

BAYERISCHE AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN
MATHEMATISCH-NATURWISSENSCHAFTLICHE KLASSE

SITZUNGSBERICHTE

JAHRGANG

1965

MÜNCHEN 1966

VERLAG DER BAYERISCHEN AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN

In Kommission bei der C. H. Beck'schen Verlagsbuchhandlung München

Halbierung der Teilchenzahl im quantenmechanischen Mehrkörperproblem

Von Erich G. Weidemann in München

Vorgelegt von Herrn Fritz Bopp am 7. Mai 1965

Es wird ein Verfahren beschrieben, mit dessen Hilfe das quantenmechanische N -Körperproblem auf die Lösung des Problems zurückgeführt wird, die Eigenfunktionen und Eigenwerte eines Systems von $N/2$ Bosonen zu bestimmen. Die Methode ist auf Fermion- und Bosonsysteme anwendbar. Es wird lediglich vorausgesetzt, daß das System aus identischen Teilchen besteht, zwischen denen nur Zweikörperkräfte wirken. Da diese Voraussetzungen auch nach der Reduktion auf ein $N/2$ -Bosonsystem erfüllt sind, kann man durch mehrmalige Wiederholung des Verfahrens ein dem N -Körperproblem äquivalentes 2-Körperproblem ableiten, wenn die Teilchenzahl N eine ganzzahlige Potenz von 2 ist.

Der Hamiltonoperator eines Systems von N Fermionen mit 2-Körperkräften ist die Summe aus einem 1-Teilchenterm und einem Paarterm,

$$H = \langle 1|T|2\rangle a_1^\dagger a_2 + \frac{1}{2} \langle 12|V|34\rangle a_1^\dagger a_2^\dagger a_4 a_3. \quad (1)$$

Der Operator a_1^\dagger erzeugt ein Fermion im Zustand 1 eines beliebigen Orthonormalsystems von 1-Teilchenfunktionen. a_1 ist der entsprechende Vernichtungsoperator. Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren genügen den bekannten Vertauschungsrelationen für Fermionen. Wir gebrauchen die Konvention, daß über doppelt vorkommende Variable, die nur auf einer Gleichungsseite auftreten, zu summieren bzw. zu integrieren ist, je nachdem ob es sich um diskrete oder kontinuierliche Variable handelt.

Der 1-Teilchenterm läßt sich stets in der Form eines Paarterms schreiben.

$$\langle 1|T|2\rangle a_1^\dagger a_2 = \frac{\langle 1|T|3\rangle \delta(24)}{N-1} a_1^\dagger a_2^\dagger a_4 a_3. \quad (2)$$

$N = a_1^\dagger a_1$ ist der Teilchenzahloperator. $\delta(12)$ ist das Kronecker-symbol oder die Dirac'sche Deltafunktion bei diskreten bzw. kontinuierlichen Variablen. Man verifiziert Gl. (2) leicht, indem man die Vertauschungsrelation $[N, a_1^\dagger] = a_1^\dagger$ benutzt. Gl. (1) erhält damit die Form

$$H = \frac{1}{2} \langle 12 | h | 34 \rangle a_1^\dagger a_2^\dagger a_4 a_3, \quad (3)$$

wobei

$$\langle 12 | h | 34 \rangle = \frac{2 \langle 1 | T | 3 \rangle \delta(24)}{N-1} + \langle 12 | V | 34 \rangle \quad (3a)$$

die Matrix eines Paaroperators h ist, der dem N -Teilchensystem zugeordnet ist.

Eine besonders einfache Gestalt von H erhält man, wenn man ein beliebiges vollständiges System orthonormaler Paarfunktionen $\varphi_{1'}(12)$ einführt.

$$\varphi_{1'}^*(12) \varphi_{2'}(12) = \delta(1' 2'), \quad (4)$$

$$\varphi_{1'}(12) \varphi_{1'}^*(34) = \delta(13) \delta(24). \quad (5)$$

Die gestrichenen Variablen numerieren die Paarfunktionen; sie stehen symbolisch für sämtliche Quantenzahlen, die erforderlich sind, um den Zustand eines Fermionpaares zu kennzeichnen. Gl. (4) ist die Bedingung für die Orthogonalität, und die Normierung der Paarfunktionen. Gl. (5) ist die Vollständigkeitsrelation. Durch Einschleiben des Einheitsoperators in der Form von Gl. (5) ergibt sich dann aus Gl. (3)

$$H = \frac{1}{2} \varphi_{1'}(12) \varphi_{1'}^*(56) \langle 56 | h | 78 \rangle \varphi_{2'}(78) \varphi_{2'}^*(34) a_1^\dagger a_2^\dagger a_4 a_3 \quad (6)$$

oder

$$H = \langle 1' | h | 2' \rangle b_1^\dagger b_2, \quad (7)$$

mit den Abkürzungen

$$\langle 1' | h | 2' \rangle = \varphi_{1'}^*(12) \langle 12 | h | 34 \rangle \varphi_{2'}(34) \quad (8)$$

und

$$b_1^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \varphi_{1'}(12) a_1^\dagger a_2^\dagger. \quad (9)$$

$\langle 1' | h | 2' \rangle$ sind die Matrixelemente des Paaroperators h in der neuen Darstellung. b_1^\dagger erzeugt aus dem Vakuum $|0\rangle$ ein Fermionpaar in dem Zustand mit der Wellenfunktion $\varphi_{1'}$ (12). In der Tat ist im Formalismus der zweiten Quantelung

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \psi(1 \dots N) a_1^\dagger \dots a_N^\dagger |0\rangle$$

der Zustand eines N -Teilchensystems mit der normierten Wellenfunktion $\psi(1 \dots N)$.

Fermionpaare verhalten sich ähnlich wie Bosonen. Tatsächlich kommutieren die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren unter sich

$$[b_{1'}^\dagger, b_{2'}^\dagger] = 0, \quad [b_{1'}, b_{2'}] = 0. \quad (10)$$

Der Kommutator zwischen einem Erzeugungs- und einem Vernichtungsoperator erhält jedoch einen Zusatz gegenüber dem entsprechenden Kommutator für Bosonoperatoren,

$$[b_{1'}^\dagger, b_{2'}^\dagger] = \delta(1' 2') + 2\varphi_{1'}^*(13) \varphi_{2'}(32) a_2^\dagger a_1, \quad (11)$$

wie man mit Hilfe der Vertauschungsrelationen für die Operatoren a und a^\dagger leicht nachrechnet.

Dieser Zusatz hat zur Folge, daß $b_1^\dagger, b_{1'}$ (ohne Summation!) nicht mehr als Operator der Teilchenzahl im Zustand $1'$ interpretiert werden kann. Denn für einen Teilchenzahloperator $N_{1'}$ ist die Vertauschungsrelation $[b_{2'}, N_{1'}] = b_{1'} \delta(1' 2')$ charakteristisch. Setzt man versuchsweise $N_{1'} = b_1^\dagger b_{1'}$, so erhält man auch für diesen Kommutator einen Zusatz. $P = \sum_{1'} b_1^\dagger b_{1'}$ läßt sich dagegen interpretieren. Seine Eigenwerte geben die Gesamtzahl der Fermionpaare an.

$$P = b_1^\dagger b_{1'} = \binom{N}{2}, \quad (12)$$

wie man leicht mit Hilfe von Gl. (9) und Gl. (5) zeigt.

Ohne den Zusatzterm in Gl. (11) wäre das Eigenwertproblem

$$H |\psi_\alpha\rangle = E_\alpha |\psi_\alpha\rangle \quad (13)$$

exakt lösbar. Die Eigenvektoren wären

$$\prod_{1'} \frac{1}{\sqrt{n_{1'}!}} (b_{1'}^\dagger)^{n_{1'}} |0\rangle, \quad (14)$$

die Eigenwerte $\varepsilon_{1'}$, $n_{1'}$, wenn man für das System der Paarfunktionen $\varphi_{1'}$, (12) das Eigenfunktionssystem des Paaroperators \hbar wählt, d. h. die Paarfunktionen durch die Bedingung

$$\langle 12 | \hbar | 34 \rangle \varphi_{1'}(34) = \varepsilon_{1'} \varphi_{1'}(12) \quad (15)$$

festlegen würde, so daß

$$\langle 1' | \hbar | 2' \rangle = \varepsilon_{1'} \delta(1' 2') \quad (16)$$

und

$$H = \varepsilon_{1'} b_{1'}^\dagger b_{1'}, \quad (17)$$

wäre. In Wirklichkeit sind jedoch wegen des Zusatzterms in Gl. (11) die Operatoren $b_{1'}^\dagger, b_{1'}$ und $b_{2'}^\dagger, b_{2'}$ nicht vertauschbar, wenn $1'$ und $2'$ verschieden sind, so daß das gleichzeitige Diagonalisieren dieser Operatoren in Gl. (17) nicht möglich ist. Die Vektoren (14) sind daher *nicht* die Eigenvektoren von H . Darüber hinaus sind sie weder orthogonal noch normiert.

Die einfache Gestalt von H in den Operatoren b und b^\dagger legt jedoch eine Entwicklung der Eigenzustände $|\psi_\alpha\rangle$ des N -Fermionsystems nach den Vektoren (14) nahe:

$$|\psi_\alpha\rangle = \tilde{\psi}_\alpha \left(1' 2' \dots \frac{N'}{2} \right) b_{1'}^\dagger b_{2'}^\dagger \dots b_{\frac{N'}{2}}^\dagger |0\rangle. \quad (18)$$

Wir lassen weiterhin die Wahl des Paarfunktionensystems *offen*, machen also keinen Gebrauch von den Gln. (15), (16) und (17). Die Vektoren (14) bilden in der Tat ein vollständiges System. Denn mit Hilfe der Vollständigkeitsrelation (5) kann man Gl. (9) nach $a_1^\dagger a_2^\dagger$ auflösen,

$$a_1^\dagger a_2^\dagger = \sqrt{2} \varphi_{1'}^*(12) b_{1'}^\dagger, \quad (19)$$

und daher jede Entwicklung nach den Vektoren $a_1^\dagger \dots a_N^\dagger |0\rangle$ in eine Entwicklung der Form (18) umwandeln.

Mit Gl. (9) erhält man aus Gl. (18) den Zusammenhang zwischen der Funktion $\tilde{\psi}_\alpha \left(1' \dots \frac{N'}{2} \right)$ und der Wellenfunktion $\psi_\alpha(1 \dots N)$ in der ursprünglichen Darstellung,

$$|\psi_\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \psi_\alpha(1 \dots N) a_1^\dagger \dots a_N^\dagger |0\rangle. \quad (20)$$

Es ergibt sich

$$\psi_\alpha(1 \dots N) = \frac{\sqrt{N!}}{2^N} \tilde{\psi}_\alpha\left(1' \dots \frac{N'}{2}\right) A \varphi_{1'}(12) \varphi_{2'}(34) \dots \varphi_{\frac{N'}{2}}(N-1, N). \quad (21)$$

Der Operator A antisymmetrisiert bezüglich der Variablen $1, 2 \dots N$. Er ist erforderlich, da durch eine Entwicklung der Form (20) wegen der Vertauschungsrelationen der a^\dagger nur der antisymmetrische Anteil der Wellenfunktion eindeutig bestimmt ist. Ebenso ist durch die Entwicklung (18) wegen der Vertauschbarkeit der b^\dagger nur der symmetrische Anteil von $\tilde{\psi}_\alpha$ bestimmt, so daß $\tilde{\psi}_\alpha$ von vornherein symmetrisch angenommen werden kann.

Aus Gl. (21) erkennt man, von welcher Art die im Formalismus der zweiten Quantelung definierte Entwicklung (18) in der gewöhnlichen Sprache der Wellenfunktionen ist. Es handelt sich einfach um die Entwicklung der Wellenfunktion nach antisymmetrisierten Produkten von Paarfunktionen. Das Ziel dieser Arbeit ist es, aus der Schrödingergleichung für die Wellenfunktion $\psi_\alpha(1 \dots N)$ eine Gleichung zur direkten Bestimmung der Entwicklungskoeffizienten $\tilde{\psi}_\alpha\left(1' \dots \frac{N'}{2}\right)$ abzuleiten.

Das Rechnen mit den Operatoren b, b^\dagger wird dadurch erschwert, daß bei der Vertauschung eines Erzeugungs- und eines Vernichtungsoperators gemäß Gl. (11) die ursprünglichen Fermionoperatoren a, a^\dagger wieder auftauchen. Eine Methode, diese Schwierigkeit zu umgehen, ist von Dyson[1] im Zusammenhang mit der Theorie der Spinwellen gefunden und von Blatt und Matsubara [2] weiterentwickelt worden. Sie beruht auf der linearen Abbildung des mit Hilfe der Fermionpaar-Erzeugungsoperatoren konstruierten Hilbertraumes auf einen Hilbertraum, der durch Bosonerzeugungsoperatoren B^\dagger entsteht, die den üblichen Vertauschungsrelationen

$$[B_{1'}, B_{2'}^\dagger] = \delta(1' 2'), \quad [B_{1'}, B_{2'}] = 0 \quad (22)$$

genügen. Der Zustand $b_{1'}^\dagger \dots b_{\frac{N'}{2}}^\dagger |0\rangle$ wird auf den entsprechend

gebildeten Zustand von $N/2$ Bosonen abgebildet, Linearkombinationen der $b_1^\dagger, \dots, b_{\frac{N'}{2}}^\dagger |0\rangle$ auf *dieselben* Linearkombinationen der $B_1^\dagger, \dots, B_{\frac{N'}{2}}^\dagger |0\rangle$:

$$b_1^\dagger, \dots, b_{\frac{N'}{2}}^\dagger |0\rangle \rightarrow B_1^\dagger, \dots, B_{\frac{N'}{2}}^\dagger |0\rangle, (|0\rangle \rightarrow |0\rangle) \quad (23)$$

(23a)

$$|\psi_\alpha\rangle = \tilde{\psi}_\alpha \left(1' \dots \frac{N'}{2} \right) b_1^\dagger, \dots, b_{\frac{N'}{2}}^\dagger |0\rangle \rightarrow |\tilde{\psi}_\alpha\rangle = \tilde{\psi}_\alpha \left(1' \dots \frac{N'}{2} \right) B_1^\dagger, \dots, B_{\frac{N'}{2}}^\dagger |0\rangle.$$

Da lineare Operatoren im Raum der $b_1^\dagger, \dots, b_{\frac{N'}{2}}^\dagger |0\rangle$ dadurch gekennzeichnet sind, daß man sagt, in welche Linearkombination der Basisvektoren jeder Basisvektor $b_1^\dagger, \dots, b_{\frac{N'}{2}}^\dagger |0\rangle$ transformiert wird, ist durch die Abbildungsvorschrift (23) für die Vektoren zugleich auch die Abbildung für lineare Operatoren festgelegt. Da sich alle linearen Operatoren als Funktion der b und b^\dagger ausdrücken lassen, genügt es, für diese Operatoren die Abbildungsvorschrift zu finden.

Offenbar gilt wegen (23)

$$b_1^\dagger \rightarrow B_1^\dagger. \quad (24)$$

Der 1- und 0-Operator werden auf sich abgebildet. Blatt und Matsubara [2] haben einen einfachen Beweis dafür angegeben, daß für die Vernichtungsoperatoren die Zuordnung

$$b_{1'} \rightarrow B_{1'} + \langle 1' 2' | W | 3' 4' \rangle B_{2'}^\dagger, B_{3'}, B_{4'} \quad (25)$$

gilt, wobei

$$\langle 1' 2' | W | 3' 4' \rangle = -2 \varphi_{1'}^* (12) \varphi_{2'}^* (34) \varphi_{3'} (23) \varphi_{4'} (41) \quad (26)$$

bis auf den Faktor -2 das Matrixelement des Operators der zyklischen Permutation der Variablen 1 bis 4 ist. Gl. (26) können wir auch in der Form

$$\langle 1' 2' | W | 3' 4' \rangle = -2 \text{Sp } \varphi_{1'}^* \varphi_{3'} \varphi_{2'}^* \varphi_{4'} \quad (26a)$$

schreiben. $\langle 1' 2' | W | 3' 4' \rangle$ ist eine in beiden Variablenpaaren symmetrische, hermitesche Matrix.

(27)

$$\langle 1' 2' | W | 3' 4' \rangle = \langle 2' 1' | W | 3' 4' \rangle = \langle 1' 2' | W | 4' 3' \rangle = \langle 3' 4' | W | 1' 2' \rangle^*$$

Beim Beweis dieser Eigenschaft benutzt man die Antisymmetrie der Paarfunktionen. In der Tat kann man sich von Anfang an auf antisymmetrische Paarfunktionen beschränken, da in Gl. (6) die symmetrischen Paarfunktionen wegen der Antikommutativität der Fermionoperatoren keinen Beitrag geben. Die durch Gl. (9) definierten Fermionpaar-Erzeugungsoperatoren verschwinden für symmetrische Zustände; Fermionpaare können nur in antisymmetrischen Zuständen erzeugt werden.

Durch die Abbildung (24), (25) wird der Hamiltonoperator H , Gl. (7), auf den Operator

(28)

$$\tilde{H} = \langle 1' | h | 2' \rangle B_1^\dagger B_2 + \langle 1' | h | 5' \rangle \langle 5' 2' | W | 3' 4' \rangle B_1^\dagger B_2^\dagger B_3 B_4$$

abgebildet. Wegen der Vertauschbarkeit von B_1^\dagger und B_2^\dagger , trägt nur der in $1', 2'$ symmetrische Anteil des Koeffizienten $\langle 1' | h | 5' \rangle \langle 5' 2' | W | 3' 4' \rangle$ bei, so daß wir auch

$$\tilde{H} = \langle 1' | \tilde{T} | 2' \rangle B_1^\dagger B_2 + \frac{1}{2} \langle 1' 2' | \tilde{V} | 3' 4' \rangle B_1^\dagger B_2^\dagger B_3 B_4 \quad (29)$$

mit

$$\langle 1' | \tilde{T} | 2' \rangle = \langle 1' | h | 2' \rangle, \quad (30)$$

(31)

$$\langle 1' 2' | \tilde{V} | 3' 4' \rangle = \langle 1' | h | 5' \rangle \langle 5' 2' | W | 3' 4' \rangle + \langle 2' | h | 5' \rangle \langle 5' 1' | W | 3' 4' \rangle$$

schreiben können. Wegen Gl. (23 a) wird die Eigenwertgleichung (13) auf die Gleichung

$$\tilde{H} | \tilde{\psi}_\alpha \rangle = E_\alpha | \tilde{\psi}_\alpha \rangle \quad (32)$$

abgebildet.

Nach Gl. (29) ist \tilde{H} der Hamiltonoperator eines Systems von Bosonen mit der i. a. nicht-lokalen Paarwechselwirkung \tilde{V} . An Stelle des Eigenwertproblems (13) kann man nun Gl. (32) lösen.

Zur Lösung des N -Fermionproblems sind die Eigenzustände $|\tilde{\psi}_\alpha\rangle$ für ein System von $N/2$ Bosonen zu bestimmen. Wegen Gl. (23 a) berechnet sich aus der Wellenfunktion $\tilde{\psi}_\alpha\left(1' \dots \frac{N'}{2}\right)$ des Bosonensystems die Wellenfunktion des Fermionensystems nach Gl. (21). Die Eigenwerte stimmen in beiden Systemen überein. *Damit ist das N -Fermionproblem auf die Lösung eines $N/2$ -Bosonproblems zurückgeführt.*

Man beachte, daß das Wechselwirkungspotential \tilde{V} , Gl. (31), nicht hermitesch ist. In der Tat ist die Abbildung (23) nicht winkeltreu, da die nicht-orthogonale Basis $b_1^\dagger, \dots, b_{\frac{N'}{2}}^\dagger |0\rangle$ auf die orthogonale Basis $B_1^\dagger, \dots, B_{\frac{N'}{2}}^\dagger |0\rangle$ abgebildet wird. Man muß also erwarten, daß die Orthogonalität der Eigenvektoren von H durch die Abbildung verlorengeht, H demnach nach der Abbildung nicht mehr hermitesch sein kann.

Bei der Berechnung des Wechselwirkungspotentials \tilde{V} nach Gl. (31) kann man die Summation über die Variable $5'$ einsparen, wenn man für das ja noch frei verfügbare System von Paarfunktionen die Eigenfunktionen des Operators h wählt. Dafür ist dann jedoch das Eigenwertproblem (15) zu lösen, und es ist damit zu rechnen, daß h ein wenigstens teilweise kontinuierliches Spektrum besitzt. Es scheint daher zweckmäßiger zu sein, die Paarfunktionen nach rein praktischen Gesichtspunkten zu wählen, z. B. so, daß sich die Matrix $\langle 1' 2' | W | 3' 4' \rangle$ nach Gl. (26) analytisch berechnen läßt.

Das 4-Fermionproblem kann man mit dem beschriebenen Verfahren im Prinzip exakt lösen, da es auf ein 2-Körperproblem zurückgeführt wird. Geht man mit dem Ansatz

$$|\tilde{\psi}_\alpha\rangle = \tilde{\psi}_\alpha(1' 2') B_1^\dagger B_2^\dagger |0\rangle \quad (33)$$

in Gl. (32) ein, so erhält man die Gleichung

$$\begin{aligned} \langle 1' | \tilde{T} | 3' \rangle \tilde{\psi}_\alpha(3' 2') + \langle 2' | \tilde{T} | 3' \rangle \tilde{\psi}_\alpha(1' 3') + \langle 1' 2' | \tilde{V} | 3' 4' \rangle \tilde{\psi}_\alpha(3' 4') = \\ = E_\alpha \tilde{\psi}_\alpha(1' 2') \end{aligned} \quad (34)$$

zur Bestimmung der Eigenfunktionen $\tilde{\psi}_\alpha(1' 2')$ und der Eigenwerte E_α .

Von Anfang an hätten wir statt eines Fermionsystems auch ein Bosonsystem betrachten können. Alle Folgerungen sind auch dann noch gültig, wenn man unter b und b^\dagger Vernichtungs- bzw. Erzeugungsoperatoren für Bosonpaare versteht, die nur in symmetrischen Zuständen erzeugt werden können. Man überzeugt sich leicht, daß die Vertauschungsrelationen (10) und (11) für diese Operatoren ungeändert bleiben. Sie lassen sich ebenfalls auf Bosonoperatoren abbilden nach Gl. (24) und (25), wenn man in der Definitionsgleichung (26) für W das Vorzeichen umkehrt.

Man kann also auch ein N -Bosonsystem auf ein $N/2$ -Bosonsystem zurückführen. Da auch der Operator \tilde{H} die Voraussetzungen für das Reduktionsverfahren erfüllt – von der Hermitizität von H wurde kein Gebrauch gemacht –, können weitere Reduktionsschritte angeschlossen werden, solange die Teilchenzahl gerade bleibt. Ein Fermion- oder Bosonsystem von $N = 2^n$ (n ganzzahlig) Teilchen läßt sich daher im Prinzip auf ein 2-Teilchensystem zurückführen.

Praktisch werden sich wohl nur wenige Reduktionsschritte durchführen lassen. Daher wird die Reduktion auf ein 2-Körperproblem nur für kleine n praktikabel sein. Für größere Teilchenzahlen wird man sich mit dem ersten Reduktionsschritt zufrieden geben und das System der $N/2$ Bosonen mit konventionellen Näherungsmethoden behandeln. Es ist z. B. zu erwarten, daß eine Störungsrechnung dieser Art für Supraleiter gut konvergiert. Denn im BCS-Modell, das mit den Experimenten ausgezeichnet übereinstimmende Ergebnisse liefert, hat der Grundzustand eine Wellenfunktion der Form $\psi(1 \dots N) = A \varphi(12) \varphi(34) \dots \varphi(N-1, N)$ [3], also gerade dieselbe Form wie die nullte Näherung einer derartigen Störungsrechnung.

Literatur

- [1] F. J. Dyson, Phys. Rev. 102, 1217 (1956).
- [2] J. M. Blatt und T. Matsubara, Progr. Theor. Phys. (Japan) 20, 553 (1958).
- [3] J. M. Blatt, Progr. Theor. Phys. (Japan) 23, 447 (1960).