

DER WAHRSCHEINLICHKEITSOPERATOR ϱ BEI VIELTEILCHENPROBLEMEN

Von

W. MACKE

INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK, TECHNISCHE UNIVERSITÄT, DRESDEN, DDR

Inhaltsverzeichnis: 1. Einleitung; 2. Die physikalische Fragestellung; 3. Der Wahrscheinlichkeitsoperator ϱ ; 4. Reduzierte Wahrscheinlichkeiten ϱ_B ; 5. Untersuchung des Zeitablaufs; 6. Störungsrechnung; 7. Näherungsmethoden; 8. Matrixdarstellung von ϱ und ϱ_B ; 9. Felddarstellung des Vielteilchenproblems.

1. Einleitung

Gegenstand dieser Untersuchung ist die Gesamtheit aller physikalischen Fragen hinsichtlich Systemen vom Typ

$$H = \sum_i t_i + \sum_{i < j} v_{ij} . \quad (1)$$

Für die durch derartige HAMILTONoperatoren charakterisierten nichtrelativistischen quantenmechanischen *Vielteilchenprobleme* existierten bereits 1930 alle Voraussetzungen zu deren Behandlung. Trotzdem erschienen in den nachfolgenden Jahren nur vereinzelte Untersuchungen, und erst seit etwa 1955 werden diese Probleme in grossem Umfang und mit wachsendem Erfolg angegriffen. Charakteristisch für diese neuere Entwicklung ist, dass viele Probleme mehrfach gelöst wurden mit scheinbar ganz verschiedenen Methoden, aber gleichen Ergebnissen. Um daher einen Überblick über die vorliegende Problematik und die bisherigen Erfolge zu gewinnen, ist es erforderlich, diese scheinbar so verschiedenen Methoden auf ihren gemeinsamen Ursprung zurückzuführen. Die genauere Untersuchung zeigt nun, dass viele Methoden lediglich durch die Verwendung unterschiedlicher und für jeden speziellen Zweck extra eingeführter charakteristischer Bestimmungsgrössen voneinander abweichen.

Hier soll nunmehr die *gesamte Problematik* so grundsätzlich wie nur irgend möglich angegriffen werden, weil es nur so möglich ist, zu den fundamentalsten charakteristischen Grössen vorzustossen, aus denen sich alle sonst verwendeten Bestimmungsgrössen dann als Spezialfälle ergeben. Ein solches Vorgehen führt automatisch zur Definition eines Wahrscheinlichkeitsoperators ϱ , aus dem die bekannten Dichtematrizen [1] [2] [3] als spezielle Darstellungen hervorgehen.

2. Die physikalische Fragestellung

Die *allgemeinste physikalische Frage*, die in der Theoretischen Physik an ein System gerichtet werden kann, ist folgendermassen formulierbar:

Eine Messung am System hat zur Zeit 0 die Information »A« ergeben. Welche Information »B« würde eine Messung zur Zeit t ergeben? (1)

Das betrachtete physikalische System wird durch seinen HAMILTONoperator H charakterisiert. Eine durch Messung gewonnene Information besteht in der Angabe der gemessenen Grössen, der erzielten Messergebnisse und einer Angabe über den »Wert« der betreffenden Information. Zur Beantwortung der Frage (1) sind folgende Einzelprobleme zu lösen:

1. Analyse der Anfangsinformation »A«,
2. Beschreibung des Zeitablaufs,
3. Analyse der zur Fragestellung »B« gehörigen Information.

Im Rahmen der Quantentheorie gehören zu einer *Information* »A«, »B«, ... folgende Angaben: Es müssen die zu einer Information gehörigen, gleichzeitig und unabhängig voneinander messbaren Grössen als untereinander vertauschbare HILBERToperatoren

$$A_1, \dots, A_F \rightarrow A \quad B_1, \dots, B_f \rightarrow B \quad f \leq F \quad (2)$$

bekannt sein. Übersichtshalber werden Indizes, wo immer möglich, fortgelassen. F ist die Zahl der Freiheitsgrade des betrachteten Systems, und im allgemeinen gilt $[A, B]_- \neq 0$. Ferner gehört zur Information die Angabe der erzielten Messergebnisse, die bei optimaler Messgenauigkeit übereinstimmt mit der Angabe der Messwerte

$$a_1, \dots, a_F \rightarrow a \quad b_1, \dots, b_f \rightarrow b, \quad (3)$$

also der Eigenwerte der Operatoren (2). Sie charakterisieren die zum Messergebnis gehörigen Eigenzustände des Systems, die HILBERTvektoren Φ_a bzw. Φ_b . Liegen nur ungefähre Messergebnisse vor, so kann der Zustand nicht eindeutig bestimmt, sondern lediglich eine Wahrscheinlichkeit w_x für das Vorhandensein eines Zustands Φ_x angegeben werden, hier also die Gesamtheit aller w_a bzw. w_b . Dieser Kenntnis äquivalent ist ein Ensemble von M gleichartigen (numerierbaren) Systemen, von denen sich M_x in Zuständen Φ_x befinden. Dann ist $w_x = M_x/M$.

Der Wert »J« einer solchen *Information* ist natürlich am grössten bei genauer Kenntnis des Zustands Φ_x und am kleinsten, wenn alle w_x gleichgros

sind. Als Mass für den Unwert (Unkenntnis) kann angesehen werden: die Zahl der Gesamtzustände des Ensembles der nummerierten Einzelsysteme, die zur gleichen Verteilung » M_x « gehören (bei vollständiger Kenntnis nur ein einziger!). Diese Zahl stimmt überein mit den möglichen Umnumerierungen der Systeme, die deren Einzelzustände verändert, aber die Gesamtverteilung » M_x « unverändert lässt. Diese Zahl ist bekanntlich

$$R = \frac{M!}{\prod_x M_x!} \rightarrow \left(\prod_x \frac{1}{w_x^{w_x}} \right)^M \text{ für } M \rightarrow \infty. \quad (4)$$

Somit ist R^{-1} ein Mass für den Informationswert. Das gleiche gilt für eine monotone Funktion von R^{-1} , die so gewählt wird, dass der Informationswert zweier Systeme sich addiert:

$$\bar{I} \equiv \frac{1}{M} \ln R^{-1} = \sum_x w_x \ln w_x = -S \leq 0. \quad (5)$$

Diese im Bereich $-\infty \dots 0$ variierende Funktion stimmt bis auf einen unwesentlichen Dimensionsfaktor k mit der negativen Entropie überein.

Weiterhin sind *Besonderheiten* zu *beachten*, die im Zusammenhang mit Fragen vom Typ (1) auftreten können. So wird das Problem (2.1) zeitunabhängig, wenn eine der drei Bedingungen

$$t = 0, \quad [H, A]_- = 0, \quad [H, B]_- = 0 \quad (6)$$

erfüllt ist. Eine gewisse, wenngleich unwesentliche Komplikation tritt auf, wenn der HAMILTONoperator, wie in der Störungstheorie oftmals üblich, zeitabhängig ist:

$$\frac{\partial H}{\partial t} \neq 0, \quad \text{etwa } H_t = H^0 + g_t V, \quad (7)$$

weil dann die H_t für verschiedene t wegen

$$[H_1, H_2]_- = (g_1 - g_2) [V, H^0]_- \neq 0 \quad (8)$$

nicht mehr miteinander vertauschbar sind. Gewisse Vereinfachungen treten auf, wenn in (2) $f < F$ ist, weil dann die gesuchte Information von vornherein von einfacherer Art ist. Dieser Fall wird in Kapitel 4 besprochen.

Nach den im Anschluss an (1) gemachten Ausführungen ist zunächst die *Analyse der Anfangszustände* durchzuführen. Bei vollständiger Kenntnis

des Messergebnisses a besteht sie in der Angabe des zugehörigen Zustands Φ_a , der sich aus dem Eigenwertproblem

$$A\Phi_a = \Phi_a a \quad (9)$$

berechnet. Bei ungenauer Messung müssen alle in Frage kommenden Φ_a mit den aus der Messung folgenden Wahrscheinlichkeiten w_a bestimmt werden. Ist nur ein Teil der Grössen A_i von (2) gemessen worden, so müssen die w_a durch geeignete Annahmen bestimmt werden, wie minimale Willkür, minimaler Informationswert, Gleichverteilung, maximal chaotische Verteilung, etc. . .

In der SCHRÖDINGERdarstellung besteht der Zeitablauf darin, dass alle Anfangszustände Φ_a übergehen in

$$\Phi_a \rightarrow \Psi_a = {}^t\Pi^0 e^{-i(\hbar)H_t dt'} \Phi_a \equiv U(t) \Phi_a. \quad (10)$$

Im besonderen Falle zeitunabhängiger HAMILTONoperatoren vereinfacht sich (10) zu

$$\frac{\partial H}{\partial t} = 0: {}^t\Pi^0 e^{-\frac{i}{\hbar}Hdt'} \rightarrow e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t H \cdot t'} = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}. \quad (11)$$

Diese vereinfachte Zeitabhängigkeit wird im folgenden verwendet. Treffen dagegen die Voraussetzungen (7) zu, so sind in allen nachfolgenden Formeln lediglich die Exponentialfaktoren durch die unendlichen Produkte von (11) zu ersetzen.

Die dritte Aufgabe besteht in der *Analyse der gefragten Information* »B«. Die zugehörigen möglichen Messwerte folgen aus der Eigenwertgleichung

$$B\Phi_b = \Phi_b b. \quad (12)$$

Im Falle $f < F$ müssen die B_i von (2) evtl. noch ergänzt werden durch Aufsuchen von Operatoren

$$C_{f+1}, \dots, C_F \rightarrow C \quad c_{f+1}, \dots, c_F \rightarrow c, \quad (13)$$

die untereinander sowie mit den B_i vertauschbar sind und mit ihnen zusammen ein vollständiges System observabler Grössen bilden. Da die Grössen B und C als gleichzeitig und unabhängig voneinander messbar angesehen werden, bilden ihre Eigenzustände einen Produktraum

$$\Phi_{bc} = \Phi_b \Phi_c = \Phi_c \Phi_b \quad (14)$$

mit den Faktorräumen der Φ_b und der Φ_c .

Die *Antwort auf die Frage* (1) wird nunmehr durch Angabe der Wahrscheinlichkeiten w_b für die Messergebnisse b gegeben. Nach elementaren Regeln der Wahrscheinlichkeitstheorie gelten die Beziehungen

$$w_b = \sum_c w_{bc} \quad w_{bc} = \sum_a w_{bc,a} w_a, \quad (15)$$

während die hierin auftretenden Übergangswahrscheinlichkeiten in der Quantentheorie durch

$$w_{bc,a} = |(\Phi_{bc}, \Psi_a)|^2 = (\Phi_{bc}, \Psi_a) (\Psi_a, \Phi_{bc}) \quad (16)$$

bestimmt werden. Gleichzeitig mit den w_b aus (15) können die zu den B gehörigen Erwartungswerte in der Form

$$\bar{B} = \sum_b b w_b = \sum_{bc} b w_{bc} \quad (17)$$

als bei vielen gleichartigen Messungen beobachtete statistische Mittelwerte bestimmt werden.

3. Der Wahrscheinlichkeitsoperator ϱ

Die in (2.15 und 16) auftretenden Wahrscheinlichkeiten können als Erwartungswerte von Operatoren dargestellt werden. Bei *vollständiger Information* » a « ist die Wahrscheinlichkeit, zur Zeit t die Information » b, c « zu erhalten, nach (2.16):

$$w_{bc,a} = (\Phi_{bc}, \varrho_a \Phi_{bc}) \quad \text{mit} \quad \varrho_a = \Psi_a) (\Psi_a. \quad (1)$$

ϱ_a wird allgemein als Wahrscheinlichkeitsoperator bezeichnet und bedeutet hier den zu Ψ_a gehörigen Projektionsoperator mit den Eigenwerten

$$\varrho_a \rightarrow 0, 1 \quad \varrho_a^2 = \varrho_a, \quad (2)$$

denen zufolge die daneben stehende charakteristische Gleichung gilt.

Die zur *unvollständigen Anfangsinformation* » A « gehörige *Wahrscheinlichkeit*, bei t die Information » b, c « zu erhalten, ist

$$w_{bc} = (\Phi_{bc}, \varrho \Phi_{bc}) \quad \text{mit} \quad \varrho = \sum_a \varrho_a w_a. \quad (3)$$

Für den hier auftretenden allgemeineren Wahrscheinlichkeitsoperator gilt

$$\varrho = \sum_a \Psi_a) w_a (\Psi_a = \sum_a e^{-(i/\hbar)Ht} \Phi_a) w_a (\Phi_a e^{(i/\hbar)Ht}. \quad (4)$$

Er besitzt offenbar die Eigenschaften

$$\varrho \Psi_a = \Psi_a w_a, \quad \text{daher} \quad \Pi_a(\varrho - w_a) = 0. \quad (5)$$

Diese Gleichungen lassen seine Bedeutung unmittelbar erkennen: Seine Eigenvektoren sind die zur Information » A « gehörigen Vektoren Ψ_a und seine Eigenwerte die zur gleichen Information gehörigen Wahrscheinlichkeiten w_a .

Die Ausdrücke (1) und (4) lassen erkennen, dass die *Wahrscheinlichkeitsoperatoren* ϱ_a und ϱ hermitisch, normiert und positiv definit sind:

$$\varrho^\dagger = \varrho \quad \text{Tr} \varrho = 1 \quad 0 \leq \bar{\varrho} \leq 1. \quad (6)$$

Die mit $\text{Tr} \varrho$ bezeichnete Spur ist bekanntlich gleich der Summe der Eigenwerte, so dass die Normierung aus $\sum_a w_a = 1$ folgt. Die letzte Gleichung (6) folgt aus der Wahrscheinlichkeitsbedeutung aller Erwartungswerte. Für den Zeitablauf des Wahrscheinlichkeitsoperators kann die Beziehung

$$\dot{\varrho}(t) + \frac{i}{\hbar} [H, \varrho(t)]_- = 0 \quad \varrho(0) = \text{»}A\text{«} \quad (7)$$

aus (4) entnommen werden. Da $\varrho(0)$ durch die Anfangsinformation » A « vollständig bestimmt ist, was durch die zweite Gleichung (7) symbolisch ausgedrückt werden soll, und die erste Gleichung von erster Ordnung hinsichtlich t ist, wird $\varrho(t)$ durch die Gleichungen (7) vollständig bestimmt.

Erwartungswerte von der Art (2.17) können in der Form

$$\bar{B} = \sum_{bc} (\Phi_{bc}, \varrho B \Phi_{bc}) = \text{Tr} \varrho B = \text{Tr} B \varrho \quad (8)$$

durch Spurbildungen mit ϱ dargestellt werden. Innerhalb einer Spur über zwei Operatoren ist deren Reihenfolge bekanntlich beliebig.

Der in (2.5) eingeführte *Informationswert* kann durch den Operator $\ln \varrho$ dargestellt werden, denn sein Erwartungswert (8) stimmt entsprechend

$$\bar{I} = \text{Tr} \varrho \ln \varrho = \sum_a w_a \ln w_a \quad (9)$$

mit (2.5) überein. Man beachte, dass bei vollständiger Information

$$\bar{I}_a = \text{Tr} \varrho_a \ln \varrho_a = 0 \quad (10)$$

gilt. Für die Zeitableitungen der Erwartungswerte (8) und (9) gilt

$$\begin{aligned} \dot{\bar{B}} &= \text{Tr} B \dot{\varrho} = \frac{i}{\hbar} \text{Tr} B [\varrho, H]_- = \frac{i}{\hbar} \text{Tr} [H, B]_- \varrho \\ \dot{\bar{I}} &= \frac{i}{\hbar} \text{Tr} [\varrho \ln \varrho, H]_- = 0. \end{aligned} \quad (11)$$

Die erste Gleichung lässt erkennen, dass das Ergebnis das gleiche ist, welches man auch bei HEISENBERGDarstellung der Operatoren zu erwarten hätte. Die Zeitunabhängigkeit des mittleren Informationswerts folgt bereits daraus, dass der Zeitablauf durch eine unitäre Transformation beschrieben wird und die Spurbildung invariant gegen unitäre Transformationen ist.

Zusammenfassend ist festzustellen, dass durch die Einführung von Wahrscheinlichkeitsoperatoren ϱ die zu (2.1) gehörige *Problematik* folgendermassen *aufgeteilt* wird: In $\varrho(t)$ ist die Anfangsinformation und der Zeitablauf enthalten, während die spezielle zur Information » B, C « gehörige Fragestellung durch Bildung geeigneter Erwartungswerte berücksichtigt wird.

4. Reduzierte Wahrscheinlichkeiten ϱ_B

Wir berücksichtigen nunmehr den zu (2.12 und 13) gehörigen Fall $f < F$, in dem die Endinformation aus einem »interessierenden« Anteil B und einem »nicht interessierenden« Anteil C besteht. Dementsprechend enthält auch die Anfangsinformation » A « und der aus ihr konstruierte, in diesem Kapitel mit $\varrho \equiv \varrho_{BC}$ bezeichnete Wahrscheinlichkeitsoperator Anteile, die für die Information B wesentlich sind, und solche, die es nicht sind. Die zur Information B gehörigen Wahrscheinlichkeiten (2.15) können als Erwartungswerte im Faktorraum der Φ_b allein dargestellt werden

$$w_B = (\Phi_b, \varrho_B \Phi_b), \tag{1}$$

während der hier definierte Operator ϱ_B der *reduzierten Wahrscheinlichkeit* entsprechend (2.15) gemäss

$$\varrho_B = \Sigma_c(\Phi_c, \varrho_{BC} \Phi_c) = Tr_C \varrho_{BC} \tag{2}$$

durch Spurbildung im Faktorraum der Φ_c aus ϱ_{BC} hervorgeht. Dieser Operator ist, je nach der speziellen Fragestellung » B «, oftmals entscheidend einfacher. Auch können entsprechende Erwartungswerte wegen

$$\bar{B} = Tr_B \varrho \equiv Tr_B Tr_C B \varrho_{BC} = Tr_B B Tr_C \varrho_{BC} = Tr_B B \varrho_B \tag{3}$$

als Spuren über ϱ_B allein dargestellt werden.

Für den *Zeitablauf* allerdings folgt aus (2) und (3.7)

$$\dot{\varrho}_B = Tr_C \dot{\varrho}_{BC} = \frac{i}{\hbar} Tr_C [\varrho_{BC}, H]_{-}. \tag{4}$$

Den HAMILTONOPERATOR des Systems denken wir uns gemäss

$$H = H_B + H_C + H_{BC} \tag{5}$$

zerlegt in Anteile, die nur von B bzw. C allein abhängen, und einen gemischten Anteil. H_B kann wegen Unabhängigkeit von C aus der Spurbildung (4) herausgezogen werden. Die Vertauschung mit H_C verschwindet unter der Spur, wie im Zusammenhang mit (3.8) erwähnt wurde. Daher geht (4) in

$$\dot{\varrho}_B + \frac{i}{\hbar} [H_B, \varrho_B]_- = \frac{i}{\hbar} \text{Tr}_C [\varrho_{BC}, H_{BC}]_- \quad (6)$$

über. Der Zeitablauf von ϱ_B wird also durch den C -Anteil der Information mitbestimmt, wie anschaulich erwartet werden muss. Die zu ϱ_B gehörige reduzierte Information $J_B = \ln \varrho_B$ wird im Zeitablauf ebenfalls vom C -Anteil her beeinflusst; denn es gilt

$$\dot{I}_B = (i/\hbar) \text{Tr}_B \ln \varrho_B \text{Tr}_C [\varrho_{BC}, H_{BC}]_- \quad (7)$$

für die zeitliche Änderung ihres Erwartungswerts.

Enthält der HAMILTONoperator keinen gemischten Anteil H_{BC} , so werden die Teilinformationen B und C unabhängig. Die rechte Seite von (6) verschwindet, und für den hier nicht betrachteten Informationsanteil $\varrho_C = \text{Tr}_B \varrho_{BC}$ lässt sich eine entsprechende, von ϱ_{BC} unabhängige Gleichung mit H_C statt H_B angeben. Der Operator der gesamten hier unkorrelierten Wahrscheinlichkeit kann als Produkt

$$\varrho_{BC} = \varrho_B \varrho_C \quad (8)$$

angesetzt werden. Auch in Fällen $H_{BC} \neq 0$ wird (8) oftmals als Näherungsansatz verwendet, der einer Vernachlässigung der Korrelation entspricht. In diesem Falle geht (6) in

$$\dot{\varrho}_B + \frac{i}{\hbar} [H_B + H_{B\bar{C}}, \varrho_B] = 0 \text{ mit } H_{B\bar{C}} = \text{Tr}_C H_{BC} \varrho_C \quad (9)$$

über. $H_{B\bar{C}}$ bedeutet hier den über die Teilinformation C gemittelten Anteil der Wechselwirkungsenergie. Die durch (8) und (9) beschriebene Näherung entspricht im klassischen Falle der VLASOV-gleichung [4] und im quantenmechanischen Fall dem HARTREE-FOCKSchen Näherungsverfahren [5]. Ausserdem verschwindet bei Vernachlässigung der Korrelation im Sinne von (8) die rechte Seite von (7), und auch die Teilinformation B bleibt näherungsweise zeitunabhängig.

Bei Anwendung dieser Betrachtungen auf Vielteilchenprobleme mit HAMILTONoperatoren vom Typ (1.1) besitzen alle physikalisch interessierenden Grössen entsprechend

$$B = \sum_i B_i + \sum_{i < j} B_{ij} \quad (10)$$

Teilchen- und Paareigenschaften. Dementsprechend sind unter der Information »B« die Eigenschaften »1« bzw. »1,2« von einem bzw. von zwei Teilchen zu verstehen:

$$\begin{aligned} B = 1 & & C = 2, \dots, N \\ B = 1,2 & & C = 3, \dots, N, \end{aligned} \tag{11}$$

während »C« die übrigen, jeweils nicht interessierenden Teilchen enthält. In diesem Sinne kann eine Hierarchie reduzierter Wahrscheinlichkeitsoperatoren

$$\varrho_B = \varrho_1, \varrho_{12}, \varrho_{123}, \dots \tag{12}$$

aufgestellt werden, deren Zeitableitungen (6) ein gekoppeltes Gleichungssystem, die sogenannte BBGKY-Hierarchie [6], bilden, während die Erwartungswerte von (10) nur ϱ_1 und ϱ_{12} enthalten:

$$\Sigma_i 1 = N \quad \Sigma_{i < j} 1 = \binom{N}{2} \tag{13}$$

Die hier auftretenden binomischen Faktoren folgen aus den Summationen von (10) und bedeuten gemäss (13) die Teilchen- bzw. Paarzahl.

5. Untersuchung des Zeitablaufs

Wenn H in den zur Information A gehörigen Messgrössen A_i enthalten ist, so treffen die Vereinfachungen von (2.6) zu, und der *Wahrscheinlichkeitsoperator* wird *zeitunabhängig*:

$$\dot{\varrho} = 0 \quad [H, \varrho]_- = 0. \tag{1}$$

Bei maximalem Wert der Information A besteht hier die Aufgabe in der Berechnung der Eigenwerte von H und den A_i , siehe auch (11 bis 13). Daneben kommen Lösungen von (1) mit geringerem Informationswert in Betracht. Die allgemeinste Lösung von (1) ist eine willkürliche Fuktion

$$\varrho = f(H, A_1, A_2, \dots) \quad [H, A_i]_- = 0 \tag{2}$$

von H und den mit H und untereinander vertauschbaren Grössen. Liegt nur über H allein eine Anfangsinformation vor, so kommt als Lösung auch nur $\varrho = f(H)$ in Betracht, und es können alle Aussagen der Thermodynamik gewonnen werden. Spezialfälle sind die kanonische und die grosskanonische

Gesamtheit (letztere, wenn neben H auch die Teilchenzahl N in der Anfangsinformation enthalten ist):

$$\varrho = e^{\beta(F-H)} \quad \varrho = e^{\beta(J-H-\zeta N)}. \quad (3)$$

β , F bzw. J , ζ sind Parameter zur Festlegung der Normierung sowie der mittleren Energie und Teilchenzahl.

Wenn H in den zur Anfangsinformation \mathcal{A} gehörigen Größen nicht enthalten ist, so ist $\dot{\varrho} \neq 0$, und der *Zeitablauf* wird durch (3.7) beschrieben. Eine gewisse *Vereinfachung* dieser Gleichung, die für viele Zwecke nützlich ist, erhalten wir durch den Ansatz

$$\varrho(t) = K(t, t) \quad \text{mit} \quad K^\dagger(t', t'') = K(t'', t') \quad (4)$$

mit einem Operator K , der die Gleichungen

$$\left(\frac{\partial}{\partial t'} + \frac{i}{\hbar} H \right) K(t', t'') = 0 = K(t', t'') \left(\frac{\partial}{\partial t''} - \frac{i}{\hbar} H \right) \quad (5)$$

erfüllt. Jeweils eine dieser beiden Gleichungen kann durch die Hermitizitätsforderung (4) ersetzt werden. Analog zu (3.4) ist

$$K(t', t'') = e^{-\frac{i}{\hbar} H t'} \varrho(0) e^{\frac{i}{\hbar} H t''} \quad (6)$$

die formale Lösung der Gleichungen (4) und (5).

Eine andere Möglichkeit besteht darin, ϱ entsprechend

$$\varrho(t) = i\hbar G(t + 0, t - 0) \quad G^\dagger(t', t'') = G(t'', t') \quad (7)$$

durch einen Operator $i\hbar G$ zu beschreiben, der die *inhomogenen Gleichungen*

$$\left(\frac{\partial}{\partial t'} + \frac{i}{\hbar} H \right) i\hbar G(t', t'') = \delta(t' - t'') = i\hbar G(t', t'') \left(-\frac{\partial}{\partial t''} + \frac{i}{\hbar} H \right) \quad (8)$$

erfüllt. Der in der Definition (7) hinzugefügte Faktor $i\hbar$ vereinfacht die Hermitizitäts- und Normierungseigenschaften von G . Eine mögliche Lösung von (7) und (8), die für $t' > t''$ mit (6) übereinstimmt, also die Bedingung

$$\theta(t' - t'') (i\hbar G(t', t'') - K(t', t'')) = 0 \quad (9)$$

erfüllt, ist

$$i\hbar G(t', t'') = K(t', t'') - \theta(t'' - t') e^{-\frac{i}{\hbar} H(t' - t'')} \quad (10)$$

(man beachte beim Einsetzen von (10) in (8), dass für die Stufenfunktion $\dot{\vartheta} = \delta$ gilt). Derartige Lösungen inhomogener Gleichungen sind oftmals leichter zu handhaben als die von homogenen Gleichungen. Ein Beispiel hierfür ist die Behandlung stationärer Probleme mit $\dot{\vartheta} = 0$ durch die zeitabhängige Theorie. Eine Lösung dieser Art von (8) erhalten wir durch formale Auflösung

$$G(t', t'') = G(t' - t'') = \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t'} - H \right)^{-1} \delta(t' - t'') \quad (11)$$

und FOURIER-darstellung der δ -Funktion

$$G(t', t'') = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi\hbar} \frac{e^{-(i/\hbar)\varepsilon(t'-t'')}}{\varepsilon - H}. \quad (12)$$

Die FOURIERtransformierte von G ist die von HUGENHOLTZ [7] untersuchte Resolvente

$$R(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - H} = \sum_n \frac{\Phi_n(\Phi_n)}{\varepsilon - E_n} \quad (13)$$

des Operators H , der zusammen mit den Projektionsoperatoren $P_n = \Phi_n(\Phi_n)$ durch seine Eigenwerte E_n dargestellt werden kann.

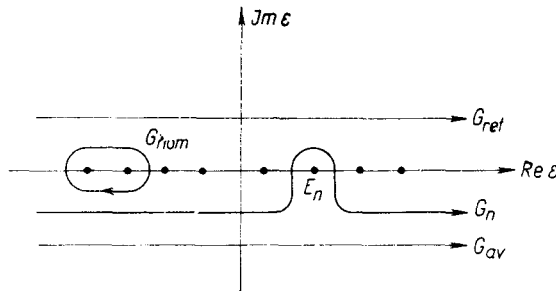


Abb. 1

Die beim Auflösen (11) der Differentialgleichung (8) entstehende Unbestimmtheit entspricht dem Hinzufügen willkürlicher Lösungen der zugehörigen homogenen Gleichung. Über deren Wahl jedoch verfügen wir eindeutig, indem wir in (12) die *Integration* über ε in einer komplexen Ebene durchführen und den genauen Weg angeben, siehe Abbildung.

Die Singularitäten des Integranden liegen auf der reellen Achse an den Orten $\varepsilon = E_n$ der Energieeigenwerte. Führen wir die Integration (12) oberhalb der reellen Achse durch, so entsteht die zu $\theta(t', t'')$ proportionale, retardierte Lösung G_{ret} . Bei einem Integrationsweg unterhalb der reellen Achse ents-

steht die zu $\theta(t'', t')$ proportionale avancierte Lösung G_{av} . Ein Integrationsweg, der nur bei einer einzigen Singularität E_n oberhalb, bei allen übrigen aber unterhalb verläuft, entspricht einer inhomogenen Lösung G_n , die nur hinsichtlich des Zustands Φ_n retardiert ist. Sie entspricht einem Anfangszustand Φ_n des Systems. Bei geringerem Informationswert, wenn also die Zustände Φ_n mit Wahrscheinlichkeiten w_n besetzt sind, wird ein Integrationsweg benötigt, der sich bei jeder Singularität aufspaltet in einen Teilweg oben herum mit dem Gewicht w_n und einen Anteil unten herum mit dem Anteil $1 - w_n$. G-Funktionen mit geschlossenen Integrationswegen, die bestimmte Singularitäten umfassen, lassen sich als Differenz zweier Lösungen der inhomogenen Gleichung auffassen und sind daher homogene Lösungen G_{hom} .

6. Störungsrechnung

Besteht der HAMILTONoperator $H = H^0 + V$ wie in (2.7) aus zwei Anteilen und sind alle zu H^0 allein gehörigen Aussagen vom Typ (2.1) bekannt, so kann das Problem im Rahmen einer Störungstheorie untersucht werden (*Potenzentwicklung nach V*). Die Erfahrung hat gezeigt, dass die zeitabhängige Form der Störungstheorie der zeitunabhängigen auch in den Fällen (2.6) überlegen ist, in denen sie nicht unbedingt notwendig wäre (der formale Grund besteht letzten Endes darin, dass sich mit Exponentialfunktionen leichter rechnen lässt als mit Partialbrüchen).

Eine störungstheoretische Behandlung kann die *inhomogene Gleichung* (5.8) als Ausgangspunkt wählen und neben G einen zu H^0 gehörigen Operator G_0 einführen. Zwischen beiden gilt dann die Integralgleichung

$$G(t, t') = G_0(t, t') + \int_{-\infty}^{+\infty} dt'' G_0(t, t'') V(t'') G(t'', t'). \quad (1)$$

Ihre Richtigkeit wird durch Differenzieren und Vergleich mit (5.8) und der dazugehörigen ungestörten Gleichung gezeigt. Diese Integralgleichung kann durch eine Potenzreihe gelöst werden, die man dadurch erhält, dass man G auf der rechten Seite von (1) durch den Wert ersetzt, der aus der Gleichung (1) selbst folgt und dieses Verfahren sukzessiv fortsetzt.

Andere Wege der störungstheoretischen Behandlung beginnen damit, alle Operatoren entsprechend

$$Sp \rho A = Sp \tilde{A} \tilde{\rho}, \quad \tilde{A} = e^{(i/\hbar)H^0 t} A e^{-(i/\hbar)H^0 t}, \quad \tilde{\rho} = e^{(i/\hbar)H^0 t} \rho e^{-(i/\hbar)H^0 t} \quad (2)$$

von der SCHRÖDINGERdarstellung in die *Wechselwirkungsdarstellung* zu überführen. Sie besitzen dann die durch

$$\tilde{\dot{A}} = \frac{i}{\hbar} [H^0, \tilde{A}]_- \quad \tilde{\dot{\rho}} + \frac{i}{\hbar} [\tilde{V}, \tilde{\rho}]_- = 0 \quad (3)$$

charakterisierten Zeitabhängigkeiten. Für den in (5.4) eingeführten K -Operator entstehen die Beziehungen

$$\begin{aligned} \tilde{\varrho}(t) &= \tilde{K}(t, t) & \tilde{K}^\dagger(t', t'') &= \tilde{K}(t'', t') \\ \left(\frac{\partial}{\partial t'} + \frac{i}{\hbar} \tilde{V}' \right) \tilde{K}(t', t'') &= 0 = \tilde{K}(t', t'') \left(\frac{\partial}{\partial t''} - \frac{i}{\hbar} \tilde{V}'' \right) & (4) \\ \tilde{K}(t', t'') &= {}'II^0 e^{-(i/\hbar)\tilde{V}(t)dt} \varrho_0 {}^0III' e^{(i/\hbar)\tilde{V}(t)dt} = S(t') \varrho_0 S^\dagger(t''). \end{aligned}$$

Die letzte Zeile lässt den Zusammenhang mit der bekannten S -Matrix erkennen.

7. Näherungsmethoden

Die zur Lösung des Problemkreises verwendeten Näherungsmethoden sind sehr vielseitig. Sie können hier nur in grossen Zügen dargelegt werden. Eine der Hauptaufgaben besteht darin, die Gleichung (4.6) für den reduzierten Operator ϱ_B durch eine von ϱ_{BC} unabhängige Näherungsgleichung zu ersetzen. Hinsichtlich der im Zusammenhang mit (4.12) erwähnten BBGKY-Hierarchie bedeutet dies, die Gleichungshierarchie bei irgendeinem gewünschten $\varrho_{12 \dots n}$ abzubrechen. Die einfachste Näherung besteht, wie in (4.8 und 9) bereits ausgeführt wurde, in der Vernachlässigung der Korrelation.

Bei stationären Problemen kann die Extremaleigenschaft der Energie, oder bei geringerem Informationswert der freien Energie, zu einem *Variationsverfahren* ausgebaut werden. Bei der Variation über ϱ müssen dann allerdings die Eigenschaften (3.6) dieses Operators im Ansatz oder durch geeignete Nebenbedingungen erfüllt werden.

Die aus der *Störungstheorie* entspringenden Möglichkeiten für Näherungsverfahren bestehen im Abbrechen der Potenzreihen [8] sowie in der Durchführung von Teilsummationen über einzelne Glieder der Potenzreihen [9]. Schliesslich bleiben noch solche Näherungsmethoden zu erwähnen, die im Rahmen der Operatordarstellung nicht unmittelbar dargestellt werden können, sondern auf die zu den Operatoren ϱ und ϱ_B gehörigen Matrixdarstellungen aufbauen.

8. Matrixdarstellung von ϱ und ϱ_B

Eine *Matrixdarstellung* der Theorie entsteht durch beiderseitige Projektion aller Operatoren auf die als vollständig, normiert und orthogonal vorausgesetzten Vektoren Φ_x eines Systems von Zuständen x . Insbesondere der Wahrscheinlichkeitsoperator ϱ geht hierbei in die üblicherweise als Dichtematrix bezeichnete Grösse

$$\varrho(x, x') = (\Phi_x, \varrho \Phi_{x'}) \quad \text{mit} \quad (\Phi_x, \Phi_{x'}) = \delta_{xx'} \quad (1)$$

über. Alle Gleichungen der bisherigen Theorie bleiben formal gültig als Matrixgleichungen für die entsprechenden Matrixelemente.

Von hier aus erhalten wir durch FOURIERtransformation der Differenzkoordinaten die sogenannte WIGNER-darstellung der Dichtematrix[10]

$$\varrho\{p, x\} = \int \frac{dx'}{(2\pi\hbar)^F} e^{\frac{i}{\hbar} px'} \varrho\left(x - \frac{x'}{2}, x + \frac{x'}{2}\right). \quad (2)$$

Damit entsteht eine der klassischen Statistik sehr ähnliche Form der Theorie [11]; denn für viele Erwartungswerte gilt

$$\bar{A} = \iint dx dp A\{p, x\} \varrho\{p, x\} \quad \text{mit} \quad \iint dx dp \varrho\{p, x\} = 1. \quad (3)$$

Die Gleichung für den Zeitablauf jedoch ist komplizierter:

$$\dot{\varrho}\{p, x\} = -\frac{2}{\hbar} \sin\left[\frac{\hbar}{2} \left(\frac{\partial}{\partial p} \frac{\partial}{\partial x'} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial p'}\right)\right] H\{p, x\} \varrho\{p, x\} \Big|_{p'=p, x'=x}. \quad (4)$$

Sie stimmt nur in erster Ordnung von \hbar mit der klassischen, LIOUVILLE-schen Gleichung überein. Ausserdem ist zu erwähnen, dass die Lösungen von (2) bzw. (4) in der Regel nicht positiv definit sind, weswegen auch $\varrho(p, x)dx dp$ nicht die einfache Bedeutung der klassischen Statistik haben kann, nämlich die Wahrscheinlichkeit dafür anzugeben, dass das System gewisse Ortseigenschaften x und Impulseigenschaften p besitzt.

Nunmehr betrachten wir den Spezialfall von physikalischen Systemen, bei denen alle Vektoren Φ_x sich mittels irgendwelcher Operatoren a_x^\dagger entsprechend

$$\Phi_x = a_x^\dagger \Phi_0 \quad \text{mit} \quad a_x \Phi_0 = 0 \quad H\Phi_0 = 0 \quad (5)$$

durch einen einzigen normierten Hilbertvektor Φ_0 mit den Eigenschaften (5) darstellen lassen. Φ_0 wird dann als »Vakuum«-Vektor bezeichnet. Die letzte der Eigenschaften (5) kann durch Umnormierung des Hamiltonoperators H (Hinzufügen einer geeigneten Konstante) erreicht werden. Damit die Zustände (5) ein normiertes Orthogonalsystem bilden, müssen die Operatoren a_x die Eigenschaften

$$(\Phi_x, \Phi_{x'}) = (\Phi_0, a_x a_{x'}^\dagger \Phi_0) = \delta_{xx'} \quad (6)$$

besitzen. Etwas weiter als (6) geht die Forderung

$$(a_x a_{x'}^\dagger - \delta_{xx'}) \Phi_0 = 0 \quad (7)$$

an die Operatoren a_x . Sie hat zum Beispiel die Gültigkeit der Gleichungen

$$P_0 a_x \Psi_a(t') = a_x \Psi_a(t') \quad H a_x \Psi(t') = 0 \quad (8)$$

mit $P_0 = \Phi_0)(\Phi_0$ als dem Projektionsoperator des Vakuums zur Folge, wenn $\Psi_a(t')$ irgendein durch Linearkombinationen der Φ_x aufgebauter Vektor

$$\Psi_a(t') = \int dx \Phi_x f(x, t') = \int dx a_x^\dagger \Phi_0 f(x, t') \quad (9)$$

ist. Der Beweis erfolgt durch Einsetzen von (9) in (8), Verwendung von (7) und Beachtung von (5).

Bei Systemen mit den Eigenschaften (5) und (7) können die *Matrixelemente des K-Operators* von (5.4) in eine übersichtliche Form gebracht werden. Zunächst gilt infolge (5.6) und analog zu (1)

$$\begin{aligned} K(x't', x''t'') &= \Sigma_a(\Phi_x, \Psi_a(t')) w_a(\Psi_a(t''), \Phi_x) = \\ &= \Sigma_a w_a(\Phi_a, e^{(i/\hbar)Ht''} a_x^\dagger \Phi_0) (\Phi_0 a_x e^{-(i/\hbar)Ht'} \Phi_a). \end{aligned} \quad (10)$$

Wegen (8) kann im Innern dieses Ausdrucks ohne Fehler

$$\Phi_0) (\Phi_0 \rightarrow 1 \rightarrow e^{-(i/\hbar)H(t''-t')} \quad (11)$$

ersetzt werden. Bezeichnen wir Erwartungswerte eines Operators O über ein Ensemble von Systemen mit

$$\ll O \gg = \Sigma_a w_a(\Phi_a O \Phi_a) \quad (12)$$

und führen mit

$$a(x, t) = e^{(i/\hbar)Ht} a_x e^{-(i/\hbar)Ht} \quad a^\dagger(x, t) = e^{(i/\hbar)Ht} a_x^\dagger e^{-(i/\hbar)Ht} \quad (13)$$

die HEISENBERGDARSTELLUNG der Operatoren a_x ein, so erhält (10) die übersichtliche Form

$$\begin{aligned} K(x't', x''t'') &= \ll a^\dagger(x'', t'') a(x't') \gg \\ \varrho(x', x'', t) &= \ll a^\dagger(x'', t) a(x', t) \gg. \end{aligned} \quad (14)$$

In der zweiten Zeile stehen die aus K mit $t' = t'' = t$ hervorgehenden Matrixelemente von ϱ . Bei vielen Untersuchungsmethoden werden Matrixdarstellungen in der Form (14) benutzt. In anderen Methoden aber werden diese Matrizen durch solche ersetzt, die inhomogenen Gleichungen genügen und nur für $t' > t''$ mit den Grössen (14) übereinstimmen. Dann entstehen die bekannten Greenschen Funktionen.

9. Felddarstellung des Vielteilchenproblems

Ein besonderer Fall, auf den die besprochenen Voraussetzungen (8.5 und 7) zutreffen, ist die *Felddarstellung* des Vielteilchenproblems, beschrieben durch einen HAMILTONOPERATOR

$$H = \int d\mathbf{r}_1 \psi_1^\dagger t_1 \psi_1 + \int \frac{d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2}{2!} \psi_1^\dagger \psi_2^\dagger v_{12} \psi_2 \psi_1, \quad (1)$$

$$[\psi_1, \psi_2^\dagger]_{\mp} = \delta(1, 2) \quad [\psi_1, \psi_2]_{\mp} = [\psi_1^\dagger, \psi_2^\dagger]_{\mp} = 0,$$

dessen Feldoperatoren ψ den angegebenen Minus- oder Plusvertauschungen genügen. Mit der $d\mathbf{r}_1, d\mathbf{r}_2, \dots$ sind Summationen über alle Orts- (und gegebenenfalls auch Spin-) Eigenschaften zu verstehen. Die in (8.5 und 7) eingeführten Operatoren sind hier

$$a_x^\dagger = \psi_1^\dagger \dots \psi_N^\dagger \quad a_x = \psi_N \dots \psi_1, \quad (2)$$

während δ -Funktionen und Summationen über Teilchenzustände im Detail bedeuten:

$$\delta_{x, x'} = \sum_P (\pm 1)^P \prod_i \delta(i, P_i) \quad \int dx = \int \frac{d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N}{N!}. \quad (3)$$

Der Normierungsfaktor $N!$ rührt daher, dass in Wirklichkeit keine unterscheidbaren Teilchen vorliegen, sondern blosse »Ja—Nein«-Ereignisse, so dass jeweils über die Zahl der Paare, Tripel, ... n -tupel summiert werden muss.

Mit H und den angegebenen Vertauschungen der ψ kann für die Zeitabhängigkeit von ψ_1 (in der HEISENBERGDARSTELLUNG) leicht eine *Wellengleichung* abgeleitet werden:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = [\psi_1, H]_- = (t_1 + \int d\mathbf{r}_2 \psi_2^\dagger v_{12} \psi_2) \psi_1. \quad (4)$$

Mit (1) und (2) entsteht für die Matrixdarstellung des HAMILTONOPERATORS

$$\langle a_x H a_{x_1}^\dagger \rangle = (\sum_i t_i + \sum_{i < j} v_{ij}) \delta_{xx'}. \quad (5)$$

Sie stimmt bis auf die unwesentliche δ -Funktion (3) mit dem HAMILTONOPERATOR (1.1) der Teilchentheorie überein. Die Gleichungen (4) und (5) lassen übrigens in einfachster Weise die Äquivalenz von Wellen und (ununterscheidbaren!) Teilchen innerhalb der Quantentheorie erkennen. Die Elemente der Dichtematrix folgen mit (2) aus (8.14):

$$\varrho(x, x', t) = \langle\langle \psi_1^\dagger \dots \psi_N^\dagger \psi_N \dots \psi_1 \rangle\rangle. \quad (6)$$

Zur Darstellung reduzierter Dichten unterteilen wir die Variablen in zwei Gruppen

$$B = 1, \dots, n \quad C = n + 1, \dots, N, \quad (7)$$

die den Teilinformationen »B« und »C« entsprechen. So entstehen durch Spurbildung über C die mit (6) formal fast übereinstimmenden reduzierten Dichten

$$\varrho_n(x, x', t) = \ll \psi_1^\dagger \dots \psi_n^\dagger \psi_n \dots \psi_1 \gg . \quad (8)$$

Allerdings müssen bei der Aufteilung der Spurbildung im Sinne von $Tr = Tr_B Tr_C$ die Normierungsfaktoren beachtet werden. Bildet man nämlich die Teilspuren ebenfalls im Sinne von (3), so bleiben entsprechend

$$\int \frac{dx_1 \dots dx_N}{N!} = \int \frac{dx_1 \dots dx_n}{n!} \int \frac{dx_{n+1} \dots dx_N}{(N-n)!} \frac{(N-n)! n!}{N!} \quad (9)$$

noch Binomialkoeffizienten unberücksichtigt, die sich bei der jeweils zweiten Spurbildung von (8) in der Form

$$Tr_n \varrho_n = \frac{N!}{(N-n)! n!} \equiv \binom{N}{n} \quad (10)$$

bemerkbar machen. Da (10) die Zahl der unter N Teilchen vorhandenen n-tupel bedeutet, können die Diagonalelemente von (8) vom Teilchenbegriff her gesehen als n-tupeldichten aufgefasst werden.

LITERATURVERZEICHNIS

1. J. VON NEUMANN, Göttinger Nachrichten, **1**, 245, 273, 1927.
2. P. A. M. DIRAC, Proc. Cambr. Phil. Soc., **27**, 240, 1931.
3. U. FANO, Rev. Mod. Phys., **29**, 74, 1957.
4. A. VLASOV, J. Phys. USSR, **9**, 25, 1945.
5. D. R. HARTREE, Proc. Cambr. Phil. Soc., **24**, 89, 1928.
6. V. FOCK, Z. Phys., **62**, 795, 1930.
7. N. BOGOLJUBOV, J. Phys. USSR, **10**, 265, 1946.
8. M. BORN and H. S. GREEN, Proc. Roy. Soc., **A188**, 10, 1946.
9. G. KIRKWOOD, J. Chem. Phys., **14**, 180, 1946.
10. J. YVON, Actualités scientifiques et industrielles, Paris, 1935.
11. N. M. HUGENHOLTZ, Physica, **23**, 481, 1957.
12. A. M. GREEN, Nucl. Phys., **33**, 218, 1962.
13. W. MACKE, Z. Naturf., **5a**, 192, 1950.
14. K. A. BRUECKNER, Phys. Rev., **100**, 36, 1955.
15. M. GELL-MANN and K. A. BRUECKNER, Phys. Rev., **106**, 364, 1957.
16. W. MACKE, Ann. Phys. (Lzp.) **20**, 80, 1957.
17. E. P. WIGNER, Phys. Rev., **40**, 749, 1932.
18. W. MACKE, Bose 70th Birthday Commemoration Volume, India, 1965.

ОПЕРАТОР ВЕРОЯТНОСТИ ϱ В ПРОБЛЕМЕ МНОГИХ ЧАСТИЦ

В. МАККЕ

Резюме

Содержание: 1. Введение, 2. Постановка вопроса. 3. Оператор вероятности ϱ . 4. Приведённые вероятности ϱ_B . 5. Исследование временных процессов. 6. Теория возмущений. 7. Приближённые методы. 8. Матричное представление ϱ и ϱ_B . 9. Полевое представление многих частиц.