

Z. für Physik 25, 622 (1932)

Konfigurationsraum und zweite Quantelung¹⁾.

Von V. Fock in Leningrad.

(Eingegangen am 10. März 1932.)

Es wird der Zusammenhang zwischen der Methode der gekwantelten Wellenfunktionen und der Koordinatenraummethode untersucht. Die Operatoren der zweiten Quantelung werden in einer Folge von Konfigurationsräumen für 1, 2, ... usw. Teilchen dargestellt. Die gewonnene Darstellung ermöglicht eine einfache Ableitung der Hartreeschen Gleichungen mit Austausch.

Die Äquivalenz der Methode der quantisierten Wellenfunktionen mit derjenigen der gewöhnlichen Wellenfunktionen im Konfigurationsraum ist im Prinzip bekannt; jedoch scheint es, daß der engere Zusammenhang zwischen den beiden Methoden keine genügende Beachtung gefunden hat. In der vorliegenden Arbeit wird die Beziehung zwischen den beiden Methoden eingehend verfolgt. Es erweist sich, daß diese Beziehung so eng ist, daß man in jedem Stadium der Rechnung mit gekwantelten Wellenfunktionen unmittelbar zum Konfigurationsraum übergehen kann.

Die Arbeit enthält zwei Teile. Der *erste Teil* hat einen einleitenden Charakter und enthält eine Ableitung und Zusammenstellung bekannter Resultate. Es wird dort der Übergang vom Konfigurationsraum zur zweiten Quantelung für den Fall der Bose- und Fermistatistik betrachtet, wobei die Eindeutigkeit der Bestimmung der Reihenfolge nicht vertauschbarer Faktoren besonders betont wird. Den Ausgangspunkt der Betrachtungen des *zweiten Teiles* bilden die Vertauschungsrelationen zwischen den gekwantelten Wellenfunktionen (ψ -Operatoren). Es wird gezeigt, daß diese Relationen durch gewisse Operatoren befriedigt werden, welche auf eine Folge von gewöhnlichen Wellenfunktionen für 1, 2, ..., n , ... Teilchen wirken. Dadurch werden die ψ -Operatoren im Konfigurationsraum (genauer: in einer Folge von Konfigurationsräumen) dargestellt. Ferner wird die Abhängigkeit der ψ -Operatoren von der Zeit betrachtet und es wird die Form des Operators $\hat{\psi} = \frac{\partial \psi}{\partial t}$ gefunden. Auf Grund der gewonnenen Darstellung wird gezeigt, daß die zeitabhängige Schrödingergleichung für die ψ -Operatoren als eine Folge von gewöhnlichen Schrödingergleichungen

¹⁾ Der Inhalt dieser Arbeit wurde im Januar 1931 im theoretischen Seminar an der Universität Leningrad vorgelesen; wegen äußerer Umstände hat sich aber die Publikation verzögert.

für 1, 2, ..., n , ... Teilchen geschrieben werden kann. Als weitere Anwendung der gewonnenen Darstellung wird eine einfache Ableitung der Hartreeschen Gleichungen mit Austausch gegeben.

*Erster Teil*¹⁾.

*Übergang vom Konfigurationsraum zur zweiten Quantelung*²⁾. Wir bezeichnen mit x_r die Gesamtheit der Variablen des r -ten Teilchens [also z. B. die Koordinaten und den Spin des Elektrons, $x_r = (x_r, y_r, z_r, \sigma_r)$] und betrachten die Wellenfunktion

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_n; t), \quad (1)$$

welche im Konfigurationsraum die Gesamtheit der n untereinander gleichen Teilchen beschreibt. Es ist zweckmäßig, durch eine kanonische Transformation von den ursprünglichen Variablen x zu neuen Variablen E mit nur diskreten Werten

$$E = E^{(0)}, E^{(1)}, \dots, E^{(r)}, \dots \quad (2)$$

überzugehen; die Größen (2) kann man sich als Eigenwerte eines Operators mit diskrettem Spektrum denken. Bezeichnen wir die entsprechenden Eigenfunktionen mit

$$\psi_r(x) = \psi(E^{(r)}, x), \quad (3)$$

so ist die transformierte Wellenfunktion

$$c(E_1, E_2, \dots, E_n; t) \quad (4)$$

mit der ursprünglichen Wellenfunktion (1) durch die Relation

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_n; t) = \sum_{E_1, \dots, E_n} c(E_1, E_2, \dots, E_n; t) \psi(E_1; x_1) \dots \psi(E_n; x_n) \quad (5)$$

verknüpft, wo jede der Summationsvariablen E_1, E_2, \dots, E_n alle Werte (2) durchläuft.

Die Schrödingergleichung im Konfigurationsraum lautet³⁾

$$H \psi(x_1, \dots, x_n; t) - i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = 0. \quad (6)$$

¹⁾ Der mit der Theorie der zweiten Quantelung vertraute Leser kann diesen ersten Teil überschlagen und die Lektüre gleich mit dem zweiten Teil anfangen.

²⁾ Literatur: 1. Einführung der zweiten Quantelung (Bosestatistik ohne Wechselwirkung): P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. London (A) **114**, 243, 1927. 2. Bosestatistik mit Wechselwirkung: P. Jordan u. O. Klein, ZS. f. Phys. **45**, 751, 1927; P. Jordan, ebenda S. 766. 3. Fermistatistik: P. Jordan, ebenda **44**, 473, 1927; P. Jordan u. F. Wigner, ebenda **47**, 631, 1928.

³⁾ Mit \hbar ist hier die durch 2π dividierte Plancksche Konstante bezeichnet; $\hbar = \frac{h}{2\pi}$.

Wir nehmen an, daß der Energieoperator H von der folgenden Form ist:

$$H = \sum_{k=1}^n H(x_k) + \sum_{k < l=1}^n G(x_k, x_l). \quad (7)$$

Die einfache Summe gibt hier die Energie der einzelnen Teilchen, die Doppelsumme — ihre Wechselwirkungsenergie. Im Falle Coulombscher Kräfte ist

$$G(x, x') = \frac{e^2}{|r - r'|}. \quad (8)$$

Die Schrödingergleichung für die transformierten Wellenfunktionen (4) bekommt man, indem man (5) in (6) einführt, das Resultat nach den Produkten

$$\psi(E_1; x_1) \dots \psi(E_n; x_n)$$

der Funktionen (3) entwickelt und die Koeffizienten der einzelnen Produkte gleich Null setzt. Es ergibt sich

$$\sum_{k=1}^n \sum_{W'} (E_k | H | W) c(E_1 \dots E_{k-1} W E_{k+1} \dots E_n; t) +$$

$$+ \sum_{k < l=1}^n \sum_{W' W''} (E_k E_l | G | W' W'') c(E_1 \dots E_{k-1} W E_{k+1} \dots E_{l-1} W' E_{l+1} \dots E_n; t) -$$

$$- i \hbar \frac{\partial}{\partial t} c(E_1 \dots E_n; t) = 0, \quad (9)$$

wo die folgenden Bezeichnungen für die Matrixelemente eingeführt wurden:

$$(E | H | W) = \int \bar{\psi}(E; x) H(x) \psi(W; x) dx, \quad (10a)$$

$$(E E' | G | W W') = \iint \bar{\psi}(E; x) \bar{\psi}(E'; x') G(x, x') \psi(W; x) \psi(W'; x') dx dx'. \quad (10b)$$

Die Argumente

$$E_1, E_2, \dots, E_k, \dots, E_n$$

der Wellenfunktionen c in (9) seien entsprechend gleich den Eigenwerten

$$E^{(\tau_1)}, E^{(\tau_2)}, \dots, E^{(\tau_k)}, \dots, E^{(\tau_n)}.$$

Schreiben wir abkürzend

$$(\tau | H | s) \text{ statt } (E^{(\tau)} | H | E^{(s)}),$$

$$(\tau t | G | s u) \text{ statt } (E^{(\tau)} E^{(t)} | G | E^{(s)} E^{(u)}),$$

$$c(\tau_1 \tau_2 \dots \tau_n; t) \text{ statt } c(E^{(\tau_1)} E^{(\tau_2)} \dots E^{(\tau_n)}; t),$$

so wird die Wellengleichung (9)

$$\sum_{\tau} \sum_{k=1}^n (\tau_k | H | \tau) c(\tau_1 \dots \tau_{k-1} \tau \tau_{k+1} \dots \tau_n; t) +$$

$$+ \sum_{\tau s} \sum_{k < l=1}^n (\tau_k \tau_l | G | \tau s) c(\tau_1 \dots \tau_{k-1} \tau \tau_{k+1} \dots \tau_{l-1} s \tau_{l+1} \dots \tau_n; t) -$$

$$- i \hbar \frac{\partial}{\partial t} c(\tau_1 \dots \tau_n; t) = 0. \quad (9a)$$

Bisher haben wir die Symmetrieeigenschaften der Wellenfunktion, also die Art der Statistik, nicht in Betracht gezogen. Nun ist aber die Wellenfunktion (sowohl ψ als auch c) entweder symmetrisch (Bosestatistik) oder antisymmetrisch (Fermistatistik). Im Falle der symmetrischen Wellenfunktion genügt zur Bestimmung des Wertes von $c(\tau_1 \tau_2 \dots \tau_n; t)$ die Festsetzung der Zahlen¹⁾

$$n_1, n_2, \dots, n_r, \dots \quad (11)$$

welche angeben, wie oft das betreffende Argument

$$1, 2, \dots, \tau, \dots$$

oder

$$E^{(1)}, E^{(2)}, \dots, E^{(\tau)}, \dots$$

in c auftritt. Wir können daher setzen

$$c(\tau_1 \tau_2 \dots \tau_n; t) = c^*(n_1 n_2 \dots; t). \quad (12)$$

Eine bestimmte Zahlenfolge (11) entspricht jetzt einem bestimmten Wertesystem $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n$ ohne Rücksicht auf die Reihenfolge der letzteren Größen. Wir haben z. B. (für $n = 3$)

$$c(4, 4, 5) = c(4, 5, 4) = c(5, 4, 4) = c^*(0, 0, 2, 1, 0, 0, \dots).$$

In der Normierungsbedingung

$$\sum_{\tau_1 \dots \tau_n} |c(\tau_1 \tau_2 \dots \tau_n; t)|^2 = 1 \quad (13)$$

kann man die Summation zunächst über alle Permutationen der Zahlen eines festen Wertesystems $\tau_1 \tau_2 \dots \tau_n$ und dann über verschiedene Wertesysteme ausführen:

$$\sum_{(\tau_1 \dots \tau_n) \text{ Perm.}} |c(\tau_1 \dots \tau_n; t)|^2 = 1.$$

Die Summe $\sum_{\text{Perm.}}$ enthält $\frac{n!}{n_1! n_2! \dots}$ gleiche Glieder; wir haben also

$$\sum_{(\tau_1 \dots \tau_n)} \frac{n!}{n_1! n_2! \dots} |c(\tau_1 \dots \tau_n; t)|^2 = 1$$

oder, wenn wir nach (12) die n_r als Variable einführen,

$$\sum_{n_1, n_2, \dots} \frac{n!}{n_1! n_2! \dots} |c^*(n_1 n_2 \dots; t)|^2 = 1. \quad (14)$$

¹⁾ In der unendlichen Zahlenfolge (11) sind höchstens n Zahlen von Null verschieden.

In der Normierungsbedingung (14) kann durch den Ansatz

$$c^*(n_1, n_2, \dots; t) = \frac{n!}{n_1! n_2! \dots} f(n_1, n_2, \dots; t) \tag{15}$$

die „Dichtefunktion“ $\frac{n!}{n_1! n_2! \dots}$ auf 1 reduziert werden. Für die neue Wellenfunktion f lautet dann die Normierungsbedingung

$$\sum_{n_1, n_2, \dots} |f(n_1, n_2, \dots; t)|^2 = 1. \tag{16}$$

Im Falle der Fermistatistik genügt die Angabe der Zahlen n_r zur eindeutigen Bestimmung von $c(r_1, r_2, \dots; t)$ zunächst noch nicht, denn durch diese Angabe ist die Größe c nur bis auf das Vorzeichen bestimmt. Wir können aber auch für die Fermistatistik die Gleichungen (12) und (15) beibehalten, wenn wir die Zusatzbedingung einführen, daß dort die Argumente in $c(r_1, r_2, \dots; t)$ eine „natürliche“ Reihenfolge bilden sollen, also z. B.

$$r_1 < r_2 < r_3 < \dots < r_n.$$

Falls die Reihenfolge der Argumente aus der natürlichen durch eine gerade Permutation entsteht, gilt die Gleichung (12) unverändert; für eine ungerade Permutation muß das Vorzeichen geändert werden. Wir haben z. B.

$$c(1, 4, 5) = -c(4, 1, 5) = c^*(1, 0, 0, 1, 1, 0, 0, \dots).$$

Von jetzt an betrachten wir die Bose- und die Fermistatistik gesondert.
A. Bosestatistik. In der Wellenfunktion $c(r_1, r_2, \dots; t)$ können im Falle der Bosestatistik mehrere gleiche Argumente vorkommen, z. B.

$$c = c(u, u, u, v, v, w, \dots).$$

In der ersten Summe des Ausdrucks (9a) können deshalb Funktionen auftreten, welche sich nur durch die Reihenfolge der Argumente unterscheiden, und zwar kommen dort n_u Glieder vor, in denen das Argument r an der Stelle von u steht, n_v Glieder mit r statt v , usw. Wenn wir gleiche Glieder zusammenfassen, bekommen wir für die erste Summe in (9a) den Ausdruck

$$\sum_r (u | H | r) n_u c(r, u, u, v, v, w, \dots) + \sum_r (v | H | r) n_v c(u, u, u, r, v, w, \dots) + \dots$$

Führen wir hier nach (12) die n_k als Variable ein, so bekommen wir

$$\sum_r (u | H | r) n_u c^*(\dots n_u - 1, \dots n_r + 1, \dots) + \sum_r (v | H | r) n_v c^*(\dots n_v - 1, \dots n_r + 1, \dots) + \dots$$

oder einfacher

$$\sum_p (p | H | r) n_p c^*(\dots n_p - 1, \dots n_r + 1, \dots), \tag{17}$$

wo der Index p nunmehr *alle* Werte (und nicht nur die Werte $p = u, v, w, \dots$) durchlaufen darf, da die überflüssigen Glieder wegen des Faktors n_p verschwinden. Für $r = p$ hat man dabei unter

$$c^*(\dots n_p - 1, \dots n_r + 1, \dots)$$

einfach

$$c^*(\dots, n_r, \dots)$$

zu verstehen.

Analog kann man auch die zweite Summe des Ausdrucks (9a) umformen. Wir bekommen dafür, wenn wir die Anzahl der untereinander gleichen Glieder berücksichtigen:

$$\sum_{r,s} \left\{ (u u | G | r s) \frac{1}{2} n_u (n_u - 1) c(r, s, u, v, w, \dots) + (u v | G | r s) n_u n_v c(r, u, u, s, v, w, \dots) + (v v | G | r s) \frac{1}{2} n_v (n_v - 1) c(u, u, r, s, w, \dots) + \dots \right\}$$

und wenn wir die Größen $c^*(n_1, n_2, \dots)$ einführen:

$$\sum_{r,s} \left\{ (u u | G | r s) \frac{1}{2} n_u (n_u - 1) c^*(\dots n_u - 2, \dots n_r + 1, \dots n_s + 1, \dots) + (u v | G | r s) n_u n_v c^*(\dots n_u - 1, \dots n_v - 1, \dots n_r + 1, \dots) + (v v | G | r s) \frac{1}{2} n_v (n_v - 1) c^*(\dots n_v - 2, \dots n_r + 1, \dots n_s + 1, \dots) + \dots \right\}$$

oder einfacher

$$\frac{1}{2} \sum_{p,q} \sum_{r,s} (p q | G | r s) n_p n_q c^*(\dots n_p - 1, \dots n_q - 1, \dots n_r + 1, \dots n_s + 1, \dots) \tag{18}$$

Hier können wiederum die Summationsindizes p und q alle Werte ohne Ausnahme (und nicht bloß $p, q = u, v, w, \dots$) durchlaufen. Der Faktor $1/2$ muß bei *allen* Gliedern stehen, da z. B. sowohl die Kombination $p = u, q = v$ als auch $p = v, q = u$ in (18) vorkommt. Die Bedeutung des Gliedes in (18) für den Fall, daß zwei oder mehrere der Zahlen p, q, r, s zusammenfallen, bedarf wohl keiner besonderen Erläuterung.

Mit Hilfe von (17) und (18) läßt sich die Wellengleichung (9a) schreiben:

$$\sum_p \sum_r (p | H | r) n_p c^*(\dots n_p - 1, \dots n_r + 1, \dots) + \frac{1}{2} \sum_{p,q} \sum_{r,s} (p q | G | r s) n_p n_q c^*(\dots n_p - 1, \dots n_q - 1, \dots n_r + 1, \dots) - i \hbar \frac{\partial}{\partial t} c^*(n_1, n_2, \dots; t) = 0. \tag{19}$$

Um weiter vorzugehen, ist es zweckmäßig, den Operator U_r einzuführen, welcher eine Funktion $f(n_1 n_2 \dots n_r \dots)$ in $f(n_1 n_2 \dots n_r + 1, \dots)$ verwandelt:

$$U_r f(n_1 n_2 \dots n_r \dots) = f(n_1 n_2 \dots n_r + 1 \dots) \quad (20)$$

Die Matrix von U_r und ihre adjungierte U_r^+ sind in bezug auf die Variable n_r von der Form

$$U_r = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \end{pmatrix}; \quad U_r^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (21)$$

Folglich verwandelt der adjungierte Operator U_r^+ die Funktion $f(n_1 n_2 \dots n_r \dots)$ in $f(n_1 n_2 \dots n_r - 1 \dots)$, falls $n_r \neq 0$ ist und in 0 für $n_r = 0$. Also

$$U_r^+ f(n_1 n_2 \dots n_r) = \begin{cases} f(n_1 n_2 \dots n_r - 1 \dots) & (n_r \neq 0) \\ 0 & (n_r = 0) \end{cases} \quad (22)$$

Aus der Definition von U_r folgt

$$U_r^+ U_r = 1. \quad (23a)$$

Dagegen ist $U_r U_r^+ \neq 1$, sondern

$$U_r U_r^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (23b)$$

Der Operator U_r ist also nicht unitär.

Ferner ist für $p \neq r$ U_p und U_r^+ mit U_r und U_p^+ vertauschbar.

Mit Hilfe der Operatoren U_p kann man die in (19) auftretenden Funktionen c^* in der folgenden Form schreiben:

$$\begin{aligned} c^*(\dots n_p - 1, \dots n_r + 1, \dots) &= U_p^+ U_r c^*(\dots n_p \dots n_r \dots), \\ c^*(\dots n_p - 1, \dots n_q - 1, \dots n_r + 1, \dots n_s + 1, \dots) &= \\ &= U_p^+ U_q^+ U_s U_r c^*(n_1 n_2 \dots n_p \dots n_q \dots n_r \dots n_s \dots). \end{aligned}$$

Die Reihenfolge der Faktoren (U^+ links von U) folgt eindeutig aus der Definition von c^* für $p = r$ in Verbindung mit (23a) und (23b). Diese Ausdrücke gelten für beliebige (auch zusammenfallende) Werte von p, q, r, s . Führt man sie in (19) ein, so bekommt man

$$\begin{aligned} &\sum_p \sum_q (p | H | r) n_p U_p^+ U_r c^*(n_1 n_2 \dots) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{p,q} \sum_{r,s} (pq | G | rs) n_p (n_q - \delta_{pq}) U_p^+ U_q^+ U_s U_r c^*(n_1 n_2 \dots) - \\ &- i \hbar \frac{\partial}{\partial t} c^*(n_1 n_2 \dots) = 0. \end{aligned} \quad (19a)$$

Wir müssen hier noch $c^*(n_1 n_2 \dots)$ nach (15) durch $f(n_1 n_2 \dots)$ ausdrücken. Der Operator n für die Gesamtzahl der Teilchen, und folglich auch $n!$, kommutiert offenbar mit den Produkten $U_p^+ U_r$ und $U_p^+ U_q^+ U_r U_s$; ferner haben wir

$$\frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} U_r \sqrt{n_1! n_2! \dots} = \sqrt{n_r + 1} U_r = U_r \sqrt{n_r}, \quad (24a)$$

$$\frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} U_r^+ \sqrt{n_1! n_2! \dots} = \frac{1}{\sqrt{n_r}} U_r^+. \quad (24b)$$

Das mit $\sqrt{\frac{n!}{n_1! n_2! \dots}}$ multiplizierte Glied $n_p U_p^+ U_r c^*(n_1 n_2 \dots)$ der ersten Summe in (19a) ist also gleich

$$\sqrt{\frac{n!}{n_1! n_2! \dots}} n_p U_p^+ U_r \sqrt{\frac{n_1! n_2! \dots}{n!}} f(n_1 n_2 \dots) = \sqrt{n_p} U_p^+ U_r \sqrt{n_r} f(n_1 n_2 \dots).$$

Analog bekommen wir mit Hilfe von (24) und der Beziehung

$$(n_q - \delta_{pq}) U_p^+ = U_p^+ n_q$$

für ein Glied der zweiten Summe in (19a) den Ausdruck

$$\begin{aligned} &\sqrt{\frac{n!}{n_1! n_2! \dots}} n_p (n_q - \delta_{pq}) U_p^+ U_q U_s U_r \sqrt{\frac{n_1! n_2! \dots}{n!}} f(n_1 n_2 \dots) = \\ &= \sqrt{n_p} U_p^+ \sqrt{n_q} U_q^+ U_s \sqrt{n_r} U_r \sqrt{n_r} f(n_1 n_2 \dots). \end{aligned}$$

Führt man diese Ausdrücke in (19a) ein, so bekommt man für $f(n_1 n_2 \dots; t)$ die Wellengleichung

$$H f(n_1 n_2 \dots; t) - i \hbar \frac{\partial f}{\partial t} = 0, \quad (25)$$

wo H den transformierten Energieoperator

$$\begin{aligned} H &= \sum_{p,r} (p | H | r) \sqrt{n_p} U_p^+ U_r \sqrt{n_r} + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{p,q,r,s} (pq | G | rs) \sqrt{n_p} U_p^+ \sqrt{n_q} U_q^+ \sqrt{n_s} U_s \sqrt{n_r} \end{aligned} \quad (26)$$

bezeichnet. Die Operatoren U_r und n_r kommen hier nur in der Kombination

$$b_r = U_r \sqrt{n_r}, \quad b_r^+ = \sqrt{n_r} U_r^+ \quad (27)$$

vor. Führt man (27) in (26) ein, so bekommt man für H den Ausdruck

$$H = \sum_{p,r} b_p^+ (p | H | r) b_r + \frac{1}{2} \sum_{p,q,r,s} b_p^+ b_q^+ (pq | G | rs) b_s b_r. \quad (28)$$

Wie aus der Definition (20) und (22) von U_r und U_r^+ hervorgeht, genügen die soeben eingeführten Operatoren b_r den Relationen

$$b_r^+ b_r = n_r; \quad b_r b_r^+ = n_r + 1 \tag{29}$$

und da außerdem, für $r \neq s$ b_r und b_r^+ mit b_s und b_s^+ vertauschbar sind, so hat man die bekannten Vertauschungsrelationen

$$b_r b_s^+ - b_s^+ b_r = \delta_{rs}, \tag{30a}$$

$$b_r b_s - b_s b_r = 0. \tag{30b}$$

Bildet man nun mit Hilfe der b_r die gequantelte Wellenfunktion

$$\psi(x) = \prod_r b_r \psi_r(x) \tag{31a}$$

mit ihrer adjungierten

$$\psi^+(x) = \prod_r b_r^+ \bar{\psi}_r(x), \tag{31b}$$

so läßt sich der Energieoperator H in der folgenden Form darstellen:

$$H = \int \psi^+(x) H(x) \psi(x) dx + \frac{1}{2} \iint \psi^+(x) \psi^+(x') G(x x') \psi(x) \psi(x') dx dx'. \tag{32}$$

Die Vertauschungsrelationen für die gequantelten Wellenfunktionen (ψ -Operatoren) folgen leicht aus (30a) und (30b) unter Berücksichtigung der Gleichung

$$\sum_r \bar{\psi}_r(x) \psi_r(x') = \delta(x - x').$$

Man bekommt

$$\psi(x') \psi^+(x) - \psi^+(x) \psi(x') = \delta(x - x'), \tag{33a}$$

$$\psi(x') \psi(x) - \psi(x) \psi(x') = 0. \tag{33b}$$

B. Fermistatistik. Wir kehren zur Wellengleichung (9a) zurück. Die Zahlen $r_1 r_2 r_3 \dots$ denken wir uns in der natürlichen Reihenfolge geordnet

$$r_1 < r_2 < r_3 < \dots < r_n, \tag{34}$$

so daß wir nach (12) haben

$$c(r_1 r_2 \dots r_n; t) = c^*(n_1 n_2 \dots; t). \tag{35}$$

In der natürlichen Reihenfolge steht die Zahl r_k an der Stelle

$$k = n_1 + n_2 + \dots + n_{r_k}. \tag{36}$$

Im k -ten Gliede der ersten Summe in (9a) wird r_k durch r ersetzt, so daß die Argumente in c dort in der Reihenfolge

$$r_1 r_2 \dots r_{k-1} r r_{k+1} \dots r_n \tag{37}$$

stehen, welche keine natürliche mehr ist: r steht hier an der Stelle k , während es an der Stelle

$$k' = n'_1 + n'_2 + \dots + n'_r$$

stehen sollte. [Die gestrichenen Größen sind die neuen Werte der n_s , die den Argumenten (*) in c entsprechen.] Deshalb ist

$$c(r_1 \dots r_{k-1} r r_{k+1} \dots r_n; t) = (-1)^{k+k'} c^*(\dots n_{r_k} - 1, \dots, n_r + 1, \dots).$$

Es ist zweckmäßig, an dieser Stelle die Operatoren α_r und α_r^+ einzuführen durch die Festsetzung

$$\alpha_r f(n_1 \dots n_r \dots) = \begin{cases} f(n_1 \dots n_r + 1 \dots) & \text{für } n_r = 0, \\ 0 & \text{für } n_r = 1, \end{cases} \tag{37a}$$

$$\alpha_r^+ f(n_1 \dots n_r \dots) = \begin{cases} 0 & \text{für } n_r = 0, \\ f(n_1 \dots n_r - 1 \dots) & \text{für } n_r = 1. \end{cases} \tag{37b}$$

Aus dieser Definition folgt, daß für $r \neq s$ die Operatoren α_r und α_r^+ mit α_s und α_s^+ vertauschbar sind (da sie auf verschiedene Variable wirken), während für $r = s$ die Gleichungen

$$\alpha_r^+ \alpha_r = n_r, \quad \alpha_r \alpha_r^+ = 1 - n_r, \tag{38}$$

gelten. Ferner beweist man leicht die Gleichung

$$\alpha_r (1 - 2n_r) = -(1 - 2n_r) \alpha_r. \tag{39}$$

Unter Benutzung der Operatoren α_r kann man schreiben

$$c^*(\dots n_{r_k} - 1, \dots, n_r + 1, \dots) = \alpha_{r_k}^+ \alpha_r c^*(n_1 n_2 \dots).$$

Die Reihenfolge der Faktoren $\alpha_{r_k}^+$ und α_k ist hier eindeutig bestimmt, denn für $r = r_k$ und $n_{r_k} = 1$ muß der Faktor von c^* rechts sich auf 1 reduzieren. Wir haben

$$(-1)^k = (-1)^{n_1 + \dots + n_{r_k}}$$

und da für $n = 0$ und $n = 1$ die Größe $(-1)^n$ mit $1 - 2n$ übereinstimmt, kann man dafür auch schreiben

$$(-1)^k = \prod_{p=1}^{r_k} (1 - 2n_p) = \nu_{r_k}$$

wo

$$\nu_s = \prod_{p=1}^s (1 - 2n_p) \tag{40}$$

die Wignersche Vorzeichenfunktion bezeichnet. Analog ist

$$(-1)^{k'} = \nu'_r,$$

wo ψ_r' mit den Zahlen n_r' gebildet ist. Wir haben also

$$c(\tau_1 \dots \tau_{k-1} \tau_k + 1 \dots; t) = \psi_{\tau_k} \psi_r' \alpha_{\tau_k}^+ \alpha_r c^*(n_1 n_2 \dots),$$

und wegen $\psi_r' \alpha_{\tau_k}^+ \alpha_r = \alpha_{\tau_k}^+ \alpha_r \psi_r$

kann man dafür schreiben

$$c(\tau_1 \tau \dots \tau_{k-1} \tau_k + 1 \dots; t) = \psi_{\tau_k} \alpha_{\tau_k}^+ \alpha_r \psi_r c^*(n_1 n_2 \dots).$$

Die erste Summe in (9a) ist also gleich

$$\sum_{\tau} \sum_{k=1}^n (\tau_k | H | \tau) \psi_{\tau_k} \alpha_{\tau_k}^+ \alpha_r \psi_r c^*(n_1 n_2 \dots).$$

Bei der Summation über k durchläuft hier der Index τ_k die Werte $\tau_k = r_1, \tau_2, \dots, \tau_n$. Statt dessen kann man *alle* Werte durchlaufen lassen, denn die überflüssigen Glieder verschwinden infolge der Eigenschaft des Operators α^+ . Wir bekommen also für die betrachtete Summe den Ausdruck

$$\sum_p \sum_{\tau} (p | H | \tau) \psi_p \alpha_p^+ \alpha_r \psi_r c^*(n_1 n_2 \dots). \tag{41}$$

Wir wollen jetzt die zweite Summe in (9a) umformen. Vor allem handelt es sich um die Bestimmung des Vorzeichens in der Gleichung

$$\begin{aligned} \pm c(\tau_1 \dots \tau_{k-1} \tau_k + 1 \dots \tau_{l-1} s \tau_l + 1 \dots \tau_n; t) &= \\ &= c^*(\dots n_{\tau_k} - 1, \dots n_{\tau_l} - 1, \dots n_r + 1, \dots n_s + 1, \dots) \\ &= c^*(n_1' n_2' \dots). \end{aligned}$$

Wir führen zunächst in c das Argument r , das an der k -ten Stelle steht, in die erste Stelle über; dadurch bekommt c den Faktor $-(-1)^k = -\psi_{\tau_k}$ und wir haben

$$\begin{aligned} c(\tau_1 \dots \tau_{k-1} \tau_k + 1 \dots \tau_{l-1} s \tau_l + 1 \dots \tau_n; t) &= \\ &= -\psi_{\tau_k} c(\tau_1 \dots \tau_{k-1} \tau_k + 1 \dots \tau_{l-1} s \tau_l + 1 \dots \tau_n; t). \end{aligned}$$

Falls $\tau_l > \tau_k$ war, ist hier s an der Stelle

$$l = n_1 + n_2 \dots + n_{\tau_l}$$

geblieben; für $\tau_l < \tau_k$ dagegen ist s um eine Stelle nach rechts gerückt und steht jetzt also an der Stelle $l+1$. Führen wir nun s in die zweite Stelle über, so bekommen wir

$$c(\dots \tau_{k-1} \tau_k + 1 \dots \tau_{l-1} s \tau_l + 1 \dots) = \begin{cases} -\psi_{\tau_k} \psi_{\tau_l} c(\tau s \tau_1 \tau_2 \dots) & \text{für } \tau_l \geq \tau_k, \\ +\psi_{\tau_k} \psi_{\tau_l} c(\tau s \tau_1 \tau_2 \dots) & \text{für } \tau_l < \tau_k. \end{cases}$$

Bezeichnen wir nun andererseits die natürlichen Stellen von r und s mit k' und l' :

$$\begin{aligned} k' &= n_1' + n_2' + \dots + n_r', \\ l' &= n_1' + n_2' + \dots + n_s', \end{aligned}$$

so bekommen wir durch eine ganz analoge Überlegung

$$\underbrace{c(\tau_1 \dots \tau \dots s \dots)}_{\text{natürl. Reihenfolge}} = c^*(n_1' n_2' \dots) = \begin{cases} -\psi_r' \psi_s c(\tau s \tau_1 \dots) & \text{für } s > r, \\ +\psi_r' \psi_s c(\tau s \tau_1 \dots) & \text{für } s < r. \end{cases}$$

Zusammen mit der vorhergehenden Gleichung ergibt das

$$c(\dots \tau_k - 1 \tau \tau_k + 1 \dots \tau_{l-1} s \tau_l + 1 \dots) = \begin{cases} +\psi_{\tau_k} \psi_{\tau_l} \psi_r' \psi_s c^*(n_1' n_2' \dots) & \text{im Fall I,} \\ -\psi_{\tau_k} \psi_{\tau_l} \psi_r' \psi_s c^*(n_1' n_2' \dots) & \text{im Fall II,} \end{cases}$$

wo die Fälle I und II durch die Ungleichungen

$$\text{oder } \begin{cases} \tau_l > \tau_k \text{ und } s > r & \text{Fall I,} \\ \tau_l < \tau_k \text{ und } s < r & \text{Fall II,} \end{cases}$$

$$\text{oder } \begin{cases} \tau_l > \tau_k \text{ und } s < r & \text{Fall I} \\ \tau_l < \tau_k \text{ und } s > r & \text{Fall II} \end{cases}$$

charakterisiert sind.

Das Ersetzen der Argumente $n_1 n_2 \dots$ durch $n_1' n_2' \dots$ in c^* wird durch den Operator $\alpha_{\tau_k}^+ \alpha_{\tau_l}^+ \alpha_r^+ \alpha_s$ bewirkt:

$$c^*(n_1' n_2' \dots) = \alpha_{\tau_k}^+ \alpha_{\tau_l}^+ \alpha_r^+ \alpha_s c^*(n_1 n_2 \dots).$$

Daß hier die Ordnung der Faktoren α^+ und α (soweit sie von Bedeutung ist) richtig gewählt ist, überzeugt man sich durch Betrachtung der Spezialfälle $r = \tau_k$, $s = \tau_l$ und $r = \tau_l$, $s = \tau_k$. Wenn wir noch die Gleichung

$$\psi_r' \psi_s \alpha_{\tau_k}^+ \alpha_{\tau_l}^+ \alpha_r^+ \alpha_s \alpha_r = \alpha_{\tau_k}^+ \alpha_{\tau_l}^+ \alpha_r^+ \alpha_s \alpha_r \psi_r \psi_s$$

berücksichtigen, haben wir also

$$c(\dots \tau_{k-1} \tau \tau_k + 1 \dots \tau_{l-1} s \tau_l + 1 \dots) = \begin{cases} +\psi_{\tau_k} \psi_{\tau_l} \alpha_{\tau_k}^+ \alpha_{\tau_l}^+ \alpha_r^+ \alpha_s \alpha_r \psi_r c^*(n_1 n_2 \dots) & \text{im Fall I,} \\ -\psi_{\tau_k} \psi_{\tau_l} \alpha_{\tau_k}^+ \alpha_{\tau_l}^+ \alpha_r^+ \alpha_s \alpha_r \psi_r c^*(n_1 n_2 \dots) & \text{im Fall II.} \end{cases}$$

Nun folgt aus (39) und aus der Definition (40) von ψ_s

$$\alpha_r \psi_s = \begin{cases} \psi_s \alpha_r & \text{für } r > s, \\ \alpha_r \psi_s = -\psi_s \alpha_r & \text{für } r \leq s. \end{cases} \tag{42}$$

Daher haben wir im Fall I entweder gleichzeitig

$$\alpha_r \psi_s = \psi_s \alpha_r \text{ und } \alpha_{\tau_k}^+ \psi_{\tau_l} = \psi_{\tau_l} \alpha_{\tau_k}^+ \text{ (für } r > s \text{ und } \tau_k > \tau_l)$$

oder gleichzeitig

$$\alpha_r \psi_s = -\psi_s \alpha_r \text{ und } \alpha_{\tau_k}^+ \psi_{\tau_l} = -\psi_{\tau_l} \alpha_{\tau_k}^+ \text{ (für } r < s \text{ und } \tau_k < \tau_l).$$

Im Falle I ist also der auf $c^*(n_1 n_2 \dots)$ wirkende Operator gleich

$$+\psi_{\tau_k} \alpha_{\tau_k}^+ \psi_{\tau_l} \alpha_{\tau_l}^+ \alpha_r^+ \alpha_s \psi_s \alpha_r \psi_r.$$

Aber dasselbe Vorzeichen hat dieser Operator auch im Falle II, denn wir haben dann entweder

$$\alpha_r \nu_s = \nu_s \alpha_r \quad \text{und} \quad \alpha_{r_k}^+ \nu_l = -\nu_l \alpha_{r_k}^+ \quad (\text{für } r > s \text{ und } r_k < r_l)$$

oder

$$\alpha_r \nu_s = -\nu_s \alpha_r \quad \text{und} \quad \alpha_{r_k}^+ \nu_l = \nu_l \alpha_{r_k}^+ \quad (\text{für } r < s \text{ und } r_k > r_l).$$

Wir haben also immer

$$e(\dots r_k - 1^r r_k + 1 \dots r_l - 1^s r_l + 1 \dots) = \nu_{r_k} \alpha_{r_k}^+ \nu_{r_l} \alpha_{r_l}^+ \alpha_s \nu_s \alpha_r \nu_r e^*(n_1 n_2 \dots).$$

Diesen Ausdruck müssen wir jetzt in die zweite Summe in (9a) einführen. Diese Summe wird gleich

$$\sum_{r,s} \sum_{k < l=1}^n (\tau_k \tau_l | G | r s) \nu_{r_k} \alpha_{r_k}^+ \nu_{r_l} \alpha_{r_l}^+ \alpha_s \nu_s \alpha_r \nu_r e^*(n_1 n_2 \dots). \quad (43)$$

Läßt man hier die Beschränkung $k < l$ fallen, so verdoppelt sich die Summe und wir müssen den Faktor $1/2$ hinzufügen. Wir bekommen dann

$$\frac{1}{2} \sum_{p,q} \sum_{r,s} (p q | G | r s) \nu_p \alpha_p^+ \nu_q \alpha_q^+ \alpha_s \nu_s \alpha_r \nu_r e^*(n_1 n_2 \dots). \quad (43)$$

Hier durchlaufen p und q zunächst nur die Werte r_1, r_2, \dots, r_n (wobei $p \neq q$ ist). Man kann sie aber alle Werte ohne Ausnahme durchlaufen lassen, wenn man beachtet, daß die überflüssigen Glieder verschwinden.

Das Einsetzen von (35), (41) und (43) in (9a) ergibt die Wellengleichung für die Wellenfunktion $e^*(n_1 n_2 \dots; t)$. Diese Wellenfunktion unterscheidet sich aber im Falle der Fermistatistik von der Wellenfunktion $f(n_1 n_2 \dots)$, Gleichung (15) nur um einen Faktor (nämlich $\sqrt{n!}$), welcher mit den einzelnen Gliedern des Energieoperators vertauschbar ist. Deshalb hat die Wellengleichung für $f(n_1 n_2 \dots)$ dieselbe Form wie für $e^*(n_1 n_2 \dots)$, nämlich

$$H f(n_1 n_2 \dots; t) - i \hbar \frac{\partial f}{\partial t} = 0,$$

wo der Energieoperator H nach (41) und (43) die folgende Form hat:

$$H = \sum_{p,r} (p | H | r) \nu_p \alpha_p^+ \alpha_r \nu_r + \frac{1}{2} \sum_{p,q,r,s} (p q | G | r s) \nu_p \alpha_p^+ \nu_q \alpha_q^+ \alpha_s \nu_s \alpha_r \nu_r. \quad (44)$$

Im Energieoperator H treten die Operatoren α_r und ν_r nur in der Kombination

$$\alpha_r = \alpha_r \nu_r; \quad \alpha_r^+ = \nu_r \alpha_r^+ \quad (45)$$

auf, und zwar ist

$$H = \sum_{p,r} \alpha_p^+ (p | H | r) \alpha_r + \frac{1}{2} \sum_{p,q,r,s} \alpha_p^+ \alpha_q^+ (p q | G | r s) \alpha_s \alpha_r. \quad (44a)$$

Wie man mit Hilfe von (36) und (42) leicht beweist, genügen die „gequantelten Amplituden“ a_r den Gleichungen

$$a_r^+ a_r = n_r, \quad a_r a_r^+ = 1 - n_r \quad (46)$$

und den Vertauschungsrelationen

$$a_r a_s^+ + a_s^+ a_r = \delta_{rs}, \quad (47a)$$

$$a_r a_s + a_s a_r = 0. \quad (47b)$$

Bildet man mit Hilfe der „Amplituden“ a_r die gequantelten Wellenfunktionen

$$\psi(x) = \sum_r a_r \psi_r(x), \quad (48a)$$

$$\psi^+(x) = \sum_r a_r^+ \bar{\psi}_r(x), \quad (48b)$$

welche den Vertauschungsrelationen

$$\psi(x') \psi^+(x) + \psi^+(x) \psi(x') = \delta(x - x'), \quad (49a)$$

$$\psi(x') \psi(x) + \psi(x) \psi(x') = 0 \quad (49b)$$

genügen, so kann man den Energieoperator, ebenso wie im Falle der Bosestatistik, in der Form

$$H = \int \psi^+(x) H(x) \psi(x) dx + \frac{1}{2} \iint \psi^+(x) \psi^+(x') G(x, x') \psi(x') \psi(x) dx dx' \quad (50)$$

schreiben.

Der Übergang von den gequantelten Amplituden a_r (oder b_r im Falle der Bosestatistik) zu den gequantelten Wellenfunktionen $\psi(x)$ stellt eine unitäre kanonische Transformation der Variablen des einen Teilchens dar [Übergang von den $E^{(r)}$ Formel (2) zu den x]. Die a_r (oder die b_r) können ebensogut wie $\psi(x)$ als gequantelte Wellenfunktionen angesehen werden, und die mit Hilfe der a_r (oder b_r) geschriebenen Formeln (wie z. B. die Vertauschungsrelationen oder der Ausdruck für den Energieoperator) sind mit denjenigen, welche mit den $\psi(x)$ geschrieben sind, inhaltlich gleichbedeutend.

Es sei noch bemerkt, daß auch alle anderen im Konfigurationsraum darstellbaren Operatoren nach dem Muster des Energieoperators transformiert und mit Hilfe der gequantelten Wellenfunktionen dargestellt werden können. Ebenso wie beim Energieoperator ergibt sich die Ordnung der nicht vertauschbaren Faktoren in ganz eindeutiger Weise.

Zweiter Teil.

Darstellung der ψ -Operatoren im Konfigurationsraum. In den Formeln der zweiten Quantelung tritt die Gesamtzahl n der Teilchen nicht mehr

explizite auf; die Formeln gelten für ein beliebiges oder auch für ein unbestimmtes n . Der Zahl n läßt sich der Operator

$$n = \int \psi^+(x) \psi(x) dx \tag{1}$$

zuordnen, der die Eigenwerte $n = 0, 1, 2, \dots$ hat.

Alle Operatoren können in bezug auf ihr Verhalten gegenüber dem Operator n in zwei Klassen eingeteilt werden: zur ersten Klasse gehören die mit n vertauschbaren, zur zweiten die nicht vertauschbaren Operatoren. Eine unabhängige Definition der Operatoren der ersten Klasse ist in der gleichzeitig erscheinenden Arbeit von P. Jordan gegeben. Es wird dort gezeigt, daß alle solche Operatoren nach der Koordinatenraummethode konstruiert werden können in einer Form, welche für beide Statistiken ganz dieselbe ist; sogar für die mathematisch möglichen, physikalisch nicht in Betracht kommenden Lösungen des Mehrkörperproblems gelten genau dieselben Formeln. Daraus folgt dann, daß für alle diese Operatoren auch Vertauschungsregeln gelten, welche unabhängig von der Statistik sind.

Wir wollen uns hier mit der Darstellung der allgemeinen mit n nicht vertauschbaren Operatoren im Konfigurationsraum befassen; vor allem handelt es sich um die Darstellung des Operators $\psi(x)$. Natürlich können die Resultate auch auf die mit n vertauschbaren Operatoren angewandt werden, da sich diese durch $\psi(x)$ und $\psi^+(x)$ ausdrücken lassen.

Um beide Arten der Statistik einheitlich zu erfassen, schreiben wir die Vertauschungsrelationen für die gequantelte Wellenfunktion in der Form

$$\psi(x') \psi^+(x) - \varepsilon \psi^+(x) \psi(x') = \delta(x - x'), \tag{2a}$$

$$\psi(x') \psi(x) - \varepsilon \psi(x) \psi(x') = 0, \tag{2b}$$

wo für die Bosestatistik $\varepsilon = +1$ und für die Fermistatistik $\varepsilon = -1$ zu setzen ist. Aus der Definition (1) des Operators n und aus den Vertauschungsrelationen (2) folgt für beide Arten der Statistik

$$n \psi - \psi (n - 1) = 0. \tag{3}$$

Wir wählen für $\psi(x)$ eine Darstellung, in welcher n Diagonalform hat. Bezeichnen wir die Matrixelemente von $\psi(x)$ in dieser Darstellung mit $(n|\psi|n')$, so folgt aus (3) die „Auswahlregel“:

$$(n - n' + 1) (n|\psi|n') = 0, \tag{3a}$$

welche besagt, daß nur Matrixelemente von der Form $(n|\psi|n + 1)$ von Null verschieden sind. Die Matrix $\psi(x)$ ist also von der Form

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} 0 & (0|\psi|1) & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & (1|\psi|2) & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & (2|\psi|3) & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \tag{4}$$

Ein einzelnes Matrixelement $(n - 1|\psi|n)$ in (4) kann aufgefaßt werden als ein Operator, welcher auf eine Funktion von n Variablen¹⁾ $x_1 x_2 \dots x_n$ wirkt und diese Funktion in eine solche von $n - 1$ Variablen $x_1 x_2 \dots x_{n-1}$ und vom Parameter x überführt. Der Operator $\psi(x)$ wirkt also auf eine Folge von Funktionen

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{const} \\ \psi(x_1) \\ \psi(x_1 x_2) \\ \psi(x_1 x_2 x_3) \\ \dots \end{array} \right. \tag{5}$$

von 0, 1, 2, 3, ... Variablen und führt sie in eine analoge Folge über; und zwar können die Funktionen (5) als gewöhnliche Schrödingersche Wellenfunktionen im Konfigurationsraum aufgefaßt werden²⁾. Wir wollen sagen, daß $\psi(x_1 x_2 \dots x_n)$ die Wellenfunktion im „ n -ten Teilraum“ ist. Wir wollen zeigen, daß durch den Ansatz

$$(n - 1|\psi(x)|n) \psi(x_1 x_2 \dots x_n) = \sqrt{n} \psi(x_1 x_2 \dots x_{n-1}) \tag{6}$$

die Vertauschungsrelationen (2) befriedigt werden, wenn man den zu $\psi(x)$ adjungierten Operator $\psi^+(x)$ richtig definiert. Nach (4) ist die Matrix für $\psi^+(x)$ von der Form

$$\psi^+(x) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ (1|\psi^+|0) & 0 & 0 & \dots \\ 0 & (2|\psi^+|1) & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \tag{4a}$$

wo $(n|\psi^+(x)|n - 1)$ der zu $(n - 1|\psi(x)|n)$ adjungierte Operator ist, der eine Funktion von $n - 1$ Variablen $x_1 x_2 \dots x_{n-1}$ in eine solche von n Variablen $x_1 x_2 \dots x_n$ und vom Parameter x überführt. Dabei ist zu beachten, daß der Operator $(n|\psi^+(x)|n - 1)$ die Symmetrieeigenschaft der Wellenfunktion nicht ändern darf; er muß eine symmetrische Funktion in eine symmetrische und eine antisymmetrische in eine antisymmetrische überführen. Wir wollen den Operator $(n|\psi^+(x)|n - 1)$ finden, indem wir seinen Kern bestimmen; wir können das tun, wenn wir den Kern von $(n - 1|\psi(x)|n)$ bilden und dann zum adjungierten Kern übergehen.

Da die Wellenfunktion entweder symmetrisch oder antisymmetrisch ist, kann man statt (6) auch schreiben

$$\begin{aligned} & (n - 1|\psi(x)|n) \psi(x_1 x_2 \dots x_n) = \\ & = \frac{1}{\sqrt{n}} [\psi(x_1 x_2 \dots x_{n-1}) + \varepsilon \psi(x_1 x_2 \dots x_{n-1}) + \dots + \varepsilon^{n-1} \psi(x_1 x_2 \dots x_{n-1} x)]. \end{aligned} \tag{6a}$$

¹⁾ Jede „Variable“ x_r ist eigentlich die Gesamtheit der Variablen, etwa x_r, y_r, z_r, σ_r , welche das r -te Teilchen beschreiben.

²⁾ Solche Funktionenfolgen sind zuerst von L. Landau u. R. Peierls (ZS. f. Phys. 62, 188, 1930) betrachtet worden.

Der Kern des durch (6a) definierten Operators ist

$$\begin{aligned}
 & (n-1; x_1 x_2 \dots x_{n-1} | \psi(x) | n; \xi_1 \xi_2 \dots \xi_n) = \\
 & = \frac{1}{\sqrt{n}} [\delta(\xi_1 - x) \delta(\xi_2 - x_1) \dots \delta(\xi_n - x_{n-1}) + \dots \\
 & + \varepsilon^{k-1} \delta(\xi_1 - x_1) \dots \delta(\xi_{k-1} - x_{k-1}) \delta(\xi_k - x) \delta(\xi_{k+1} - x_k) \dots \delta(\xi_n - x_{n-1}) + \dots \\
 & + \varepsilon^{n-1} \delta(\xi_1 - x_1) \dots \delta(\xi_{n-1} - x_{n-1}) \delta(\xi_n - x)]. \quad (7)
 \end{aligned}$$

Den Kern des adjungierten Operators $(n | \psi^+(x) | n-1)$ bekommt man, wenn man in (7) $\xi_1 \xi_2 \dots \xi_n$ durch $x_1 x_2 \dots x_n$ und $x_1 x_2 \dots x_{n-1}$ durch $\xi_1 \xi_2 \dots \xi_{n-1}$ ersetzt. Das Resultat der Anwendung des Operators $(n | \psi^+(x) | n-1)$ auf die Wellenfunktion $\psi(x_1 x_2 \dots x_{n-1})$ ist also gleich

$$\begin{aligned}
 & (n | \psi^+(x) | n-1) \psi(x_1 x_2 \dots x_{n-1}) = \\
 & = \frac{1}{\sqrt{n}} [\delta(x_1 - x) \psi(x_2 x_3 \dots x_n) + \varepsilon \delta(x_2 - x) \psi(x_1 x_3 \dots x_n) + \dots \\
 & + \varepsilon^{k-1} \delta(x_k - x) \psi(x_1 \dots x_{k-1} x_{k+1} \dots x_n) + \dots \\
 & + \varepsilon^{n-1} \delta(x_n - x) \psi(x_1 \dots x_{n-1})]. \quad (8)
 \end{aligned}$$

Der durch diese Gleichung definierte Operator $(n | \psi^+(x) | n-1)$ genügt der Forderung, daß er die Symmetrieeigenschaft der Wellenfunktion unverändert läßt; der Übergang von (6) zu (6a) wurde eben zu diesem Zweck ausgeführt.

Nachdem $\psi(x)$ und $\psi^+(x)$ definiert sind, können wir an den Beweis der Vertauschungsrelationen (2a) und (2b) herantreten. Wir müssen die Operatoren $\psi^+(x) \psi(x')$ und $\psi(x') \psi^+(x)$ bilden. Diese Operatoren sind mit n vertauschbar, haben also in bezug auf n Diagonalform. Wir haben

$$\psi^+(x) \psi(x') = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & A_1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & A_2 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (9a)$$

und

$$\psi(x') \psi^+(x) = \begin{pmatrix} B_0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & B_1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & B_2 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (9b)$$

wo mit A_n und B_n die Operatoren

$$A_n = (n | \psi^+(x) \psi(x') | n) = (n | \psi^+(x) | n-1) (n-1 | \psi(x') | n) \quad (10a)$$

und

$$B_n = (n | \psi(x') \psi^+(x) | n) = (n | \psi(x') | n+1) (n+1 | \psi^+(x) | n) \quad (10b)$$

bezeichnet sind, welche im n -ten Teilraum wirken. Indem wir zuerst (6) und dann (8) anwenden, finden wir

$$\begin{aligned}
 A_n \psi(x_1 x_2 \dots x_n) & = \delta(x_1 - x) \psi(x' x_2 \dots x_n) + \dots \\
 & + \varepsilon^{k-1} \delta(x_k - x) \psi(x' x_1 \dots x_{k-1} x_{k+1} \dots x_n) + \dots \\
 & + \varepsilon^{n-1} \delta(x_n - x) \psi(x' x_1 \dots x_{n-1}) \quad (11)
 \end{aligned}$$

oder, wenn wir die Symmetrieeigenschaft der Wellenfunktion berücksichtigen,

$$\begin{aligned}
 & (n | \psi^+(x) \psi(x') | n) \psi(x_1 \dots x_n) = \\
 & = \delta(x_1 - x) \psi(x' x_2 \dots x_n) + \dots + \delta(x_k - x) \psi(x_1 \dots x_{k-1} x' x_{k+1} \dots x_n) \\
 & + \dots + \delta(x_n - x) \psi(x_1 \dots x_{n-1} x'). \quad (11a)
 \end{aligned}$$

Wendet man zuerst (8) und dann (6) an und ersetzt man n durch $n+1$, so findet man:

$$\begin{aligned}
 B_n \psi(x_1 \dots x_n) & = (n | \psi(x') \psi^+(x) | n) \psi(x_1 \dots x_n) = \\
 & = \delta(x' - x) \psi(x_1 x_2 \dots x_n) + \varepsilon \delta(x_1 - x) \psi(x' x_2 \dots x_n) + \dots \\
 & + \varepsilon^k \delta(x_k - x) \psi(x' x_1 \dots x_{k-1} x_{k+1} \dots x_n) + \dots \\
 & + \varepsilon^n \delta(x_n - x) \psi(x' x_1 \dots x_{n-1}). \quad (12)
 \end{aligned}$$

Der Vergleich von (11) und (12) zeigt, daß

$$B_n \psi(x_1 x_2 \dots x_n) - \varepsilon A_n \psi(x_1 x_2 \dots x_n) = \delta(x - x') \psi(x_1 x_2 \dots x_n) \quad (13)$$

gilt. Nach (9a) und (9b) bedeutet das aber, daß die Vertauschungsrelation

$$\psi(x') \psi^+(x) - \varepsilon \psi^+(x) \psi(x') = \delta(x - x') \quad (2a)$$

besteht, wo rechts die Einheitsmatrix (in bezug auf n) hinzuzudenken ist.

Noch einfacher beweist man (2b). Nach (6) führt der Operator $\psi(x)$ die Funktionenfolge (5) in

$$\begin{aligned}
 & \left\{ \begin{array}{l} \psi(x) \\ \sqrt{2} \psi(x, x_1) \\ \sqrt{3} \psi(x, x_1, x_2) \\ \dots \dots \dots \end{array} \right\} \\
 & \psi^-(x) \left\{ \begin{array}{l} \text{const} \\ \psi(x_1) \\ \psi(x_1 x_2) \\ \psi(x_1 x_2 x_3) \\ \dots \dots \dots \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \psi(x) \\ \sqrt{2} \psi(x, x_1) \\ \sqrt{3} \psi(x, x_1, x_2) \\ \dots \dots \dots \end{array} \right\} \quad (14)
 \end{aligned}$$

über, d. h.

Wendet man auf (14) den Operator $\psi(x')$ an, so bekommt man

$$\psi(x') \psi(x) = \begin{pmatrix} \text{const} \\ \psi(x_1) \\ \psi(x_1 x_2) \\ \psi(x_1 x_2 x_3) \\ \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2 \cdot 1} \psi(x x') \\ \sqrt{3 \cdot 2} \psi(x x' x_1) \\ \sqrt{4 \cdot 3} \psi(x x' x_1 x_2) \\ \dots \end{pmatrix} \quad (15a)$$

Durch Vertauschung von x und x' bekommt man daraus

$$\psi(x) \psi(x') = \begin{pmatrix} \text{const} \\ \psi(x_1) \\ \psi(x_1 x_2) \\ \psi(x_1 x_2 x_3) \\ \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2 \cdot 1} \psi(x' x) \\ \sqrt{3 \cdot 2} \psi(x' x x_1) \\ \sqrt{4 \cdot 3} \psi(x' x x_1 x_2) \\ \dots \end{pmatrix} \quad (15b)$$

Nun sind aber die Ausdrücke (15a) und (15b) entweder gleich ($\epsilon = +1$, symmetrische Funktionen) oder entgegengesetzt gleich ($\epsilon = -1$, antisymmetrische Funktionen), womit (2b) bewiesen ist.

Mit Hilfe der gewonnenen Formeln können alle Operatoren der zweiten Quantelung nach der Koordinatenraummethode konstruiert werden. Diejenigen unter ihnen, die mit n nicht vertauschbar sind, wirken auf Folgen von Funktionen von der Art (5) und können nicht in einem Raum von bestimmter Dimensionszahl dargestellt werden. Für die mit n vertauschbaren Operatoren genügt es, das Diagonalelement der Matrix in bezug auf n zu betrachten, welches als Operator im n -ten Teilraum, d. h. im Konfigurationsraum für eine feste Anzahl n von Teilchen aufgefaßt werden kann. Der Energieoperator (50, Teil I) z. B. ist mit n vertauschbar, und seine Konstruktion im Konfigurationsraum führt auf den gewöhnlichen Schrödingerschen Energieoperator für n Teilchen zurück. Wir wollen hier noch einige Beispiele der mit n vertauschbaren Operatoren betrachten.

Der Operator $\psi^+(x) \psi(x)$ der Teilchendichte hat im n -ten Teilraum die Darstellung

$$(n | \psi^+(x) \psi(x) | n) \psi(x_1 \dots x_n) = [\delta(x_1 - x) + \delta(x_2 - x) + \dots + \delta(x_n - x)] \psi(x_1 \dots x_n). \quad (16)$$

Diese Formel ist ein Spezialfall von (11), den man bekommt, wenn man in (11) $x' = x$ setzt und die für jede stetige Funktion $f(x)$ gültige Beziehung

$$\delta(x_k - x) f(x) = \delta(x_k - x) f(x_k)$$

benutzt.

Multiplizieren wir (16) mit dem Volumenelement dx und integrieren wir über ein Teilvolumen V , so können wir schließen, daß der Operator

$$n_V = \int_V \psi^+(x) \psi(x) dx \quad (17)$$

im n -ten Teilraum die folgende Darstellung hat:

$$(n | n_V | n) \psi(x_1 \dots x_n) = n'_V(x_1 \dots x_n) \cdot \psi(x_1 \dots x_n). \quad (18)$$

Der Wert der Funktion $n'_V(x_1 \dots x_n)$, mit welcher in (18) multipliziert wird, ist gleich der Anzahl derjenigen der Argumente $x_1 x_2 \dots x_n$, die in das Teilvolumen V gehören. Der Operator $(n | n_V | n)$ hat also ganzzahlige Eigenwerte $n'_V = 0, 1, 2, \dots, n$, wie es auch zu fordern ist.

Als weiteres Beispiel betrachten wir den Operator für das Coulombsche Potential

$$V(r) = e^2 \int \frac{\psi^+(x') \psi(x')}{|r - r'|} dx'. \quad (19)$$

Um sein Matrixelement $(n | V(r) | n)$ zu bilden, ersetzen wir in (16) x durch x' , multiplizieren mit $\frac{e^2}{|r - r'|}$ und integrieren über x' . Wir bekommen

$$(n | V(r) | n) \psi(x_1 \dots x_n) = \sum_{k=1}^n \frac{e^2}{|r - r_k|} \psi(x_1 \dots x_n). \quad (20)$$

Der Operator $V(r)$ bedeutet also im n -ten Teilraum „Multiplikation mit $\sum_{k=1}^n \frac{e^2}{|r - r_k|}$ “.

Zeitabhängigkeit der ψ -Operatoren und die quantisierte Wellengleichung.
Die zeitliche Änderung des Zustandes eines physikalischen Systems kommt bekanntlich entweder in der Zeitabhängigkeit der Wellenfunktionen oder aber in der der Operatoren zum Ausdruck. Diejenige Darstellung der Operatoren, welche den zeitabhängigen Wellenfunktionen entspricht, bezeichnen wir nach Dirac¹⁾ als die Schrödingersche und die den zeitabhängigen Matrizen entsprechende als die Heisenbergsche Darstellung.

Es sei ψ die Wellenfunktion des Systems und $S(t)$ der unitäre Operator, welcher den Anfangswert $\psi(\cdot, 0)$ der Wellenfunktion in ihren Wert $\psi(\cdot, t)$ zur Zeit t überführt. (Mit einem Punkt sind hier die Variablen des Systems angedeutet.) Wir haben

$$\psi(\cdot, t) = S(t) \psi(\cdot, 0). \quad (21)$$

Differenziert man diese Gleichung nach der Zeit und ersetzt man $\psi(\cdot, 0)$ durch

$$\psi(\cdot, 0) = S^+(t) \psi(\cdot, t), \quad (21a)$$

¹⁾ P. A. M. Dirac, The principles of Quantum Mechanics, § 38. Oxford 1930.

so bekommt man

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \dot{S}(t) \psi(\cdot, 0) = \dot{S}(t) S^+(t) \psi(\cdot, t). \quad (22)$$

Den wegen $S S^+ = 1$ hermiteschen Operator $i \dot{S} S^+$ bezeichnen wir mit

$$i \dot{S}(t) S^+(t) = -i S(t) \dot{S}^+(t) = \frac{1}{\hbar} H. \quad (23)$$

H ist dann der Hamiltonoperator des Systems. Bezeichnen wir mit L einen Operator in der Schrödingerschen Darstellung, und mit $L'(t)$ denselben Operator in der Heisenbergschen Darstellung, so haben wir

$$L'(t) = S^+(t) L S(t). \quad (24)$$

Aus (24) und (21) ergibt sich

$$L'(t) \psi(\cdot, 0) = S^+(t) L \psi(\cdot, t). \quad (25)$$

Die zeitliche Ableitung dieses Ausdrucks ist gleich

$$\frac{dL'(t)}{dt} \psi(\cdot, 0) = \frac{d}{dt} [S^+(t) L \psi(\cdot, t)]. \quad (26)$$

Links steht der Operator $\frac{dL'}{dt}$ in der Heisenbergschen Darstellung. Be-

zeichnet man denselben Operator in der Schrödingerschen Darstellung mit $\frac{dL}{dt}$, so hat man, analog (24) und (25),

$$\frac{dL'}{dt} = S^+(t) \frac{dL}{dt} S(t) \quad (27)$$

und

$$\frac{dL'}{dt} \psi(\cdot, 0) = S^+(t) \frac{dL}{dt} \psi(\cdot, t). \quad (28)$$

Der Vergleich von (26) und (28) ergibt

$$\frac{dL}{dt} \psi(\cdot, t) = S(t) \frac{d}{dt} [S^+(t) L \psi(\cdot, t)] \quad (29)$$

oder, wenn man die Differentiationen ausführt,

$$\frac{dL}{dt} \psi(\cdot, t) = S(t) \dot{S}^+(t) L \psi(\cdot, t) + \frac{d}{dt} [L \psi(\cdot, t)]. \quad (30)$$

Beachtet man, daß nach (21) [bzw. (21a)] der Operator $S(t)$ [bzw. $S^+(t)$] die zeitliche Fortsetzung der Wellenfunktion um die Zeit t im positiven (bzw. im negativen) Sinne bewirkt, so kann man den Inhalt der Gleichung (29) folgendermaßen formulieren.

In der Schrödingerschen Darstellung bekommt man das Resultat der Anwendung des Operators $\frac{dL}{dt}$ auf die Wellenfunktionen $\psi(\cdot, t)$, wenn man folgende Operationen ausführt:

1. Anwendung des Operators L .
2. Zeitliche Fortsetzung in negativer Zeitrichtung um die Zeit t .
3. Differenzieren nach der Zeit.
4. Zeitliche Fortsetzung in positiver Zeitrichtung um die Zeit t .

Diese Formulierung hat den Vorteil, daß darin der Hamiltonoperator nicht explizite gebraucht wird.

Diese Vorschrift kann man nun auf die Bestimmung des Operators $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ anwenden, welcher in der quantisierten Wellengleichung auftritt. Der Operator L ist in diesem Falle die quantisierte Wellenfunktion $\psi(x, t)$ und $\psi(\cdot, t)$ ist die Funktionenfolge (5). Wir beschränken uns auf den Fall, daß die Teilchenzahl sich in der Zeit nicht ändert, und schließen dadurch die Betrachtung der Photonen aus. Um anschaulichere Formeln zu erhalten, betrachten wir die quantisierte Schrödingergleichung

$$[H^0(x) + V(x)] \psi(x) = i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (31)$$

wo $H^0(x)$ den gewöhnlichen Schrödingeroperator des Einkörperproblems bezeichnet:

$$H^0(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(x, y, z) \quad (32)$$

und $V(x) = V(\mathbf{r})$ der durch (19) definierte Operator für das Coulombsche Potential ist.

In unserem Falle bewirkt der Operator $S(t)$ im Konfigurationsraum einfach die zeitliche Fortsetzung der einzelnen Wellenfunktionen $\psi(x_1 x_2 \dots x_n; t)$ der Folge (5)

$$S(t) \begin{Bmatrix} \text{const} \\ \psi(x_1; 0) \\ \psi(x_1 x_2; 0) \\ \psi(x_1 x_2 x_3; 0) \\ \dots \dots \dots \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \text{const} \\ \psi(x_1; t) \\ \psi(x_1 x_2; t) \\ \psi(x_1 x_2 x_3; t) \\ \dots \dots \dots \end{Bmatrix}. \quad (33)$$

Der Operator $S(t)$ hat also die Diagonalform

$$S(t) = \begin{Bmatrix} S_0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & S_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & S_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & S_3 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{Bmatrix}, \quad (34)$$

wo $S_n = S_n(t)$ ein Operator ist, welcher die Wellenfunktion im n -ten Teilraum zeitlich fortsetzt:

$$S_n(t) \psi(x_1 x_2 \dots x_n; 0) = \psi(x_1 x_2 \dots x_n; t). \quad (35)$$

Wir haben ferner nach (23)

$$-i\hbar S_n(t) \dot{S}_n^+(t) = H(x_1, x_2, \dots, x_n). \tag{36}$$

wo $H(x_1, x_2, \dots, x_n)$ den Hamiltonoperator im n -ten Teilraum bezeichnet. Der Operator $-i\hbar S S^+$ ist also ebenfalls Diagonaloperator mit (36) als Diagonalelemente.

Wir bilden nun den Operator $\dot{\psi}(x, t) = \frac{\partial \psi}{\partial t}$. Wir haben nach (29)

$$\begin{aligned} \text{oder (30)} \quad \dot{\psi}(x, t) & \left\{ \begin{array}{l} \text{const} \\ \psi(x_1; t) \\ \psi(x_1, x_2; t) \\ \psi(x_1, x_2, x_3; t) \\ \dots \dots \dots \end{array} \right\} = \\ & \left\{ \begin{array}{l} \psi(x; t) \\ \sqrt{2} \psi(x_1; t) \\ \sqrt{3} \psi(x_1, x_2; t) \\ \dots \dots \dots \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \dot{\psi}(x; t) \\ \sqrt{2} \dot{\psi}(x_1; t) \\ \sqrt{3} \dot{\psi}(x_1, x_2; t) \\ \dots \dots \dots \end{array} \right\}, \tag{37} \end{aligned}$$

und wenn wir (36) beachten

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{\psi}(x, t) & \left\{ \begin{array}{l} \text{const} \\ \psi(x_1; t) \\ \psi(x_1, x_2; t) \\ \dots \dots \dots \end{array} \right\} = \\ & \left\{ \begin{array}{l} 0 \\ -\sqrt{2} H(x_1) \psi(x_1; t) \\ -\sqrt{3} H(x_1, x_2) \psi(x_1, x_2; t) \\ \dots \dots \dots \end{array} \right\} + i\hbar \left\{ \begin{array}{l} \dot{\psi}(x; t) \\ \sqrt{2} \dot{\psi}(x_1; t) \\ \sqrt{3} \dot{\psi}(x_1, x_2; t) \\ \dots \dots \dots \end{array} \right\}. \tag{38} \end{aligned}$$

Für den Operator auf der linken Seite der quantisierten Wellengleichung (31) bekommen wir, wenn wir (20) berücksichtigen,

$$\begin{aligned} [H^0(x) \psi + V(x) \psi] & \left\{ \begin{array}{l} \text{const} \\ \psi(x_1; t) \\ \psi(x_1, x_2; t) \\ \dots \dots \dots \end{array} \right\} = [H^0(x) + V(x)] \left\{ \begin{array}{l} \psi(x; t) \\ \sqrt{2} \psi(x_1; t) \\ \sqrt{3} \psi(x_1, x_2; t) \\ \dots \dots \dots \end{array} \right\} = \\ & \left\{ \begin{array}{l} H^0(x) \psi(x; t) \\ \sqrt{2} [H^0(x) + \frac{e^2}{|r-r_1|}] \psi(x_1; t) \\ \sqrt{3} [H^0(x) + \frac{e^2}{|r-r_1|} + \frac{e^2}{|r-r_2|}] \psi(x_1, x_2; t) \\ \dots \dots \dots \end{array} \right\}. \tag{39} \end{aligned}$$

Indem wir (38) und (39) gleichsetzen, bekommen wir (nachdem wir durch $\sqrt{2}, \sqrt{3}$ usw. dividieren) eine Kette von Gleichungen

$$H^0(x) \psi(x; t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x; t)}{\partial t}, \tag{40}$$

$$\left[H^0(x) + \frac{e^2}{|r-r_1|} + H(x_1) \right] \psi(x_1; t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x_1; t), \tag{40_1}$$

$$\begin{aligned} \left[H^0(x) + \frac{e^2}{|r-r_1|} + \frac{e^2}{|r-r_2|} + H(x_1, x_2) \right] \psi(x_1, x_2; t) = \\ = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x_1, x_2; t), \tag{40_2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left[H^0(x) + \sum_{k=1}^n \frac{e^2}{|r-r_k|} + H(x_1, x_2, \dots, x_n) \right] \psi(x_1, x_2, \dots, x_n; t) = \\ = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x_1, x_2, \dots, x_n; t). \tag{40_n+1} \end{aligned}$$

Aus (40) entnimmt man, daß

$$H(x) = H^0(x)$$

ist; Gleichung (40₂) liefert dann

$$H(x, x_1) = H^0(x) + H^0(x_1) + \frac{e^2}{|r-r_1|} \text{ usw.}$$

Allgemein liefert die $(n+1)$ -te Gleichung eine Rekurrenzbeziehung zwischen dem Schrödingeroperator für n und für $n+1$ Teilchen, nämlich

$$H(x, x_1, x_2, \dots, x_n) = H^0(x) + \sum_{k=1}^n \frac{e^2}{|r-r_k|} + H(x_1, x_2, \dots, x_n). \tag{41}$$

Drückt man jetzt $H(x_1, x_2, \dots, x_n)$ direkt durch H^0 aus, so bekommt man für den Hamiltonoperator des n -Körperproblems den gewöhnlichen Schrödingerischen Ausdruck

$$H(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{k=1}^n H^0(x_k) + \sum_{k>l=1}^n \frac{e^2}{|r_k-r_l|}. \tag{42}$$

Die quantisierte Wellengleichung (31) zerfällt also im Konfigurationsraum in eine Folge von gewöhnlichen Schrödingergleichungen

$$H(x_1, x_2, \dots, x_n) \psi(x_1, x_2, \dots, x_n; t) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \tag{43}$$

An diesem Beispiel sieht man, daß das Rechnen mit q -quantelten Wellenfunktionen in jedem Stadium einen unmittelbaren Übergang zum gewöhnlichen Konfigurationsraum gestattet.

Ableitung der Hartreeschen Gleichungen nach der Methode der zweiten Quantelung. Als einfache Anwendung der gewonnenen Resultate wollen wir die durch Berücksichtigung des Austauschergänzten Hartreeschen Gleichungen¹⁾ ableiten.

Die Gleichungen für die Eigenfunktionen des Energieoperators (sowie die Hartreeschen Gleichungen) können bekanntlich aus dem Variationsprinzip

$$\delta W = 0 \quad (44)$$

abgeleitet werden, wo W die Energie des Atoms im betrachteten stationären Zustand bezeichnet. Es genügt deshalb, den Ausdruck für die Energie zu finden. Nun ist aber W gleich dem Diagonalelement

$$W = (Wn | H | Wn) \quad (45)$$

der Matrix für den gequantelten Energieoperator H [Formel (50) des ersten Teiles]:

$$H = \int \psi^+(x) H(x) \psi(x) dx + \frac{e^2}{2} \iint \frac{\psi^+(x) \psi^+(x') \psi(x) \psi(x')}{|r - r'|} dx dx'. \quad (46)$$

Um W zu bestimmen, müssen wir die Matrixelemente der unter dem Integralzeichen stehenden Operatoren berechnen.

Wir haben

$$(Wn | \psi^+(x) H(x) \psi(x) | Wn) = H(x') (Wn | \psi^+(x) \psi(x') | Wn) \text{ für } x' = x. \quad (47)$$

Zur Berechnung des Matrixelementes des Operators im ersten Integral genügt es also, die Größe

$$\varrho(x x') = (Wn | \psi^+(x) \psi(x') | Wn) \quad (48)$$

zu bestimmen. Den Ausdruck für den Operator $\psi^+(x) \psi(x')$ im n -ten Teilraum haben wir bereits gefunden [Formel (11a)]; mit Hilfe der zum Eigenwert W gehörenden Eigenfunktion $\psi_W(x_1 x_2 \dots x_n)$ des Energieoperators im n -ten Teilraum bekommen wir daraus, wenn wir die Symmetrieeigenschaft der Wellenfunktion berücksichtigen,

$$\varrho(x x') = n \int \dots \int \bar{\psi}_W(x x_2 \dots x_n) \psi_W(x' x_2 \dots x_n) dx_2 \dots dx_n. \quad (49)$$

Um die Hartreeschen Gleichungen abzuleiten, müssen wir in diesem exakten Ausdruck die Wellenfunktionen durch einen Näherungsausdruck in Determinantenform

$$\psi_W(x_1 x_2 \dots x_n) = \frac{1}{n!} \|\varphi_i(x_k)\| \quad (i, k = 1, 2, \dots, n) \quad (50)$$

¹⁾ V. Fock, ZS. f. Phys. 61, 126, 1930.

ersetzen, wo die $\varphi_i(x)$ als orthogonal und normiert vorausgesetzt werden:

$$\int \bar{\varphi}_i(x) \varphi_k(x) dx = \delta_{i,k}. \quad (51)$$

Wir bekommen dann

$$\varrho(x x') = \sum_{i=1}^n \bar{\varphi}_i(x) \varphi_i(x') \quad (49a)$$

und folglich, nach (47) und (48),

$$(Wn | \psi^+(x) H(x) \psi(x) | Wn) = \sum_{i=1}^n \bar{\varphi}_i(x) H(x) \varphi_i(x). \quad (52)$$

Wir berechnen jetzt das Matrixelement des Operators im Doppelintegral (46). Mit Hilfe von (14), (16) und (8) findet man leicht, daß dieser Operator im n -ten Teilraum die folgende Bedeutung hat:

$$\begin{aligned} (n | \psi^+(x) \psi^+(x') \psi(x) \psi(x') | n) \psi(x_1 x_2 \dots x_n) &= \\ &= \sum_{\substack{k, l=1 \\ (k \neq l)}}^n \delta(x_k - x) \delta(x_l - x') \cdot \psi(x_1 x_2 \dots x_n). \end{aligned} \quad (53)$$

Folglich ist sein Matrixelement gleich

$$\begin{aligned} (Wn | \psi^+(x) \psi^+(x') \psi(x') \psi(x) | Wn) \\ = n(n-1) \int \dots \int |\psi_W(x x' x_2 \dots x_n)|^2 dx_2 \dots dx_n. \end{aligned} \quad (54)$$

Nach dem Einsetzen des Determinantenausdrucks (50) für ψ_W bekommt man aus (54) die Näherungsformel¹⁾

$$(Wn | \psi^+(x) \psi^+(x') \psi(x') \psi(x) | Wn) = \varrho(x, x) \varrho(x', x') - |\varrho(x, x')|^2. \quad (55)$$

Führt man nun (52) und (55) in (46) ein, so bekommt man für das Matrixelement von H , d. h. für die Energie W , den Ausdruck

$$\begin{aligned} W &= \int \sum_{i=1}^n \bar{\varphi}_i(x) H(x) \varphi_i(x) dx \\ &+ \frac{e^2}{2} \iint \frac{\varrho(x x) \varrho(x' x') - |\varrho(x x')|^2}{|r - r'|} dx dx'. \end{aligned} \quad (56)$$

Dieser Ausdruck unterscheidet sich nur dadurch von dem in unserer zitierten Arbeit angegebenen²⁾, daß wir hier die Spinkoordinate in der Variablen x einbegriffen denken und folglich berechtigt sind, mit rein antisymmetrischen Wellenfunktionen zu operieren.

Leningrad, Physikalisches-Technisches Institut.

¹⁾ Vgl. P. A. M. Dirac, Proc. Cambridge Phil. Soc. 27 (II), 240, 1930.

²⁾ V. Fock, ZS. f. Phys. 61, 126, 1930, Formel (93).

Nicol geht. Es kommt auch vor, daß sich die zwei Nicolhälften an kleinen Stellen so zusammenpressen, daß optischer Kontakt entsteht und dazu kein polarisiertes Licht mehr an diesen Stellen austreten kann. Deshalb hat sich diese Art der Verbindung beider Prismenhälften mit Glycerin nicht bewährt. Ricinusöl, das sich indes zum Zusammenkleben beider

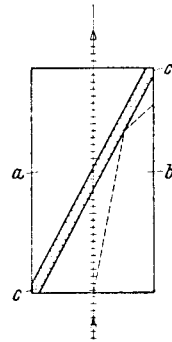


Fig. 1.
Ultraviolett-durchlässiges Polarisationsprisma.
a und b sind die beiden Prismenhälften, c ist der mit der Flüssigkeit auszufüllende Luftraum.

Prismenhälften besser bewährt hat, leidet an dem Übelstand, daß es nach einiger Zeit schon stark an seiner UV-Durchlässigkeit einbüßt und deshalb von Zeit zu Zeit Neuklebungen vorgenommen werden müssen, die dann jedesmal eine gewisse Zerlegung und Neujustierung des betreffenden Apparates bedingen.

Diese erwähnten Nachteile der mit Glycerin oder Ricinusöl zusammengeklebten Prismen konnte ich in folgender Weise gründlich beseitigen: Beide Prismenhälften sind nicht mehr wie bisher zusammengekittet oder zusammengeklebt, sondern zunächst durch einen dünnen Luftabstand (Fig. 1) voneinander getrennt. Diese Luftschicht wird mit einer Flüssigkeit ausgefüllt, deren Brechungsindex dem des durchgehenden extraordinären Strahls entspricht. Nachdem die Flüssigkeit zwischen die Prismen gebracht ist, wird das Prisma so abgedichtet, daß von der Flüssigkeit nichts entweichen kann.

Polarisationsprismen, in dieser Art hergestellt, haben sich gut und als durchaus dauerhaft bewährt. Die Verwendbarkeit geht bis etwa $0,250 \mu$, denn unterhalb $0,250 \mu$ beginnt der Kalkspat selbst merklich zu absorbieren. Glycerin indes läßt die kurzwelligen Strahlen noch bis $0,185 \mu$ hindurch.

Berichtigung

zu der Arbeit „Konfigurationsraum und zweite Quantelung“¹⁾ von V. Fock.

Auf S. 628 der genannten Arbeit müssen in den Formeln (23a) und (23b), und folglich auch in der nicht numerierten Formel für c^* , die Operatoren U_r und U_r^* in anderer Reihenfolge stehen (also z. B. $U_r U_r^* = 1$; $U_r^* U_r \neq 1$). Trotzdem ist Formel (19a) richtig, wie sie hingeschrieben ist, denn wegen der Multiplikation mit n_p bzw. mit $n_p (n_q - \delta_{pq})$ ist dort die Reihenfolge der U -Faktoren gleichgültig. Ebenso sind auch alle weiteren Formeln richtig.

¹⁾ ZS. f. Phys. 75, 622, 1932.

Alexandrow, W.
keit der re-
gebiete für a
Alper, Tikvah
und die Bez
weite und G
same Elektro
Atorf, B. 16
1932
S. 111
Borjes, H.
Messung
Nilsen, S. 11
Boeker, H. 16
und J. 16
S. 11
L. 16
und N. 16
strahlen. S. 7
— s. Weizel, H.
Bothe, H. 16
S. 11
L. 16
S. 11
Bothe, H. 16
Das kurzwe
entladung als
thodenstrahlen
Bothe, W. s. B.
Burger, H. C. s.
Carlsson, Erik
linien der K
nium. S. 471.
Carrelli, A. und
messungen im