Zur Methode der zweiten Quantelung.

Von **P. Jordan** in Rostock.

(Eingegangen am 10. März 1932.)

Der Zusammenhang zwischen den beiden verschiedenen Methoden zur Behandlung des Mehrkörperproblems mit äquivalenten Teilchen (Koordinatenraummethode und sogenannte zweite Quantelung) wird wesentlich anschaulicher, wenn man, statt lediglich die Äquivalenz der in beiden Fällen vorkommenden Eigenfunktionen zu beweisen, die beiderseits vorkommenden Matrizen direkt miteinander vergleicht.

§ 1. Für die Behandlung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems mit äquivalenten Teilchen sind bekanntlich zwei verschiedene Methoden ausgebildet worden; einerseits die „Koordinatenraummethode", andererseits die sogenannte „zweite Quantelung". Die Äquivalenz der beiden äußerlich sehr verschiedenen Methoden war bislang nur durch einigermaßen verwickelte und undurchsichtige Beweise sichergestellt[1]).

Man kann jedoch diese Äquivalenz, wie hier gezeigt werden soll, auch auf einem anderen Wege beweisen, wobei sich wesentlich engere Beziehungen zwischen den beiden Methoden erkennen lassen, als nach den bisherigen Überlegungen. Dieser neue Beweis unterscheidet sich von dem früheren dadurch, daß nicht die bei beiden Methoden auftretenden *Eigenfunktionen*, sondern die in beiden Fällen die physikalischen Größen darstellenden *Matrizen* selbst unmittelbar als identisch erkannt werden.

Wesentlich für die Methode der zweiten Quantelung ist das Auftreten von Matrizen N_r oder $N(\mathfrak{r})$, welche die *Anzahl* derjenigen Teilchen bedeuten, bei welchen etwa die Energie einen bestimmten Wert $W^{(r)}$ besitzt, oder bei welchen der Ort gerade gleich $\mathfrak{r}$ ist. Diese Matrizen können aber auch vom Standpunkt der Koordinatenraummethode definiert werden; d. h. sie können konstruiert werden als symmetrische Funktionen der Koordinaten und Impulse der n vorhandenen Teilchen. Sei nämlich $\mathfrak{r}_k$ die Matrix des Ortes des k-ten Teilchens, so wird die Anzahl der am Orte $\mathfrak{r}$ befindlichen Teilchen gleich

$$\overline{N}(\mathfrak{r}) = \sum_k \delta(\mathfrak{r}_k - \mathfrak{r}\cdot E),$$

wobei die Diracsche δ-Funktion gebraucht ist. Der Deutlichkeit halber ist zu dem c-Zahlvektor $\mathfrak{r}$ die *Einheitsmatrix* E als Faktor ausdrücklich hinzugeschrieben.

[1]) Vgl. jedoch die voranstehende Arbeit von V. Fock.

Jede symmetrische Funktion der $\mathfrak{r}_k$, welche die spezielle Form

$$F(\mathfrak{r}_1, \mathfrak{r}_2, \ldots, \mathfrak{r}_n) = \sum_k f(x_k, y_k, z_k)$$

besitzt, kann auf die Matrizen $\overline{N}(\mathfrak{r})$ zurückgeführt werden:

$$F = \iiint dx\,dy\,dz \cdot f(x, y, z)\cdot \overline{N}(\mathfrak{r}).$$

Die *Gesamtzahl der vorhandenen Teilchen* läßt sich ausdrücken als

$$\iiint dx\,dy\,dz \cdot \overline{N}(\mathfrak{r}) = n\cdot E.$$

Entsprechend wird für die diskreten Werte $W^{(r)}$ der Energie W_k des k-ten Teilchens:

$$\overline{N}_r = \sum_k \delta(W_k - W^{(r)}\cdot E),$$

wo jetzt das Zeichen δ nicht mehr die Diracsche δ-Funktion, sondern die Funktion

$$\delta(\nu) = \begin{cases} 0 & \text{für } \nu \neq 0 \\ 1 & \text{für } \nu = 0 \end{cases}$$

bedeutet. Anders ausgedrückt: Sei

$$W_k = \sum_r W^{(r)} E_k^{(r)},$$

wo $E_k^{(r)}$ die in W_k zum Eigenwert $W^{(r)}$ gehörige *Einzelmatrix* ist; dann ist

$$\overline{N}_r = \sum_k E_k^{(r)}.$$

Wieder ergibt sich für die Gesamtzahl der vorhandenen Teilchen:

$$\sum_r \overline{N}_r = \sum_{r\,k} E_k^{(r)} = n\,E.$$

§ 2. Die symmetrischen Funktionen der Koordinaten ξ und Impulse η von n Teilchen sind aufzubauen aus Funktionen der folgenden Formen:

$$\left.\begin{aligned} F^{\mathrm{I}} &= \frac{1}{1!}\sum_k f^{\mathrm{I}}(\xi_k; \eta_k), \\ F^{\mathrm{II}} &= \frac{1}{2!}\sum_{k \neq l} f^{\mathrm{II}}(\xi_k, \xi_l; \eta_k, \eta_l), \\ F^{\mathrm{III}} &= \frac{1}{3!}\sum_{\substack{k\neq l\\ l\neq m\\ m\neq k}} f^{\mathrm{III}}(\xi_k, \xi_l, \xi_m; \eta_k, \eta_l, \eta_m). \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \end{aligned}\right\} \quad (1)$$

Wir können und wollen gleich jeden einzelnen Summanden f^{II}, f^{III} usw. als *symmetrisch* in den in ihm vertretenen Teilchen annehmen.

Es sei nun W_k (nicht mehr notwendig eine Energie, sondern) irgendeine Funktion von ξ_k, η_k allein, und zwar mit lauter diskreten, einfachen Eigenwerten $W^{(r)}$. Für das *Einkörperproblem* ($n = 1$, also auch $k = 1$) wählen wir eine Matrixdarstellung der physikalischen Größen, bei welcher W_1 eine *Diagonalmatrix* wird. Dann entspreche die Funktion $f^I(\xi_1, \eta_1)$ einer Matrix

$$f^I(\xi_1, \eta_1) = (f^I_{rs}). \tag{2}$$

Wieder übergehend zum Mehrkörperproblem mit irgendeinem n, *definieren* wir ein System von Matrizen C^I_{rs} durch folgende Forderung: Für *jede* Funktion (2) sei

$$\sum_{rs} f^I_{rs} C^I_{sr} = \frac{1}{1!} \sum_k f^I(\xi_k, \eta_k). \tag{3}$$

Dabei sieht man, wenn man sich an die in § 1 gegebene Definition der $\overline{N}_r$ erinnert, daß

$$C^I_{rr} = \overline{N}_r \tag{4}$$

wird. [Man wähle speziell $f^I(\xi_k, \eta_k) = E_k^{(r)}$, so daß in f^I nur das Matrixelement $f^I_{rr} = 1$ von Null verschieden ist.] Ferner wird

$$C^{I\dagger}_{sr} = C_{rs}. \tag{5}$$

Entsprechend definieren wir Matrizen $C^{II}_{ss'rr'}$, $C^{III}_{ss's''rr'r''}$ usw. Es genügt, noch die Definition der $C^{II}_{ss'rr'}$ ausführlich zu erläutern. Wir wählen für das *Zweikörperproblem* ($n = 2$, also $k = 1$ oder 2) eine Matrixdarstellung, bei welcher W_1 und W_2 (korrekter ausgedrückt: *alle symmetrischen Funktionen* von W_1 und W_2) Diagonalmatrizen werden. Dabei werde

$$f^{II}(\xi_1, \xi_2; \eta_1, \eta_2) = f^{II}(\xi_2, \xi_1; \eta_2, \eta_1) = (f^{II}_{rr'ss'}) = (f^{II}_{r'rs's}). \tag{6}$$

Dann fordern wir als Definition der $C^{II}_{ss'rr'}$ die Übereinstimmung

$$\sum_{\substack{rr'\\ss'}} f^{II}_{rr'ss'} C^{II}_{ss'rr'} = \frac{1}{2!} \sum_{k \neq l} f^{II}(\xi_k, \xi_l; \eta_k, \eta_l) \tag{7}$$

für *jede* Matrix (6), und dazu noch die Symmetriebeziehung

$$C^{II}_{ss'rr'} = C^{II}_{s'sr'r}. \tag{8}$$

Offenbar wird

$$(C^{II}_{ss'rr'})^\dagger = C^{II}_{rr'ss'}. \tag{9}$$

Selbstverständlich hängen die so definierten $C^I, C^{II}, \ldots$ noch wesentlich vom Parameter n ab.

Fragen wir endlich nach denjenigen Matrizen $\overline{C}^I, \overline{C}^{II}, \ldots$, welche in bezug auf eine Größe $\overline{W}$ dieselbe Rolle spielen, wie die $C^I, C^{II}, \ldots$ in bezug auf W (so daß also insbesondere $\overline{C}^{II}_{rr}$ die Anzahl derjenigen Teilchen ist, für welche die Größe $\overline{W}$ den Wert $\overline{W}^{(r)}$ besitzt), so sehen wir unmittelbar aus (3) bzw. (7), (8), (9), daß diese $\overline{C}$ aus den C hervorgehen durch eine *lineare Transformation*; und zwar transformieren sich z. B. die C^I_{rs} beim Übergang von W zu $\overline{W}$ in die $\overline{C}^I_{rs}$ in derselben Weise, wie die Elemente f_{rs} einer jeden Matrix $f^I(\xi_1, \eta_1)$ beim Übergang von derjenigen Matrixdarstellung, die W_1 als Diagonalmatrix erscheinen läßt, zu derjenigen, in welcher $\overline{W}_1$ Diagonalmatrix wird. Entsprechend transformieren sich die C^{II} wie die Komponenten eines „Tensors vierten Ranges" im Hilbertraum des Einkörperproblems usw.

§ 3. Aus den in § 2 gegebenen Definitionen der $C^I, C^{II}, \ldots$ ergeben sich unmittelbar die für diese Matrizen geltenden *Vertauschungsregeln.* Es genüge Betrachtung der C^I. Aus zwei Funktionen F^I und G^I des einfachsten Typs in (1) kann man auf zwei Arten eine neue Funktion desselben Typs ableiten. Erstens durch *Addition:*

$$F^I + G^I = \sum_k (f^I_k + g^I_k) \tag{10}$$

[wir schreiben jetzt kurz f_k statt $f(\xi_k, \eta_k)$]; zweitens durch *Klammerbildung* (wir schreiben kurz $[X, Y]$ für $XY - YX$):

$$[F^I, G^I] = \sum_k [f^I_k, g^I_k]. \tag{11}$$

Da nun die Definitionsgleichung (3) der C^I für *jedes* F^I gelten soll, so ist zu fordern:

$$[F^I, G^I] = \sum_{\substack{\mu\nu\\\varrho\sigma}} f^I_{\mu\nu} g^I_{\varrho\sigma} [C^I_{\nu\mu}, C^I_{\sigma\varrho}] \tag{12}$$

einerseits, und andererseits:

$$[F^I, G^I] = \sum_{rs} [f^I, g^I]_{rs} C^I_{sr} = \sum_{\substack{rs\\\tau}} (f^I_{r\tau} g^I_{\tau s} - g^I_{r\tau} f^I_{\tau s}) C^I_{sr}. \tag{13}$$

Also bei zweckmäßiger Umformung in (13):

$$\sum_{\substack{\mu\nu\\\varrho\sigma}} f^I_{\mu\nu} g^I_{\varrho\sigma} [C^I_{\nu\mu}, C^I_{\sigma\varrho}] = \sum_{\substack{\mu\nu\\\varrho\sigma}} f^I_{\mu\nu} g^I_{\varrho\sigma} \{\delta_{\varrho\nu} C^I_{\sigma\mu} - \delta_{\mu\sigma} C^I_{\nu\varrho}\}. \tag{14}$$

Wegen der Willkür der Matrizen f^I, g^I ergibt das aber die Vertauschungsregel[1])

$$[C^I_{\nu\mu}, C^I_{\sigma\varrho}] = \delta_{\varrho\nu} C^I_{\sigma\mu} - \delta_{\mu\sigma} C^I_{\nu\varrho}. \tag{15}$$

[1]) Sie besagt, daß die $C^I_{\nu\mu}$ eine (infinitesimale) Darstellung der Gruppe aller linearen Transformationen des Hilbertraumes bilden.

Entsprechend ergeben sich alle sonstigen aus den Größen C^{I}_{rs} zu bildenden Klammergrößen.

§ 4. Die bisherigen Betrachtungen beziehen sich sowohl auf den Fall symmetrischer als auch auf den Fall antisymmetrischer Eigenfunktionen. (Sogar für die weiteren, mathematisch möglichen, aber physikalisch nicht in Betracht kommenden Lösungen des nach der Koordinatenraummethode formulierten Mehrkörperproblems gelten die vorangehenden Betrachtungen.) In *allen* Fällen gilt also *dieselbe Konstruktion der Matrizen* $C^{\text{I}}, C^{\text{II}}, \ldots$, und die *Vertauschungsregeln* dieser Matrizen $C^{\text{I}}, C^{\text{II}}, \ldots$ sind ebenfalls *unabhängig von der geltenden Statistik.* Von jetzt an sind jedoch die beiden verschiedenen Statistiken gesondert zu behandeln.

Unser Ziel ist die *explizite* Konstruktion der Matrizen C. Dazu verhilft im Einstein-Boseschen Falle ein irreduzibles System von Matrizen b_r, welches den Gleichungen

$$[b_r^\dagger, b_s] = -\delta_{rs}; \quad [b_r, b_s] = 0 \tag{16}$$

genügt; seine Konstruktion ist bekannt. Mit diesen b_r definieren wir:

$$\left.\begin{aligned} B^{\text{I}}_{sr} &= b_r^\dagger\, b_s, \\ B^{\text{II}}_{ss'rr'} &= b_r^\dagger\, b_{r'}^\dagger\, b_{s'} b_s, \\ B^{\text{III}}_{ss's''rr'r''} &= b_r^\dagger\, b_{r'}^\dagger\, b_{r''}^\dagger\, b_{s''}\, b_{s'}\, b_s, \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots \end{aligned}\right\} \tag{17}$$

Das Gesamtsystem aller dieser B ist *reduzibel*: denn alle B sind vertauschbar mit der „*Gesamtzahl der vorhandenen Teilchen*"

$$N = \sum_r N_r = \sum_r B^{\text{I}}_{rr}. \tag{18}$$

Wir kommen nun (für den Einstein-Boseschen Fall) auf die in § 2, 3 gebrauchten Matrizen C^{I} des n-Körperproblems zurück, indem wir aus dem System aller B^{I} denjenigen *irreduziblen Bestandteil* herausnehmen, der zum Eigenwert n von N gehört. Jede Matrix C^{I}_{rs} ist der zu diesem irreduziblen Bestandteil gehörige Teil der entsprechenden Matrix B^{I}_{rs} usw. entsprechend für $C^{\text{II}}, C^{\text{III}}, \ldots$

Zum Beweis dieser Behauptung ist im wesentlichen nur der Nachweis erforderlich[1]), daß die B auf Grund der Definitionen (17) und der vorausgesetzten Gleichungen (16) denselben *Vertauschungsregeln* genügen, wie wir sie in § 3 für die entsprechenden C gefunden haben. Das ist durch Nachrechnen zu bestätigen. Auch ergibt sich Übereinstimmung bei Betrachtung der Transformationen von den C zu den $\overline{C}$. Während man nämlich die Transformation der B^{I}_{rs} als eine Transformation eines *Tensors zweiten Ranges* auffassen kann, ergibt sich für die b_r die zugehörige *Vektortransformation*; aus dieser ergeben sich dann nach (17) für die B dieselben Transformationsgesetze, wie für die C. Die Gleichungen (16) bleiben bei dieser Vektortransformation invariant.

[1]) Der Rest des Beweises ergibt sich ohne besondere Rechnungen aus Resultaten der Darstellungstheorie der kontinuierlichen Gruppen.

Ganz entsprechend verläuft die Konstruktion für den Fall des Pauliverbots. An Stelle der b_r sind gewisse Matrizen a_r zu benutzen, für welche

$$\{a_r^\dagger, a_s\} = \delta_{rs}; \quad \{a_r, a_s\} = 0 \tag{16'}$$

gilt, wenn wir $XY + YX = \{X, Y\}$ schreiben. Aus ihnen bilden wir

$$\left.\begin{aligned} A^{\text{I}}_{sr} &= a_r^\dagger\, a_s, \\ A^{\text{II}}_{ss'rr'} &= a_r^\dagger\, a_{r'}^\dagger\, a_{s'}\, a_s, \\ A^{\text{III}}_{ss's''rr'r''} &= a_r^\dagger\, a_{r'}^\dagger\, a_{r''}^\dagger\, a_{s''}\, a_{s'}\, a_s, \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots \end{aligned}\right\} \tag{17'}$$

Die irreduziblen Bestandteile des Systems aller A liefern die im Paulischen Falle gebrauchten Systeme C. Denn die nach (17') konstruierten Matrizen A besitzen, wie eine Nachrechnung ergibt, dieselben Vertauschungsregeln, wie die Matrizen C.

Nach diesen Feststellungen ist es möglich, alle Matrizen $C^{\text{II}}, C^{\text{III}}, \ldots$ durch die Matrizen C^{I} auszudrücken. Doch fallen die diesbezüglichen Gleichungen — im Gegensatz zu den Vertauschungsregeln der C — für die verschiedenen Statistiken *verschieden* aus. Z. B. ergibt sich

$$C^{\text{II}}_{ss'rr'} = \pm C^{\text{I}}_{s'r}\, C^{\text{I}}_{sr'} \mp \delta_{s'r'}\, C^{\text{I}}_{sr}, \quad \left(\delta_{r's'} = \begin{cases} 1 \text{ für } r' = s' \\ 0 \text{ für } r' \neq s' \end{cases}\right), \tag{19}$$

wobei die *oberen* Vorzeichen für den Boseschen, die *unteren* für den Paulischen Fall gelten.

Außerdem folgt für den Paulischen Fall aus (16') die Gleichung

$$N_r^2 = N_r, \tag{20}$$

welche eben ausdrückt, daß in jeder „Zelle" nicht mehr als ein Teilchen vorhanden sein kann. Sie kann auch aus (19) abgeleitet werden auf Grund der Bemerkung, daß im Paulischen Fall $C^{\text{II}}_{ss'rr'}$ verschwindet, sobald $r = r'$ oder $s = s'$ wird.