($z_{ex} \gtrsim 40$), die von den anderen theoretischen Ansätzen in dieser Form nicht erreicht wird. Diese liegen jedoch im Bereich kleinerer z_{ex} dichter am Experiment, da die RST die Korrelationsenergie mit ca. $1,2\text{ eV}$ nicht berücksichtigt. Es fällt wieder auf, dass die experimentellen Werte für $z_{ex} = 42, 66, 76$ sehr weit von allen theoretischen Vorhersagen entfernt liegen.

Schlüsse auf die Qualität der RST-Vorhersagen zulassen, wie die Grundzustandswechselwirkungsenergiewerte $\Delta E_{RST}^{(1)}$, d.h. der Selbstwechselwirkungsparameter u aus dem ΔE -Vergleich (7.12) passt auch zu den semiphänomenologischen RST-Ionisierungsenergien ${}^{[u]}J_{RST(2)}^{(1)}$ (7.15), bei denen die Einelektron-Lamb-Shift $\delta_L E_{(1)}^{(n)}$ (7.8) aus [8] hinzu addiert wurde. Die relativ gute Übereinstimmung dieser theoretischen Datenkombinationen mit den experimentellen Werten lässt sich als Bestätigung des RST-Bildes der inneratomaren Wechselwirkungen deuten. Außerdem könnten die Ergebnisse den Experimentatoren als Hinweise darauf dienen, ihre Messungen für die Kernladungszahlen $z_{ex} = 42, 66, 76$ noch einmal zu überprüfen, da diese Messungen sehr stark aus dem Rahmen (vergl. Abbildungen 7.3, 7.4 und Abbildung 7.5) *aller* theoretischen Ansätze fallen.

Kapitel 8

Zusammenfassung und Ausblick

8.1 Ergebnisse der Dissertation

Im Rahmen der vorliegenden Dissertation konnte die **Relativistische Schrödinger-Theorie (RST)** in folgenden Punkten weiter ausgearbeitet werden:

- Spezialisierung der allgemeinen RST-Gleichungen auf den stationären Zweiteilchenfall und Berechnung der zugehörigen Energiefunktionale
- Spezialisierung der RST-Gleichungen auf heliumähnliche isotrope Zustände
- Betrachtung des nichtrelativistischen Grenzfalles des verwendeten RST-Ansatzes
- Bestimmung der relativistischen Lösungen des verwendeten RST-Ansatzes
- Numerische Bestimmung der relativistischen Ionisierungsenergien und Grundzustandswechselwirkungsenergien und deren Vergleich mit anderen theoretischen Ansätzen und experimentellen Daten.
- Numerische Untersuchungen zur Bestimmung des Selbstwechselwirkungsparameters u

Es konnte gezeigt werden, dass für den speziellen hier verwendeten RST-Ansatz der nichtrelativistische Grenzfall der RST auf den bekannten Hartree-Fock-Ansatz

führt. Desweiteren wurde nachgewiesen, dass zu dem verwendeten Ansatz nur radialsymmetrische Lösungen existieren und für die nichtradialsymmetrischen Lösungen ein allgemeinerer Ansatz verwendet werden muss.

Die numerischen Berechnungen der RST-Energieniveaus zeigten, dass sich mit dem verwendeten Ansatz im relativistischen Bereich dieselben Probleme in Bezug auf die fehlende Austauschwechselwirkung zwischen den Elektronen für den Fall antiparalleler Spins ergeben, wie beim Hartree-Fock-Ansatz im nichtrelativistischen Bereich. Dennoch lagen die RST-Energieniveaus bei geeigneter Wahl des Selbstwechselwirkungsparameters u vor allem im Bereich großer Kernladungszahlen, bei denen die Berücksichtigung relativistischer Effekte immer wichtiger wird, dichter am Experiment als andere theoretische Vorhersagen.

Diese sehr gute Übereinstimmung der RST-Energieniveaus mit experimentellen Daten untermauert eindrucksvoll die physikalische Relevanz der RST.

8.2 Ausblick

Die Ergebnisse dieser Dissertation zeigen, dass es nötig ist, andere Ansätze für die RST zu finden, deren nichtrelativistischer Grenzfall nicht der Hartree-Fock-Ansatz ist und bei denen dann das Problem der verschwindenden Austauschwechselwirkung zwischen Elektronen mit antiparallelen Spins nicht auftritt. Desweiteren gilt es, die noch vorhandenen Potentiale in der RST auszuschöpfen und so weitere Selbstenergie-Korrekturen in die Theorie selbst einzubauen.

Dann wird sich zeigen, ob sich auch für komplexere Systeme wie das hier untersuchte Zwei-Fermionen-System eine so gute Übereinstimmung zwischen experimentellen Daten und RST erreichen lässt, was ein weiterer wichtiger Schritt für die Entwicklung der Relativistische Schrödinger-Theorie wäre.

Anhang A

Nachweis für die Existenz von Lösungen $\mathcal{H}_\mu(x)$ der Hamiltonschen Dynamik

Grundsätzlich ist es schwierig, eine Lösung für das gekoppelte System von Feldgleichungen der RST zu erhalten, da man neben der Materiedynamik auch die Dynamik des Hamiltonian betrachten muss. Betrachtet man allerdings die Konstruktion der Materiefelder \mathcal{I} bzw. Ψ und des Hamiltonians \mathcal{H}_μ genauer, so zeigt sich, dass es einen Zusammenhang zwischen diesen Größen gibt und zwar lassen sie sich aus demselben Gruppenelement $g \in \mathcal{GL}(N, \mathbb{C})$ konstruieren, siehe [19]. Voraussetzung hierfür ist die Erkenntnis, dass die Integrabilitätsbedingung (Wirbelgleichung für \mathcal{H}_μ) (2.9) durch folgenden Ansatz gelöst wird:

$$\mathcal{H}_\mu = i\hbar c (\mathcal{D}_\mu g) g^{-1} = i\hbar c ((\partial_\mu g) g^{-1} + \mathcal{A}_\mu) \quad (\text{A.1})$$

$$(\mathcal{D}_\mu g \doteq \partial_\mu g + \mathcal{A}_\mu g) .$$

Diese Lösung ist lokal die sehr allgemeine Lösung der Erhaltungsgleichung (2.11), d.h. der Hamiltonian \mathcal{H}_μ ist gleich der Summe aus der Maurer-Cartan-Form $(\partial_\mu g)g^{-1}$ und dem Eichfeld \mathcal{A}_μ , wobei erstere Werte aus der Lie-Algebra $\mathfrak{gl}(N, \mathbb{C})$ annimmt, letzteres Werte aus der Algebra der Strukturgruppe, die durch die Wechselwirkung festgelegt ist.

Unter einer Transformation mit dem Element S der Eichgruppe transformieren sich die RST-Größen \mathcal{A}_μ , g und \mathcal{H}_μ wie folgt

$$\mathcal{A}'_\mu = S^{-1} \mathcal{A}_\mu S + S^{-1} \partial_\mu S \quad (\text{A.2a})$$

$$g' = S^{-1}g \quad (\text{A.2b})$$

$$\mathcal{H}'_\mu = S^{-1}\mathcal{H}_\mu S. \quad (\text{A.2c})$$

Mit Hilfe der allgemeinen Form von \mathcal{H}_μ lässt sich nun die Relativistische Schrödinger-Gleichung (2.4) bzw. die Relativistische von-Neumann-Gleichung (2.5) formal lösen, wobei sich daraus folgende Form für die Wellenfunktion Ψ und die Intensitätsmatrix \mathcal{I} ergibt:

$$\Psi(x) = g(x) \cdot \Psi_* \quad (\text{A.3a})$$

$$\mathcal{I}(x) = g(x) \cdot g_* \cdot \bar{g}(x). \quad (\text{A.3b})$$

Dabei handelt es sich bei Ψ_* um einen konstanten komplexen N -dimensionalen Spaltenvektor und bei g_* um eine konstante hermitesche $N \times N$ Matrix und der adjungierte Operator \bar{g} ist das hermitisch konjugierte Gruppenelement g^\dagger multipliziert mit einer konstanten Matrix (im Klein-Gordon-Fall $\mathbf{1}$, im Dirac-Fall γ_0).

Unter Verwendung des Ansatzes (A.1) zeigt sich, dass die Erhaltungsgleichung (2.11a) für den Klein-Gordon-Fall erfüllt ist, wenn g folgender Gleichung genügt:

$$\mathcal{D}_\mu \mathcal{D}^\mu g - \left(\frac{Mc}{\hbar}\right)^2 g = 0. \quad (\text{A.4})$$

Der Masseoperator \mathcal{M} wurde proportional zu 1 gesetzt ($\mathcal{M} \sim \mathbf{1}$ für ununterscheidbare Teilchen). Analog ergibt sich Gleichung (3.25) für den Dirac-Fall mit dem Ansatz (A.1) und der Erhaltungsgleichung (2.11b) wenn g die Gleichung

$$i\hbar\gamma^\mu \mathcal{D}_\mu g = Mcg \quad (\text{A.5})$$

erfüllt. Die Gleichungen (A.4) und (A.5) entsprechen der Klein-Gordon- bzw. Dirac-Gleichung, allerdings für das Gruppenelement g anstelle eines komplexen Skalars ψ bzw. eines Dirac-Spinors Ψ . Um die gewöhnliche Klein-Gordon- bzw. Dirac-Gleichung zu erhalten, muss man die Operatorgleichungen (A.4) und (A.5) auf ein entsprechendes konstantes Element Ψ_* wirken lassen und die Definition der Wellenfunktion Ψ (A.3a) ausnutzen.

D.h. die Hamiltonsche Dynamik lässt sich auf die Klein-Gordon-Gleichung, bzw. die Dirac-Gleichung zurückführen, wobei über (A.1) die Existenz von Lösungen für diese Gleichungen gesichert ist.

Anhang B

Abelsche Symmetriebrechung

Die Struktur der RST ist die einer Eichtheorie, wobei die Strukturgruppe der RST für ein N -Teilchen-System $U(N)$ ist. Da in der RST jedoch auch, entsprechend der allgemeinen Erfahrung, die elektromagnetischen Wechselwirkungen auf einer *abelschen* Gruppe beruhen, wird die ursprüngliche $U(N)$ -Strukturgruppe zu einer abelschen Untergruppe herunter gebrochen, die dann die tatsächliche Eichgruppe ist. Für den Fall eines Zwei-Fermionen-Systems erhält man als Eichgruppe die unitäre Untergruppe $U(1) \times U(1)$ der $U(2)$ bestehend aus den Elementen $\mathcal{S} \in U(2)$

$$\mathcal{S} = \exp[g^a \tau_a] = \exp[g_1 \tau_1] \cdot \exp[g_2 \tau_2] \quad (\text{B.1})$$

mit den reellen Gruppenparametern $g_a (= \delta_{ab} g^b)$ und den Generatoren τ_1 und τ_2 (3.6a)

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{4 \times 4} & \mathbf{0}_{4 \times 4} \\ \mathbf{0}_{4 \times 4} & -i \cdot \mathbf{1}_{4 \times 4} \end{pmatrix} \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} -i \cdot \mathbf{1}_{4 \times 4} & \mathbf{0}_{4 \times 4} \\ \mathbf{0}_{4 \times 4} & \mathbf{0}_{4 \times 4} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.2})$$

Die Transformationsvorschrift für die Konnexion \mathcal{A}_μ lautet bei einer Eichtransformation:

$$\mathcal{A}_\mu \Rightarrow \mathcal{A}'_\mu = \mathcal{S} \cdot \mathcal{A}_\mu \cdot \mathcal{S}^{-1} + \mathcal{S} \cdot \partial_\mu \mathcal{S}^{-1}, \quad (\text{B.3})$$

dabei werden die Komponenten des elektromagnetischen Anteils (A^a_μ) und des Austauschanteils (B_μ) des Eichpotentials \mathcal{A}_μ (3.4) aufgrund der Kommutatorrelationen (3.5) nicht gemischt. Man erhält also folgendes Transformationsverhalten für die Komponenten von \mathcal{A}_μ :

$$A^a_\mu \Rightarrow A'^a_\mu = A^a_\mu - \partial_\mu g^a \quad (\text{B.4a})$$

$$B_\mu \Rightarrow B'_\mu = e^{i(g_1 - g_2)} \cdot B_\mu \quad (\text{B.4b})$$

$$\overset{*}{B}_\mu \Rightarrow \overset{*}{B}'_\mu = e^{-i(g_1 - g_2)} \cdot \overset{*}{B}_\mu . \quad (\text{B.4c})$$

Damit behalten die elektromagnetischen Potentiale A^a_μ ($a = 1, 2$) ihren Status als Eichpotentiale, wohingegen sich die Austauschpotentiale nach der Reduktion der Strukturgruppe *homogen* transformieren.

Die Wellenfunktion Ψ (3.1) transformiert sich ebenfalls homogen:

$$\Psi \Rightarrow \Psi' = \mathcal{S} \cdot \Psi , \quad (\text{B.5})$$

genauso wie die Intensitätsmatrix \mathcal{I}

$$\mathcal{I} \Rightarrow \mathcal{I}' = \mathcal{S} \cdot \mathcal{I} \cdot \mathcal{S}^{-1} . \quad (\text{B.6})$$

Damit lautet die Transformationsvorschrift (B.5) für die Dirac-Spinoren

$$\psi_1 \Rightarrow \psi'_1 = e^{-ig_2} \cdot \psi_1 \quad (\text{B.7a})$$

$$\psi_2 \Rightarrow \psi'_2 = e^{-ig_1} \cdot \psi_2 . \quad (\text{B.7b})$$

(Die Überkreuzung $g_2 \leftrightarrow \psi_1$, $g_1 \leftrightarrow \psi_2$ kommt dabei durch die Form der Generatoren τ_a (B.2) zustande: τ_1 selektiert den Zustand ψ_2 aus der Gesamtwellenfunktion Ψ und τ_2 den Zustand ψ_1 .) Aufgrund der Definition der Ströme ergibt sich hieraus, dass die elektromagnetischen Ströme (3.19) invariant bleiben ($j'_{a\mu} = j_{a\mu}$), wohingegen sich der Austauschstrom h_μ (3.21a) genauso transformiert wie das komplex konjugierte Austauschpotential $\overset{*}{B}_\mu$ (B.4c):

$$h_\mu \Rightarrow h'_\mu = e^{-i(g_1 - g_2)} \cdot h_\mu \quad (\text{B.8a})$$

$$\overset{*}{h}_\mu \Rightarrow \overset{*}{h}'_\mu = e^{i(g_1 - g_2)} \cdot \overset{*}{h}_\mu . \quad (\text{B.8b})$$

(Dabei kommutieren die Diracschen Geschwindigkeitsoperatoren Γ_μ (3.15), mit Hilfe derer die Ströme definiert sind, mit den Generatoren (3.6) der gebrochenen Strukturgruppe $U(2)$).

Über die Maxwell-Gleichungen (3.36) (mit (3.49)) erhält man aus dem Transformationsverhalten der Ströme das Transformationsverhalten der Komponenten $\{F^a_{\mu\nu}; G_{\mu\nu}, \overset{*}{G}_{\mu\nu}\}$ der Bündelkrümmung $\mathcal{F}_{\mu\nu}$ (2.16). Es zeigt sich, dass die elektromagnetischen Feldstärken invariant bleiben, da die Eichgruppe abelsch ist:

$$F^a_{\mu\nu} \Rightarrow F'^a_{\mu\nu} \equiv F^a_{\mu\nu} , \quad (\text{B.9})$$

wohingegen sich die Austauschfeldstärken wie die Austauschpotentiale B_μ (B.4b), bzw. $\overset{*}{B}_\mu$ (B.4c) transformieren:

$$G_{\mu\nu} \Rightarrow G'_{\mu\nu} = e^{i(g_1 - g_2)} \cdot G_{\mu\nu} \quad (\text{B.10a})$$

$$\overset{*}{G}_{\mu\nu} \Rightarrow \overset{*}{G}'_{\mu\nu} = e^{-i(g_1 - g_2)} \cdot \overset{*}{G}_{\mu\nu} . \quad (\text{B.10b})$$

Die Bündelkrümmung $\mathcal{F}_{\mu\nu}$ (3.9) transformiert sich entsprechend dem Transformationsverhalten (B.9) und (B.10) ihrer Komponenten ebenfalls homogen:

$$\mathcal{F}_{\mu\nu} \Rightarrow \mathcal{F}'_{\mu\nu} = \mathcal{S} \cdot \mathcal{F}_{\mu\nu} \cdot \mathcal{S}^{-1} . \quad (\text{B.11})$$

Dies erhält man auch aus der Definition der Bündelkrümmung (2.16) unter Berücksichtigung des Transformationsverhaltens der Konnexion \mathcal{A}_μ (B.3).

Anhang C

Der Hartree-Fock-Ansatz

Mit Hilfe des Hartree-Fock-Verfahrens wird ein N -Elektronenproblem auf N Ein-Elektronenprobleme zurückgeführt. Mathematisch bedeutet dies die Ersetzung des Tensorprodukts von Hilberträumen durch eine Whitney-Summe von Faserbündeln. Die Grundidee besteht darin, dass man jeweils ein Elektron (mit Index i) herausgreift und annimmt, dass es sich nicht nur im Potential des Kerns, sondern auch im Potential $V(\vec{r})$ aller übrigen Elektronen bewegt. Dabei wird die Elektronendichteverteilung der übrigen Elektronen im ersten Iterationsschritt zunächst durch Einteilchenwellenfunktionen vorgegeben, bei denen nur das Kernpotential berücksichtigt wird. Für das hierdurch bestimmte Potential $V(\vec{r})$ lässt sich die Schrödinger-Gleichung für die Wellenfunktionen des herausgegriffenen Elektrons $\psi_i^{(1)}$ lösen. Mit Hilfe der so berechneten Wellenfunktion wird nun ein verbessertes Potential $V(\vec{r})^{(1)}$ berechnet und für den zweiten Iterationsschritt verwendet, bei dem eine verbesserte Wellenfunktion $\psi_i^{(2)}$ mit Hilfe der Schrödinger-Gleichung berechnet wird, usw. In der Zwischenzeit wurde dieses Verfahren zu der bekannten MCDF-Methode weiter ausgebaut (“**M**ulti-**C**onfiguration **D**irac-**F**ock” method) [27].

C.1 Hartree-Fock-Gleichungen für $N = 2$

Im folgenden sollen die Hartree-Fock-Gleichungen für zwei Elektronen im externen Coulomb-Feld eines Atomkerns hergeleitet werden. Der Hamiltonoperator H für dieses Problem ist, unter der Annahme, dass sich der Atomkern mit Kernladungszahl

z_{ex} im Ursprung des Koordinatensystems befindet, wie folgt gegeben:

$$H = \sum_{j=1}^2 -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_j^2 - e^2 \frac{z_{ex}}{r_j} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2), \quad (\text{C.1})$$

dabei beinhaltet $V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ die Wechselwirkung der beiden Elektronen untereinander. Setzt man nun als Gesamtwellenfunktion für das Problem eine Slater-Determinante an, mit der das Antisymmetrisierungspostulat automatisch berücksichtigt wird, so erhält man für den Fall $N = 2$

$$\Psi(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(\mathbf{R}_1)\psi_2(\mathbf{R}_2) - \psi_1(\mathbf{R}_2)\psi_2(\mathbf{R}_1)), \quad (\text{C.2})$$

wobei \mathbf{R} sowohl die Ortsvariablen, als auch die Spinvariable beinhaltet ($\mathbf{R} = (\vec{r}, \text{Spinvariable})$). Die Vertauschung der Teilchenindizes führt hier offensichtlich dazu, dass man das Negative der Gesamtwellenfunktion erhält:

$$\Psi(\mathbf{R}_2, \mathbf{R}_1) = -\Psi(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2). \quad (\text{C.3})$$

Es gilt nun zwei Fälle zu unterscheiden: Sind die Spins der beiden Elektronen antiparallel zueinander, so verhält sich die Wellenfunktion symmetrisch gegenüber der Vertauschung der Teilchenindizes in den Ortsvariablen, um die Antisymmetrie der Gesamtwellenfunktion zu gewährleisten. Die Wechselwirkung zwischen den beiden Elektronen ist die Coulomb-Wechselwirkung. Sind die beiden Spins parallel, so muss die Wellenfunktion in Bezug auf die Ortsvariablen hingegen antisymmetrisch sein. Dies führt dazu, dass man einen zusätzlichen Wechselwirkungsterm erhält, der die Coulombsche Wechselwirkungsenergie zwischen den Elektronen verkleinert. Mit Hilfe des obigen Ansatzes für die Gesamtwellenfunktion $\Psi(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$ erhält man also die beiden folgenden Einteilchen-Schrödinger-Gleichungen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_1^2 \psi_1 - e^2 \frac{z_{ex}}{r_1} \psi_1(\vec{r}) + e^2 \int d^3\vec{r}' \frac{\psi_2^*(\vec{r}')\psi_2(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \cdot \psi_1(\vec{r}) - \delta_s e^2 \int d^3\vec{r}' \frac{\psi_2^*(\vec{r}')\psi_1(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \cdot \psi_2(\vec{r}) = E_1 \psi_1(\vec{r}) \quad (\text{C.4a})$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_2^2 \psi_2 - e^2 \frac{z_{ex}}{r_2} \psi_2(\vec{r}) + e^2 \int d^3\vec{r}' \frac{\psi_1^*(\vec{r}')\psi_1(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \cdot \psi_2(\vec{r}) - \delta_s e^2 \int d^3\vec{r}' \frac{\psi_1^*(\vec{r}')\psi_2(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \cdot \psi_1(\vec{r}) = E_2 \psi_2(\vec{r}); \quad (\text{C.4b})$$

für das Spin-Kronecker δ_s gilt dabei:

$$\delta_s = \begin{cases} 1, & \text{parallele Spins} \\ 0, & \text{antiparallele Spins.} \end{cases} \quad (\text{C.5})$$

Betrachtet man nun das zugehörige Energiefunktional E_{HF}

$$E_{HF} = \int d^3\vec{r} \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(|\vec{\nabla}\psi_1(\vec{r})|^2 + |\vec{\nabla}\psi_2(\vec{r})|^2 \right) - e^2 \left(\frac{z_{ex}}{r_1} |\psi_1(\vec{r})|^2 + e^2 \frac{z_{ex}}{r_2} |\psi_2(\vec{r})|^2 \right) \right] \\ + e^2 \int \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' \left[\frac{|\psi_1(\vec{r})|^2 \cdot |\psi_2(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - \delta_s \frac{\psi_1^*(\vec{r})\psi_1(\vec{r}')\psi_2^*(\vec{r}')\psi_2(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right] \quad (C.6)$$

so zeigt sich, dass es sich hierbei nicht rein um die Summe der Einzelenergien E_1 und E_2 handelt:

$$E_{HF} = E_1 + E_2 - e^2 \int \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' \frac{|\psi_1(\vec{r})|^2 \cdot |\psi_2(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \\ + \delta_s e^2 \int \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' \frac{\psi_1^*(\vec{r})\psi_1(\vec{r}')\psi_2^*(\vec{r}')\psi_2(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (C.7)$$

Da beide Energiewerte E_a , ($a = 1, 2$) die Wechselwirkungsenergie mit dem jeweils anderen Elektron beinhalten, muss von der Summe der Eigenwerte einmal die Coulombsche Wechselwirkungsenergie abgezogen und einmal die Austauschwechselwirkung hinzuaddiert werden, um Doppelzählung zu vermeiden. Die Austauschenergie (zweiter Term des Doppelintegrals) tritt wieder nur für den Fall paralleler Spins auf.

Da sich die RST-Gleichungen durch geeignete Näherungen im nichtrelativistischen Grenzfall in die Hartree-Fock-Gleichungen überführen lassen, ergibt sich das RST-Energiefunktional der RST im nichtrelativistischen Fall analog zu (C.7). Doch auch für den vollrelativistischen Fall zeigt es sich, dass das RST-Energiefunktional basierend auf dem Ansatz (6.1) und (6.5) entsprechend interpretiert werden kann. Man erhält für das Gesamtenergiefunktional der RST (6.78) eine Summe aus Materieenergie E_D , interner Wechselwirkungsenergie E_C und externer Wechselwirkungsenergie E_{sx} . Dabei besteht die interne Wechselwirkungsenergie E_G aus zwei Teilen, wobei beim zweiten Teil, dem Austauschanteil E_C , der elektrische Anteil $E_C^{(e)}$ für obigen Ansatz gleich Null ist, entsprechend der Austauschenergie beim Hartree-Fock-Ansatz. Außerdem zeigt es sich in Analogie zum Hartree-Fock-Energiefunktional, dass das Gesamtenergiefunktional der RST (6.78) nicht gleich der Summe der Masseeigenwerte M_a der beiden Teilchen ist (in der RST sind die Masseeigenwerte das relativistische Pendant zum Schrödingerschen Energieeigenwert E_a), sondern dass die Wechselwirkungsenergie zwischen den beiden Elektronen E_G , die in beiden Masseeigenwerten M_a enthalten ist, einmal wieder abgezogen, bzw. addiert werden muss, um Doppelzählung zu vermeiden. Dies geschieht aber automatisch durch Verwendung der richtigen Energie-Impulsdichte ${}^{(T)}T_{00}(\vec{r})$.

Anhang D

Einteilchensysteme

Um das Vertrauen in die RST-Vorhersagen, insbesondere des Energiefunktionals, weiter zu stärken, soll im folgenden ein Einteilchensystem untersucht werden, denn für ein solches System sind exakte Lösungen vorhanden. Somit kann die Hypothese der Äquivalenz von Masse und Energie, die für den Einteilchenfall wie folgt gilt:

$$E_T = M_* c^2, \quad (\text{D.1})$$

mit Hilfe des RST-Masseeigenwerts M_* (7.2) überprüft werden. Beim Einteilchensystem ist die Gesamtenergie E_T aus der Summe von Materieenergie E_D und externer Wechselwirkungsenergie E_{es} zusammengesetzt, denn ohne die Anwesenheit eines zweiten Teilchens fehlt die interne Eichfeldenergie E_G . Da für ein Vielteilchensystem die Energie-Impulsdichten ${}^{(D)}T_{\mu\nu}$ und ${}^{(es)}T_{\mu\nu}$ allerdings über die Quellgleichungen (4.11)-(4.13) an die Eichfelddichte ${}^{(G)}T_{\mu\nu}$ gekoppelt sind, erhält man über das Einteilchensystem auch eine indirekte Probe für die allgemeine Form des Energiefunktionals E_{TX} (4.56), da sich der Einteilchenfall aus dem N-Teilchen-Energiefunktional durch Reduktion der Teilchenzahl ja ergeben muss. Hier soll nun der Grundzustand des Wasserstoffproblems untersucht werden, um die Beziehung (D.1) zu verifizieren.

D.1 Der Grundzustand in wasserstoffähnlichen Systemen

In einem solchen System ist nur ein einziges Teilchen in einem externen Coulomb-Potential ${}^{(ex)}A_0(\vec{r})$ (5.1) anwesend; das Zweiteilcheneigenwertproblem reduziert sich

zu einer einzigen Gleichung für das Dirac-Spinorfeld $\psi(\vec{r})$, bzw. zwei Gleichungen für die entsprechenden Pauli-Spinoren $\phi_{\pm}(\vec{r})$

$$i\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \phi_+(\vec{r}) + {}^{(ex)}A_0(\vec{r}) \cdot \phi_-(\vec{r}) = -\frac{M_* + M}{\hbar} c \cdot \phi_-(\vec{r}) \quad (\text{D.2a})$$

$$i\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \phi_-(\vec{r}) + {}^{(ex)}A_0(\vec{r}) \cdot \phi_+(\vec{r}) = -\frac{M_* - M}{\hbar} c \cdot \phi_+(\vec{r}) . \quad (\text{D.2b})$$

Zur Lösung dieses Einzelteilchen-Eigenwertproblems verwendet man die Tatsache, dass die Eigenspinoren $\phi_{\pm}(\vec{r})$ in sphärisch symmetrische Funktionen $R_{\pm}(r)$, $S_{\pm}(r)$ und winkelabhängige Spinoren faktorisieren, die den folgenden Eigenwertgleichungen gehorchen [11, 24]:

$$\vec{J}^2 \zeta_l^{j,m} = j(j+1)\hbar^2 \cdot \zeta_l^{j,m} \quad (\text{D.3a})$$

$$J_z \zeta_l^{j,m} = m\hbar \cdot \zeta_l^{j,m} \quad (\text{D.3b})$$

$$\vec{L}^2 \zeta_l^{j,m} = l(l+1)\zeta_l^{j,m} \quad (\text{D.3c})$$

$$\vec{S}^2 \zeta_l^{j,m} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \hbar^2 \cdot \zeta_l^{j,m} . \quad (\text{D.3d})$$

Für den Gesamtdrehimpuls j gilt hierbei das Additionstheorem bezüglich dem Bahndrehimpuls l und dem Spin $s(=1/2)$:

$$j = l \pm \frac{1}{2} , \quad (\text{D.4})$$

d.h. es gibt zwei entartete Energieniveausysteme; beim ersten ist die Parität der Eigenfunktionen bestimmt durch $l = j - 1/2$

$$\phi_+(\vec{r}) = R_+(\vec{r}) \cdot \zeta_{j-1/2}^{j,m} \quad (\text{D.5a})$$

$$\phi_-(\vec{r}) = -iR_-(\vec{r}) \cdot \zeta_{j+1/2}^{j,m} \quad (\text{D.5b})$$

für das andere gilt $l = j + 1/2$

$$\phi_+(\vec{r}) = S_+(\vec{r}) \cdot \zeta_{j+1/2}^{j,m} \quad (\text{D.6a})$$

$$\phi_-(\vec{r}) = -iS_-(\vec{r}) \cdot \zeta_{j-1/2}^{j,m} . \quad (\text{D.6b})$$

Der Grundzustand mit den Quantenzahlen $l = 0$, $j = 1/2$, $m = \pm 1/2$ gehört dabei dem ersten System (D.5) an. Setzt man den Produktansatz (D.3) in das Einzelteilchenproblem (D.2) ein, so ergibt sich für die skalaren Funktionen $R_{\pm}(r)$ das folgende System gekoppelter Differentialgleichungen erster Ordnung:

$$\frac{dR_+}{dr} + {}^{(ex)}A_0(r) \cdot R_- = -\frac{M_* + M}{\hbar} c \cdot R_- \quad (\text{D.7a})$$

$$\frac{dR_-}{dr} + \frac{2}{r}R_- - {}^{(ex)}A_0(r) \cdot R_+ = \frac{M_* - M}{\hbar}c \cdot R_+ . \quad (\text{D.7b})$$

Die Lösungen für dieses einfache System lassen sich sehr leicht konstruieren und unterscheiden sich nur durch die Normierungskonstante N_{\pm}

$$R_+(r) = N_+ r^{\nu} \exp \left[-\frac{r}{r_*} \right] \quad (\text{D.8a})$$

$$R_-(r) = N_- r^{\nu} \exp \left[-\frac{r}{r_*} \right] , \quad (\text{D.8b})$$

dabei ist der Exponent ν negativ

$$\nu = -1 + \sqrt{1 - (z_{ex}\alpha_s)^2} \quad (\text{D.9})$$

und führt zu einer schwachen Singularität der Spinoren $\phi_{\pm}(r)$ am Ursprung ($r = 0$) - das Energiefunktional bleibt allerdings trotzdem regulär. Der Größenparameter r_* steht mit dem Bohrschen Radius in folgender Beziehung:

$$r_* = \frac{a_B}{z_{ex}} , \quad \left(a_B \doteq \frac{\hbar^2}{Me^2} \right) , \quad (\text{D.10})$$

und der Masseeigenwert M_* für den Grundzustand ist gegeben durch

$$M_* = M \sqrt{1 - (z_{ex}\alpha_s)^2} . \quad (\text{D.11})$$

Die Normierungskonstanten N_{\pm} lassen sich leicht aus der relativistischen Normierungsbedingung (5.45) bestimmen

$$N_+ = N_* \sqrt{M + M_*} \quad (\text{D.12a})$$

$$N_- = N_* \sqrt{M - M_*} \quad (\text{D.12b})$$

$$N_*^2 = \frac{1}{2M} \frac{(2z_{ex}/a_B)^{3+2\nu}}{\Gamma(3+2\nu)} . \quad (\text{D.12c})$$

D.2 Einteilchenenergie E_T

Nachdem das Eigenwertproblem (D.2) explizit gelöst ist, lässt sich damit die Behauptung (D.1) testen, nämlich die Äquivalenz zwischen E_T und M_*c^2 . Da im Moment der Einteilchenfall betrachtet wird, muss man die Zweiteilchenfreiheitsgrade aus Abschnitt 6.2 auf den Einteilchenfall reduzieren, d.h. es bleiben nur die Feldfreiheitsgrade des ersten Teilchens ($a = 1$) übrig:

$$\psi_2(\vec{r}) \Rightarrow 0, \quad {}^{(2)}k_0(\vec{r}) \Rightarrow 0, \quad h_0(\vec{r}) \Rightarrow 0 \quad (\text{D.13a})$$

$${}^{(2)}A_0(\vec{r}) \Rightarrow 0, \quad B_0(\vec{r}) \Rightarrow 0. \quad (\text{D.13b})$$

Damit muss die interne Wechselwirkungsenergie E_G verschwinden und es verbleibt die Einteilchenenergie E_{TX} in folgender Form:

$$E_T = E_D + E_{es}. \quad (\text{D.14})$$

Betrachtet man zunächst den Beitrag der Materieenergie E_D , so findet man, dass sich die Zweiteilchenenergiedichte ${}^{(D)}T_{00}$ (4.23) reduziert auf ihr Einteilchenanalogon

$${}^{(D)}T_{00} = \frac{i\hbar c}{2} \{ \bar{\psi} \cdot \gamma_0 \cdot D_0 \psi - (D_0 \bar{\psi}) \cdot \gamma_0 \cdot \psi \} \quad (\text{D.15})$$

mit der eichkovarianten Zeitableitung aus (3.32)

$$D_0 \psi = -i \left[\frac{M_* c}{\hbar} + {}^{(ex)}A_0(\vec{r}) \right] \psi. \quad (\text{D.16})$$

Damit erhält man für die Materiedichte ${}^{(D)}T_{00}$ (D.15)

$${}^{(D)}T_{00} = [M_* c^2 + \hbar c {}^{(ex)}A_0(\vec{r})] \psi^\dagger(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r}), \quad (\text{D.17})$$

was tatsächlich die Reduzierung des Zweiteilchenresultats (6.42) auf den Einteilchenfall darstellt. Integriert man über die Energiedichte ${}^{(D)}T_{00}$, so erhält man die Materieenergie E_D (4.4a) als

$$E_D = M_* c^2 + \hbar c \int d^3 \vec{r} {}^{(ex)}A_0(\vec{r}) \psi^\dagger(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r}), \quad (\text{D.18})$$

wobei die Normierungsbedingung für ein einzelnes Teilchen (5.45) verwendet wurde. Das verbleibende Integral auf der rechten Seite von (D.18) lässt sich leicht auswerten mit Hilfe des Coulomb-Potentials ${}^{(ex)}A_0$ (5.1) und der Einteilchenladungsdichte $k_0(\vec{r})$ des Grundzustands

$$k_0(\vec{r}) = \psi^\dagger(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r}) = \frac{R_+^2(r) + R_-^2(r)}{4\pi} = \frac{N_*^2}{2\pi} M r^\nu \exp \left[-2 \frac{r}{r_*} \right]. \quad (\text{D.19})$$

Damit ergibt sich für die externe Wechselwirkungsenergie für ein Teilchen im Grundzustand eines Coulomb-Potentials

$$E_{es} = -\hbar c \int d^3 \vec{r} {}^{(ex)}A_0(r) \psi^\dagger(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r}) = \frac{z_{ex}^2 e^2}{(\nu + 1) a_B} \quad (\text{D.20})$$

und man erhält für die Materieenergie E_D (D.18)

$$E_D = \frac{M c^2}{\sqrt{1 - z_{ex}^2 \alpha_s^2}}. \quad (\text{D.21})$$

Dieses Ergebnis lässt sich als die kinetische Energie eines relativistischen Teilchens mit der Geschwindigkeit $v = z_{ex}\alpha_s$ interpretieren:

$$E_D = \frac{Mc^2}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}, \quad (\text{D.22})$$

d.h. in nichtrelativistischer Näherung erhält man

$$E_D = Mc^2 + \frac{1}{2}Mv^2 + \dots \quad (\text{D.23})$$

mit der (nichtrelativistischen) kinetischen Energie E_{kin}

$$E_{kin} = \frac{1}{2}Mv^2 = \frac{1}{2}M(z_{ex}\alpha_s)^2. \quad (\text{D.24})$$

(D.22) ist offenbar die relativistische Verallgemeinerung der Überlegung, dass im nichtrelativistischen Fall die Materieenergie E_D ausschließlich aus der Ruhemasseeenergie und der kinetischen Energie besteht (siehe Anhang E (E.15)). Schreibt man nun die externe Wechselwirkungsenergie E_{es} (D.20) für ein einzelnes Teilchen in folgender Form:

$$E_{es} = -z_{ex}^2\alpha_s^2 \frac{Mc^2}{\sqrt{1 - z_{ex}^2\alpha_s^2}}, \quad (\text{D.25})$$

so erhält man für die Gesamtenergie E_T (D.14)

$$E_T = \frac{Mc^2}{\sqrt{1 - z_{ex}^2\alpha_s^2}} - z_{ex}^2\alpha_s^2 \frac{Mc^2}{\sqrt{1 - z_{ex}^2\alpha_s^2}} = Mc^2\sqrt{1 - z_{ex}^2\alpha_s^2}, \quad (\text{D.26})$$

was mit dem Masseeigenwert M_* (D.11) übereinstimmt. Auf diese Weise wird die Behauptung (D.1) verifiziert. Man beachte, dass die nichtrelativistische Näherung der externen Wechselwirkungsenergie E_{es} (D.25)

$$E_{es} \Rightarrow E_{pot} = -z_{ex}^2\alpha_s^2 Mc^2 \quad (\text{D.27})$$

ist, was zusammen mit der (nichtrelativistischen) kinetischen Energie E_{kin} (D.24) das bekannte Virialtheorem für die Coulomb-Wechselwirkungen ergibt [1]:

$$E_{pot} = -2E_{kin}. \quad (\text{D.28})$$

Anhang E

Nichtrelativistische Näherung für die Materieenergie E_D

Im folgenden soll gezeigt werden, dass sich im nichtrelativistischen Limit die Materieenergie E_D für ein Zweiteilchensystem auf die Summe der Ruheenergien und kinetischen Energien der beiden Teilchen vereinfacht, d.h.

$$E_D \Rightarrow \sum_{a=1}^2 (Mc^2 + E_{kin(a)}) = 2Mc^2 + E_{kin(1)} + E_{kin(2)} , \quad (\text{E.1})$$

wobei die (nichtrelativistischen) kinetischen Energien wie gewohnt definiert sind:

$$E_{kin(a)} = -\frac{\hbar^2}{2M} \int d^3\vec{r}^{(a)} \phi_+(\vec{r})^\dagger \cdot \Delta^{(a)} \phi_+(\vec{r}) . \quad (\text{E.2})$$

Um dies zu zeigen, betrachtet man zunächst die 00-Komponente der Materiedichte ${}^{(D)}T_{\mu\nu}$ (4.22)

$${}^{(D)}T_{00} = \frac{i\hbar c}{2} \{ \bar{\Psi} \cdot \Gamma_0 \cdot (\mathcal{D}_0 \Psi) - (\mathcal{D}_0 \bar{\Psi}) \cdot \Gamma_0 \cdot \Psi \} . \quad (\text{E.3})$$

Mit Hilfe der Dirac-Gleichung (3.27) lässt sich die kovariante Zeitableitung:

$$i\hbar c \Gamma^0 (\mathcal{D}_0 \Psi) = Mc^2 \Psi - i\hbar c \Gamma^j \mathcal{D}_j \Psi \quad (\text{E.4})$$

eliminieren und man erhält damit

$${}^{(D)}T_{00} = Mc^2 \bar{\Psi} \cdot \Psi + \frac{i\hbar c}{2} \{ (\mathcal{D}_j \bar{\Psi}) \Gamma^j \Psi - \bar{\Psi} \Gamma^j (\mathcal{D}_j \Psi) \} . \quad (\text{E.5})$$

Es soll hier genügen, die elektrostatische Näherung zu betrachten, in der die Bündelkrümmung \mathcal{A}_μ (3.3) verschwindende räumliche Komponenten hat ($A_j \equiv 0$), sodass die eichkovariante Ableitung durch die gewöhnliche partielle Ableitung ($\mathcal{D}_j \rightarrow \partial_j$)

ersetzt werden kann. Dies erlaubt es, wieder die räumlichen Ableitungen der “negativen” Pauli-Spinoren ${}^{(a)}\phi_-(\vec{r})$ zugunsten der ${}^{(a)}\phi_+(\vec{r})$ durch die Näherung (5.53) zu ersetzen. Damit lässt sich die Energiedichte ${}^{(D)}T_{00}$ (E.5) schreiben als:

$$\begin{aligned} {}^{(D)}T_{00} &= \frac{\hbar^2}{4M} \Delta \sum_{a=1}^2 ({}^{(a)}\phi_+(\vec{r})^\dagger \cdot {}^{(a)}\phi_+(\vec{r})) + Mc^2 \sum_{a=1}^2 (\bar{\psi}_a \cdot \psi_a) \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{2M} \sum_{a=1}^2 \{ (\Delta {}^{(a)}\phi_+(\vec{r})^\dagger) \cdot {}^{(a)}\phi_+(\vec{r}) + {}^{(a)}\phi_+(\vec{r})^\dagger \cdot (\Delta {}^{(a)}\phi_+(\vec{r})) \} . \end{aligned} \quad (\text{E.6})$$

Mit Hilfe partieller Integration und dem Gaußschen Satz erhält man als nichtrelativistischen Grenzfall für das Materieenergiefunktional E_D (4.4a) eine Form, die sehr ähnlich, aber nicht identisch wie der erwartete Ausdruck (E.1) ist, nämlich

$$E_D = \sum_{a=1}^2 E_{D(a)} , \quad (\text{E.7})$$

wobei die Einteilchenbeiträge gegeben sind durch

$$E_{D(a)} = Mc^2 \int d^3\vec{r} \bar{\psi}_a(\vec{r}) \cdot \psi_a(\vec{r}) - 2 \frac{\hbar^2}{2M} \int d^3\vec{r} {}^{(a)}\phi_+(\vec{r})^\dagger \cdot \Delta {}^{(a)}\phi_+(\vec{r}) . \quad (\text{E.8})$$

Man sieht also, dass die Zweiteilchenmaterieenergie E_D hier die Summe der beiden Einteilchenmaterieenergien $E_{D(a)}$ ist, allerdings weicht die Form der $E_{D(a)}$ von der erwarteten Form (E.1) ab; die Ruhemasseenergie Mc^2 würde mit (E.1) übereinstimmen für den Fall, dass man die Wellenfunktionen im nichtrelativistischen Grenzfall wie folgt normieren könnte:

$$\int d^3\vec{r} \bar{\psi}_a \cdot \psi_a(\vec{r}) \approx \int d^3\vec{r} {}^{(a)}\phi_+(\vec{r})^\dagger \cdot {}^{(a)}\phi_+(\vec{r}) \approx 1 . \quad (\text{E.9})$$

Probleme ergeben sich allerdings bei der kinetischen Energie $E_{kin(a)}$ (E.2), die mit einem falschen Faktor von 2 im nichtrelativistischen Grenzfall für E_D (E.9) auftritt.

Um den Grund für diesen “falschen” (aber unumgänglichen) Faktor 2 in Verbindung mit der kinetischen Energie herauszufinden, muss man eine Näherung höherer Ordnung für die offensichtlich unzureichende Normierungsbedingung (E.9) betrachten. Dazu werden zunächst “Normierungskonstanten” $Z_{(a)}$ für die beiden Teilchen eingeführt:

$$\int d^3\vec{r} \bar{\psi}_a \cdot \psi_a(\vec{r}) \doteq Z_{(a)}^2 , \quad (\text{E.10})$$

und man betrachtet deren Abweichung von Eins. Die richtige Normierungsbedingung für stationäre Zustände ist in (5.45) gegeben und lautet ausgedrückt mit Pauli-Spinoren:

$$\int d^3\vec{r} ({}^{(a)}\phi_+(\vec{r})^\dagger \cdot {}^{(a)}\phi_+(\vec{r}) + {}^{(a)}\phi_-(\vec{r})^\dagger \cdot {}^{(a)}\phi_-(\vec{r})) = 1. \quad (\text{E.11})$$

Die “negativen” Spinoren $\phi_-(\vec{r})$ lassen sich wieder durch die “positiven” Spinoren annähern, wie in (5.53) gezeigt, und man erhält mit Hilfe von partieller Integration

$$\int d^3\vec{r} \phi_-(\vec{r})^\dagger \cdot {}^{(a)}\phi_-(\vec{r}) = \frac{E_{kin(a)}}{2Mc^2}. \quad (\text{E.12})$$

Kombiniert man dieses Ergebnis mit der Normierungsbedingung (E.11), so führt dies zu folgender Bedingung für die “positiven” Spinoren ${}^{(a)}\phi_+(\vec{r})$

$$\int d^3\vec{r} \phi_+(\vec{r})^\dagger \cdot {}^{(a)}\phi_+(\vec{r}) = 1 - \frac{E_{kin(a)}}{2Mc^2} \quad (\text{E.13})$$

oder äquivalent (mit $\int d^3\vec{r} \bar{\psi}_a \cdot \psi_a(\vec{r}) \approx \int d^3\vec{r} {}^{(a)}\phi_+(\vec{r})^\dagger \cdot {}^{(a)}\phi_+(\vec{r})$ (E.11))

$$\int d^3\vec{r} \bar{\psi}_a(\vec{r}) \cdot \psi_a(\vec{r}) = 1 - \frac{E_{kin(a)}}{2Mc^2} \equiv Z_{(a)}^2, \quad (\text{E.14})$$

d.h. die Normierungskonstanten $Z_{(a)}$ sind nicht exakt gleich 1, sondern geringfügig kleiner.

Setzt man nun die Näherung höherer Ordnung für die Normierungsbedingung (E.14) anstelle der Näherung niedrigster Ordnung (E.9) in die Einteilchenmaterieenergie $E_{D(a)}$ (E.8) ein, so erhält man nun das erwartete Ergebnis (E.1) für jedes Teilchen einzeln:

$$E_{D(a)} = Mc^2 + E_{kin(a)}, \quad (\text{E.15})$$

d.h. die Materieenergie besteht aus der Ruhemasseenergie Mc^2 und der kinetischen Energie E_{kin} . Es fällt besonders auf, dass in diesem nichtrelativistischen Grenzfall für die Materieenergie keine Eichfeldenergie enthalten ist, trotz der Anwesenheit der eichkovarianten Ableitung im Materietensor ${}^{(D)}T_{\mu\nu}$ (4.22).

Fügt man nun alle Ergebnisse zusammen, so ist die Form des Gesamtenergiefunktionals E_T (4.3) aufgrund des relativistischen Eigenwertproblems (5.11) und der Normierungsbedingung (5.45) (ohne Berücksichtigung der Selbstwechselwirkung) gegeben durch

$$E_T = M_1c^2 + M_2c^2 - E_G \quad (\text{E.16})$$

mit der interne Eichfeldenergie E_G (4.35). Unter Verwendung der Teilfunktionale $E_R = \tilde{E}_R + \hat{E}_R$ (4.36) für die elektromagnetischen Moden und E_C (4.36) für die

Austauschmoden der internen Eichfelder in der elektrostatischen Näherung (vergl. [17])

$$E_R = e^2 \int \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' \frac{{}^{(1)}k_0(\vec{r}) \cdot {}^{(2)}k_0(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (\text{E.17a})$$

$$E_C = \begin{cases} e^2 \int \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' \frac{h_0(\vec{r}) \cdot h_0(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, & \text{parallele Spins} \\ 0 & \text{antiparallele Spins} \end{cases} \quad (\text{E.17b})$$

erhält man damit folgende Darstellung für E_T :

$$E_T = M_1 c^2 + M_2 c^2 - e^2 \int \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' \frac{{}^{(1)}k_0(\vec{r}) \cdot {}^{(2)}k_0(\vec{r}') - h_0(\vec{r}) \cdot h_0(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (\text{E.18})$$

Begnügt man sich jedoch mit der nichtrelativistischen Näherung (d.h. den Hartree-Fock-Gleichungen (5.57) und (5.58)), so ergibt sich für E_R (E.17a) und E_C (E.17b)

$$E_R = e^2 \int \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' \frac{|\phi_1(\vec{r})|^2 \cdot |\phi_2(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (\text{E.19a})$$

$$E_C = \begin{cases} e^2 \int \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' \frac{\phi_2^*(\vec{r}) \phi_1(\vec{r}) \phi_1^*(\vec{r}') \phi_2(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, & \text{parallele Spins} \\ 0 & \text{antiparallele Spins} \end{cases} \quad (\text{E.19b})$$

und man erhält die nichtrelativistische Näherung E_{HF} des RST-Energiefunktionals E_T (E.18); wobei der Masseeigenwert M_a für den nichtrelativistischen Fall durch den Schrödingerschen Eigenwert E_a ersetzt wird, indem man von M_a die Ruhemasseeenergie ($2Mc^2$) abzieht:

$$E_{RST} \Rightarrow E_{HF} = E_1 + E_2 - e^2 \int \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' \frac{|\phi_1(\vec{r})|^2 \cdot |\phi_2(\vec{r}')|^2 - \delta_s \cdot \phi_2^*(\vec{r}) \phi_1(\vec{r}') \phi_2(\vec{r}') \phi_1(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (\text{E.20})$$

Das Spin-Kronecker δ_s ist gegeben durch

$$\delta_s = \begin{cases} 1, & \text{parallele Spins} \\ 0, & \text{antiparallele Spins} \end{cases} \quad (\text{E.21})$$

und drückt aus, dass nichtrelativistische Verschränkung ausschließlich für Teilchen mit parallelem Spin auftritt; dies liegt daran, dass für den hier verwendeten Ansatz die Ladungsdichte des Austauschstroms verschwindet $h_0(\vec{r}) \equiv 0$ und damit auch

die Zeitkomponente des Austauschpotentials $B_0(\vec{r}) \equiv 0$. Dies führt dazu, dass auch die Austauschenergie gleich Null wird ($E_C = 0$), was durch das Spin-Kronecker δ_s ausgedrückt wird. Um mit den experimentellen Daten übereinzustimmen, dürfte die Austauschenergie allerdings nicht verschwinden, sondern müsste mit dem umgekehrten Vorzeichen im Vergleich zum Fall paralleler Spins auftreten, d.h. anstelle von $\delta_s = 0$ müsste man $\delta_s = -1$ haben. Diese Problematik wird in Abschnitt 6.6 erläutert.

Symbolverzeichnis

a_M	Austauschlänge ($a_M = \frac{\hbar}{(M_1 - M_2)c}$)
α_s	Kopplungskonstante
\mathcal{A}_μ	Eichpotentialoperator (Bündelkonnexion)
${}^{(ex)}\mathcal{A}_\mu$	externer Anteil des Eichpotentialoperators \mathcal{A}_μ
${}^{(el)}\mathcal{A}_\mu$	elektromagnetischer Anteil des Eichpotentialoperators \mathcal{A}_μ
${}^{(s)}\mathcal{A}_\mu$	interner Wechselwirkungsanteil des Eichpotentialoperators \mathcal{A}_μ
A^a_μ	elektromagnetisches Eichpotential für das Teilchen a
A_μ	elektromagnetisches Gesamtpotential $A_\mu = \sum_a A^a_\mu$
$\vec{A}_a(\vec{r})$	magnetisches Vektorpotential für das Teilchen a
$A(r)$	magnetostatischen Gesamtpotentials $A(r) = \sum_a A_a(r)$
$A_a(r)$	magnetostatisches Potential für das Teilchen a
${}^{(a)}A_0(\vec{r})$	elektrostatisches Potential für das Teilchen a
${}^{(p)}A_0(r)$	elektrostatisches Potential für den Grundzustand heliumähnlicher Ionen für jedes Elektron
$A_{ex}(\vec{r})$	externes elektrostatisches Vektorpotential
\mathcal{B}_μ	Austauschanteil des Eichpotentialoperators \mathcal{A}_μ
$B_\mu, \overset{*}{B}_\mu$	Austauschpotential
$B(r)$	Austauschpotential für ein stationäres System
c	Lichtgeschwindigkeit
c_1, c_2	unabhängige Parameter des Kompatibilitätstensor \mathcal{K}
\mathcal{C}^α	adjungierte Darstellung der Generatoren der Strukturgruppe
$\mathcal{C}^{\alpha\beta\gamma}$	Strukturkonstanten (der Lie-Algebra)
\mathcal{D}_μ	eichkovariante N -Teilchen-Ableitung
D_μ	eichkovariante Einteilchen-Ableitung
\mathbb{D}_j	stationäre Form der eichkovarianten Einteilchenableitung D_μ
∂_μ	partielle Ableitung
$\delta E^{(n)}$	elektronische Wechselwirkungsenergie
$\delta E_{T(1)}^{(n)}$	Einelektronenselbstwechselwirkungsenergie

$\delta_L E_{(1)}^{(n)}$	QED-Lamb-Shift für ein einzelnes Teilchen im n -ten Zustand
Δ	Laplace-Operator
$\Delta^{(n)}$	relative Abweichung zwischen den semiklassischen Ionisierungsenergien
$\tilde{\Delta}^{(1)}$	relative Abweichung der elektronischen Wechselwirkungsenergien von der $1/Z$ -Entwicklung
E_a	Schrödinger-Energieeigenwert für das Teilchen a
E^j	Komponenten des elektrischen Feldes
$E_C^{(e)}$	elektrischer Anteil an der Austauschenergie E_C
$E_C^{(m)}$	magnetischer Anteil an der Austauschenergie E_C
E_D	Materieenergie
$E_{D(a)}$	Einteilchenmaterieenergie
E_{es}	externe Wechselwirkungsenergie
$E_{es}^{(e)}$	elektrischer Anteil an der externen Wechselwirkungsenergie E_{es}
$E_{es}^{(m)}$	magnetischer Anteil an der externen Wechselwirkungsenergie E_{es}
\vec{E}_{ex}	externes elektrisches Feld
E_G	Eichfeldenergie
E_{ms}	Zusatzterm zu E_{es} aus Noether-Energiefunktional
$\vec{E}_p(\vec{r})$	elektrostatisches Gradientenfeld für den Grundzustand von heliumähnlichen Ionen für jedes Elektron
E_R	elektromagnetische Energie der N Teilchen
\hat{E}_R	wechselseitige elektromagnetische Energie der N Teilchen
$\hat{E}_R^{(e)}$	elektrischer Anteil an der wechselseitigen Energie der N Teilchen
\hat{E}_R	
$\hat{E}_R^{(m)}$	magnetischer Anteil an der wechselseitigen Energie der N Teilchen
\hat{E}_R	
\tilde{E}_R	elektromagnetische Selbstenergie der N Teilchen
$\tilde{E}_R^{(e)}$	elektrischer Anteil an der Selbstenergie der N Teilchen \tilde{E}_R
$\tilde{E}_R^{(m)}$	magnetischer Anteil an der Selbstenergie der N Teilchen \tilde{E}_R
E_{sx}	gesamte äußere Wechselwirkungsenergie
E_T	Gesamtenergie ohne Zusatzterm E_{ms}
$\vec{\eta}(\vec{r})$	Imaginärteil des Austauschstroms $\vec{h}(\vec{r})$
E_{TX}	Gesamtenergie
E_T''	Gesamtenergie für isotrope Konfiguration
$E_T^{(n)}$	Einteilchenbindungsenergie (Kern plus ein Elektron)
$E_T^{(n)}$	Zweiteilchenbindungsenergie (Kern plus zwei Elektronen)
$\overset{\circ}{E}_T^{(n)}$	semiklassische Einelektronenbindungsenergie

$\overset{\circ}{E}_{T(2)}^{(n)}$	semiklassische Zweielektronenbindungsenergie
$^{[u]}E_{T(2)}^{(n)}$	Zweielektronenbindungsenergie unter Berücksichtigung der RST-Selbstwechselwirkung
$^{(s)}\mathfrak{f}_\mu$	interner Kraftoperator (Lorentz-Kraft in Operatorform)
$^{(ex)}f_\mu$	Kraft, die die externe Quelle auf das N-Teilchensystem ausübt
$^{(s)}f_\mu$	interne Kraft innerhalb des N-Teilchensystems (Lorentz-Kraft)
$^{(xe)}f_\mu$	Kraft, die das N-Teilchensystem auf die externe Quelle ausübt
$\mathcal{F}_{\mu\nu}$	Feldstärkeoperator (Bündelkrümmung)
$^{(ex)}\mathcal{F}_{\mu\nu}$	externer Anteil des Feldstärkeoperators $\mathcal{F}_{\mu\nu}$
$^{(s)}\mathcal{F}_{\mu\nu}$	interner Anteil des Feldstärkeoperators $\mathcal{F}_{\mu\nu}$
$^{(el)}\mathcal{F}_{\mu\nu}$	elektromagnetischer Anteil des Feldstärkeoperators $\mathcal{F}_{\mu\nu}$
$F_{\mu\nu}$	elektromagnetische Gesamtfeldstärke ($F_{\mu\nu} = \sum_a F^a_{\mu\nu}$)
$F^a_{\mu\nu}$	elektromagnetische Feldstärke für das Teilchen a
$^{(a)}F_{\mu\nu}$	elektrostatische Näherung der Feldstärken $F^a_{\mu\nu}$ für das Teilchen a
$^{(ex)}F_{\mu\nu}$	externe Feldstärke
g	Gruppenelement $g \in \mathcal{GL}(N, \mathbb{C})$
g_*	konstante hermitesche ($N \times N$) Matrix
$\mathcal{G}_{\mu\nu}$	Austauschanteil des Feldstärkeoperators $\mathcal{F}_{\mu\nu}$
$G_{\mu\nu}, G_{\mu\nu}^*$	Austauschfeldstärke
G_μ	Verschränkungsoperator
Γ_μ	direkte Summe von Gammamatrizen
γ_μ	Gammamatrizen
$h(r)$	Austauschstrom für ein statisches System
h_μ, h_μ^*	Austauschstrom
h_0	Ladungsdichte
\mathcal{H}_μ	Hamiltonoperator (dynamische Einsform)
$\vec{H}_p(\vec{r})$	magnetostatisches Gradientenfeld für den Grundzustand von heliumähnlichen Ionen für jedes Elektron, es gilt $\vec{H}_p(\vec{r}) = \vec{H}_1(\vec{r}) \equiv \vec{H}_2(\vec{r})$
\vec{H}_{ex}	externes magnetisches Feld
H^j	magnetische Feldkomponenten
\mathcal{I}	Intensitätsmatrix in der RST
j	Gesamtdrehimpulsquantenzahl
$j_{a\mu}$	RST-Einteilchenstrom
j^a_μ	Maxwell-Teilchenstrom
$j_{ex}(\vec{r})$	externer Strom in stationärem System

$j(r)$	Gesamtstrom $j(r) = \sum_a k_a(r)$ in stationärem System
$j_0(r)$	Gesamtstromdichte $j_0(r) = \sum ({}^a)k_0$ in stationärem System
j_μ	Gesamtstrom $j_\mu = -\sum_a j_\mu^a = \sum_a k_{a\mu}$
\mathcal{J}_μ	Maxwell-Stromoperator
${}^{(ex)}j_\mu$	externer Vierer-Strom
\vec{J}	Gesamtdrehimpuls
${}^{[u]}\mathcal{J}_{RST(N)}^{(n)}$	RST-Ionisierungsenergie eines Systems mit N Elektronen unter Berücksichtigung der RST-Selbstwechselwirkung
$\mathcal{J}_{(N)}^{(n)}$	Einelektronenionisierungsenergie eines Systems mit N Elektronen
$\overset{\circ}{\mathcal{J}}_{(N)}^{(n)}$	semiklassische Einelektronenionisierungsenergie eines Systems mit N Elektronen
$k_{a\mu}$	Teilchenstrom ($k_{a\mu} \doteq j_{b\mu}$) mit $a \neq b$ und $a, b = 1, 2$
$\vec{k}_a(\vec{r})$	Diracscher Dreier-Teilchenstrom
${}^{(a)}k_0(\vec{r})$	Ladungsdichte der Diracschen Teilchenströme k_μ^a für stationäres System
${}^{(p)}k_0(r)$	elektrostatische Ladungsdichte für den Grundzustand heliumähnlicher Ionen für jedes Elektron
$k_p(r)$	Dirac-Strom für den Grundzustand heliumähnlicher Ionen für jedes Elektron
$\mathcal{K} = K_{\alpha\beta}$	Kompatibilitätstensor
K_p	Paarkopplungskonstante
K_s	Selbstkopplungskonstante
l	Bahndrehimpulsquantenzahl
$l_{a\mu}$	modifizierter Teilchenstrom
\vec{L}	Bahndrehimpuls
L_{es}	Anteil der externen Wechselwirkung an der Lagrange-Dichte
L_{ex}	Anteil der externen Quelle an der Lagrange-Dichte
L_G	Eichanteil an der Lagrange-Dichte
L_D	Materieanteil an der Lagrange-Dichte
L_{RST}	Lagrange-Dichte der RST
L_S	interner Anteil an der Lagrange-Dichte
\mathcal{M}	Masseoperator
M	Teilchenmasse
M''	Masseeigenwert für isotrope heliumähnliche Konfigurationen für jedes Elektronen
M_*c^2	Einteilchenenergie für wasserstoffähnliche Ionen
M_a	Masseeigenwert für das Teilchen a

$M_a^{(e)}$	Masseäquivalent der internen elektromagnetischen Wechselwirkung
$M_{a,e}^{(es)}$	elektrisches Masseäquivalent der externen Wechselwirkungsenergie
∇_μ	koordinatenkovariante Ableitung
N	Teilchenzahl
n	Hauptquantenzahl
Ψ	N -Teilchen-Wellenfunktion
Ψ_*	konstanter komplexer Vektor
ψ_a	Einteilchen-Wellenfunktion
${}^{(a)}\phi_-$	negativer Pauli-Spinor
${}^{(a)}\phi_+$	positiver Pauli-Spinor
$R_\pm(r)$	radiale Ansatzfunktion
ρ	Dichtematrix in der konventionellen Quantenmechanik
$\mathbb{R}_+(r)$	Radialfunktion mit $\mathbb{R}_+(r) \doteq {}^{(1)}R_+(r) \cdot {}^{(2)}R_-(r) + {}^{(2)}R_+(r) \cdot {}^{(1)}R_-(r)$
${}^{(a)}R_\pm(r)$	radiale Ansatzfunktionen für das Teilchen a
S	dreidimensionale Oberfläche der Raumzeit
\vec{S}	Spin
S	Spinquantenzahl
\hat{t}_μ	Einheitsvektor in Zeitrichtung
τ_a	elektromagnetische Generatoren der Lie-Algebra der Eichgruppe
τ_α	Generatoren der Lie-Algebra der Strukturgruppe
${}^{(D)}T_{\mu\nu}$	Materieenergie-Impulstensor
${}^{(C)}T_{\mu\nu}$	Energie-Impulsdichte der Austauschmoden $G_{\mu\nu}$
${}^{(D)}T_{\mu\nu}$	Materieenergie-Impulsdichte
${}^{(D)}T_{\mu\nu(a)}$	Einteilchenmaterieenergie-Impulsdichte
${}^{(es)}T_{\mu\nu}$	Energie-Impulsdichte der externen Wechselwirkungsenergie
${}^{(ex)}T_{\mu\nu}$	Energie-Impulsdichte der externen Quelle
${}^{(G)}T_{\mu\nu}$	Energie-Impulsdichte des Eichfeldes
${}^{(ms)}T_{\mu\nu}$	Zusatzterm zu ${}^{(es)}T_{\mu\nu}$, um den Noetherschen Energie-Impulsdichte der Wechselwirkung ${}^{(sx)}T_{\mu\nu}$ zu erhalten
${}^{(R)}T_{\mu\nu}$	Energie-Impulsdichte der elektromagnetischen Feldmoden $F^a{}_{\mu\nu}$
${}^{(R)}\hat{T}_{\mu\nu}$	Energie-Impulsdichte der elektromagnetischen Feldmoden $F^a{}_{\mu\nu}$
${}^{(R)}\tilde{T}_{\mu\nu}$	Energie-Impulsdichte des Selbstwechselwirkungsanteils der elektromagnetischen Feldmoden $F^a{}_{\mu\nu}$
${}^{(S)}T_{\mu\nu}$	interne Energie-Impulsdichte
${}^{(sx)}T_{\mu\nu}$	Gesamtenergie-Impulsdichte der Wechselwirkung
${}^{(T)}T_{\mu\nu}$	Gesamtenergie-Impulsdichte des Zwei-Fermionen-Systems ohne Zusatzterm ${}^{(ms)}T_{\mu\nu}$

u	Selbstwechselwirkungsparameter
\vec{V}_p	Vektorfeld $\vec{V}_p = -\frac{y}{r}\vec{e}_x + \frac{x}{r}\vec{e}_y$
$v_{\alpha\mu}$	Geschwindigkeitsoperatoren
\vec{W}_p	Vektorfeld $\vec{W}_p = -\frac{z}{r}(\vec{e}_x + i\vec{e}_y) + \frac{x-iy}{r}\vec{e}_z$
\hat{W}_{RST}	rein räumlicher Anteil des Wirkungsintegrals
W_{RST}	Wirkungsintegral
$\chi, \bar{\chi}$	Austauschgeneratoren der Lie-Algebra der Strukturgruppe
$\vec{\xi}(\vec{r})$	Realteil des Austauschstroms $\vec{h}(\vec{r})$
z_{ex}	Kernladungszahl
$\zeta_l^{j,m}$	Eigenspinoren des Drehimpulsoperators \vec{j}
\hat{z}_a	Normierungskonstanten

Abbildungsverzeichnis

3.1	Mechanismus der Wechselwirkungen in der RST	42
4.1	Energie-Impulsdichten in der RST	47
6.1	Isotropie des RST-Grundzustands	80
6.2	Vergleich von Singulett- und Triplett-Termschemata der RST mit dem Experiment	96
7.1	Vergleich zwischen den semiklassischen Ionisierungsenergien verschiedener theoretischer Ansätze	105
7.2	Quadratische Abweichung zwischen $\Delta E_{RST}^{(n)}$ und $\Delta E_{exp}^{(n)}$ zur Bestimmung des RST-Selbstwechselwirkungsparameters u	110
7.3	Vergleich zwischen den Grundzustandswechselwirkungsenergien verschiedener Ansätze a)	113
7.4	Vergleich zwischen den Grundzustandswechselwirkungsenergien verschiedener Ansätze b)	114
7.5	Vergleich zwischen Ionisierungsenergien mit Selbstwechselwirkung für verschiedene Ansätze	117

Tabellenverzeichnis

2.1	Zusammenfassung der formalen Unterschiede zwischen der konventionellen Quantenmechanik und der RST	18
3.1	Zusammenfassung der Ströme in der RST	43
4.1	Zusammenfassung der Energiefunktionale in der RST	58
6.1	Zusammenfassung der Eigenschaften für $ns^2\ ^1S_0$ -Zustände von heliumähnlichen Ionen	82
7.1	Vergleich zwischen den semiklassischen Ionisierungsenergien verschiedener theoretischer Ansätze	104
7.2	Vergleich zwischen den Grundzustandswechselwirkungsenergien ΔE ($n = 1$) verschiedener Ansätze	112
7.3	Vergleich zwischen den Ionisierungsenergien mit Selbstwechselwirkung für verschiedene Ansätze	116

Literaturverzeichnis

- [1] BALLENTINE, L. E.: *Quantum Mechanics*. Singapore : World Scientific, 1998
- [2] DRAKE, G. W.: Theoretical energies for the $n = 1$ and 2 states of the helium isoelectronic sequence up to $Z = 100$. *Can. J. Phys.* 66 (1988), S. 586
- [3] GRÄBELDINGER, R. ; BECK, T. ; MATTES, M. ; SORG, M. *Helium Multiplet Structure in Relativistic Schrödinger Theory*. <http://arxiv.org/abs/hep-th/0305227>. 2005
- [4] GRÄBELDINGER, Ruth: *Selbst-Energie des Dirac Elektrons in der Relativistischen Schrödinger Theorie*, Universität Stuttgart, Diplomarbeit, 2006
- [5] GREINER, W.: *Theoretische Physik*. Bd. 6: *Relativistische Quantenmechanik, Wellengleichungen*. Frankfurt am Main : Verlag Harri Deutsch, 1987
- [6] GROSS, F.: *Relativistic Quantum Mechanics and Field Theory*. New York : John Wiley & Sons, 1999
- [7] HAKEN, H. ; WOLF, H. C.: *Atom- und Quantenphysik*. Berlin; Heidelberg : Springer-Verlag, 1993
- [8] JOHNSON, W. R. ; SOFF, G.: The Lamb Shift in Hydrogen-like Atoms, $1 < Z < 110$. *At. Data Nucl. Data Tables* 33 (1985), S. 405
- [9] LANDAU, R. H.: *Quantum Mechanics*. Bd. II. John Wiley & Sons, 1990
- [10] MARRS, R. E. ; ELLIOTT, S. R. ; STOEHLKER, Th.: Measurement of two-electron contributions to the ground-state energy of heliumlike ions. *Phys. Rev. A* 52 (1995), S. 3577
- [11] MERZBACHER, E.: *Quantum Mechanics*. New York : J. Wiley & Sons, 1970

-
- [12] NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS AND TECHNOLOGY (NIST). *Atomic Spectra Database*. <http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/index.html>
- [13] PAULI, W.: Relativistic Field Theories of Elementary Particles. *Rev. Mod. Phys.* 13 (1941), Nr. 3, S. 203
- [14] PLANTE, D. R. ; JOHNSON, W. R. ; SAPIRSTEIN, J.: Relativistic all-order many-body calculations of the n=1 and n=2 states of heliumlike ions. *Phys. Rev. A* 49 (1994), S. 3519
- [15] PRUSS-HUNZINGER, S. ; MATTES, M. ; SORG, M.: Relativistic Ground-State of the Heavy Helium-Like Ions. *Nuov. Cim B* 119 (2004), S. 277
- [16] PRUSS-HUNZINGER, S. ; RUPP, S. ; SORG, M. *Topological Quantum Numbers of Relativistic Two-Particle Mixtures*. <http://arxiv.org/abs/hep-th/0305227>. 2005
- [17] PRUSS-HUNZINGER, S. ; SORG, M.: Fermions in Relativistic Schrödinger Theory. *Nuov. Cim. B* 118 (2003), S. 903
- [18] PRUSS-HUNZINGER, S. ; STARY, F. ; MATTES, M. ; SORG, M.: Relativistic Ionization Energies of the Helium-like Ions. *Nuov. Cim. B* 120 (2005), S. 467
- [19] RUPP, S.: Relativistic Wave Equations for Many-Particle Quantum Systems. *Phys. Rev. A* 67 (2003), S. 034101
- [20] RUPP, S. ; HUNZINGER, S. ; SORG, M.: Exchange Degeneracy of Relativistic Two-Particle Quantum States. *Found. Phys.* 32 (2002), Nr. 32, S. 705
- [21] SAKURAI, J. J.: *Advanced Quantum Mechanics*. Reading, Mass. : Addison Wesley, 1967
- [22] SCHUST, P.: *Die relativistische Schrödingertheorie als erweiterte Yang-Mills Theorie*, Universität Stuttgart, Fakultät Physik, Diss., 2007
- [23] SCHUST, P. ; STARY, F. ; MATTES, M. ; SORG, M.: Self-Energy and Action Principle in Relativistic Schroedinger Theory. *Found. Phys.* 35 (2005), S. 1043
- [24] THALLER, B.: *The Dirac Equation*. Berlin : Springer, 1992
- [25] VERSCHL, M. ; MATTES, M. ; SORG, M.: Relativistic Effects in Bound Two-Particle Systems. *Europ. Phys. J. A* 20 (2004), S. 211

-
- [26] WEINBERG, S.: *The Quantum Theory of Fields*. Bd. 2. New York : Cambridge University Press, 1996
- [27] WILSON, S.: *Methods in Computational Chemistry*. Bd. 2: *Relativistic Effects in Atoms and Molecules*. New York : Plenum Press, 1988

Danksagung

Zuerst möchte ich meiner Familie danken - meinem Mann Christof und meinen Kindern Anna und Tobias - Ihr seid für mich das aller Wichtigste!

Herzlichen Dank möchte ich Herrn Dr. Sorg sagen für die Betreuung dieser Arbeit. Ich danke Ihnen für viele anregende Gespräche und dafür, dass Sie sich immer Zeit für mich genommen haben.

Desweiteren danke ich ganz herzlich Herrn Professor Trebin für die Übernahme des Hauptberichts zur meiner Dissertation und Herrn Professor Weidlich für die Übernahme des Mitberichts.

Herrn Professor Weiss und Herrn Professor Seifert danke ich für die freundliche Aufnahme am 2. Theoretischen Institut.

Ich danke allen Kollegen am 2. Theoretischen Institut für die freundschaftliche Atmosphäre und den großen Zusammenhalt, der sich zwischen vielen Tassen Tee und Kaffee und beim Rätseln entwickelt und gefestigt hatte und eine solide Basis für die Bewältigung sowohl fachlicher als auch menschlicher Probleme bildete. Und ich hoffe, dass ich zu vielen dieser Kollegen noch lange Kontakt haben werde.

Allen Omas, Opas, Aupairs und allen anderen, die auf Anna und Tobias aufgepasst haben während die Mama an der Uni war, möchte ich ebenfalls ganz herzlich danken, denn ohne sie hätte ich die Zeit zur Beendigung dieser Arbeit nicht gefunden. An dieser Stelle möchte ich mich auch sehr herzlich bei Herrn Professor Osten vom ITO für sein Verständnis einer jungen Familie gegenüber bedanken.

Ganz maßgeblichen Anteil daran, dass diese Arbeit zu einem guten Ende gekommen ist, haben alle meine Freunde - besonders danke ich:

Christina, Nina, Annette, Ronald, Jan, Oliver, Andreas, Holger, Johannes, Andrea, Tobias und Birgit, Inga und Jörg,

Roman Bedau - für die Hilfe in allen Lebenslagen - egal ob bei Rechner-, Schreibtisch- oder anderen Problemen,

Peter Schust - für unzählige Diskussionen und Kuchenstückchen,

Stefan Rupp - für all die Unterstützung und natürlich das Korrekturlesen

und Rüdiger Weller - dafür, dass er mir durch die Anstellung am IPA die finanzielle Möglichkeit gegeben hat, diese Dissertation zu machen.

Und abschließend möchte ich ganz besonders meinen Eltern danken - dafür, dass sie mich immer darin unterstützt haben, meinen eigenen Weg zu finden und zu gehen.