Gruppentheoretische Untersuchung der Bogoljubov—Valatin-Transformation und des HFB-Zustandes *

HEINZ GÜNTER BECKER

Institut für Theoretische Kernphysik der Universität Bonn

(Z. Naturforsch. **28 a**, 332—342 [1973]; eingegangen am 19. Oktober 1972)

Group Theoretical Investigation of the Bogoljubov—Valatin Transformation and the HFB State

The structure of the Bogoljubov—Valatin transformation and the HFB state is investigated by group-theoretical methods. A direct proof of the Bloch—Messiah factorization theorem shows that the second factor which contains the BCS part of the BV transformation can be chosen always real. An unitary representation of the Bogoljubov—Valatin group in the Fock space is constructed which allows to write down various equivalent expressions for the HFB state vector. The relation between the "unitary form" and the usual form of $|\mathrm{HFB}\rangle$ is clarified using the "quasispin" concept in connection with a theorem about the factorization of the $\mathfrak{O}(3)$ Lie group.

1. Einleitung

Eine viel diskutierte Methode zur mikroskopischen Beschreibung der Kernstruktur besteht in der Hartree-Fock-Bogoljubov (HFB)-Theorie, in der das HF-Verfahren und die ursprünglich im Rahmen der Supraleitungstheorie entwickelte Methode von Bardeen, Cooper und Schrieffer (BCS) zu einem in sich konsistenten Näherungsverfahren der Vielkörpertheorie zusammengefaßt sind. Sie stellt einen geeigneten Rahmen dar, in dem eine einheitliche Behandlung der mit dem mittleren Potential und den Paarungskorrelationen der Nukleonen zusammenhängenden Phänomene möglich ist. (Für Details der HFB-Theorie und einige ihrer Anwendungen sei auf die Literatur [1–7] verwiesen.) Mittels einer kanonischen Transformation, der sogen. Bogoljubov-Valatin-Transformation (BVT), wird das A-Nukleonenproblem übergeführt in ein System von wechselwirkenden Quasiteilchen, in denen schon gewisse Korrelationen der realen Teilchen (Paarwechselwirkung) enthalten sind. Die Grundannahme der HFB-Näherung besteht darin, die Wechselwirkung der Quasipartikel zu vernachlässigen und sie als unabhängig anzusehen. Die Diagonalisierung des wechselwirkungsfreien Teils des Quasipartikel-Hamilton-Operators liefert die Energien der Quasiteilchen und legt gleichzeitig die Koeffizienten der BVT fest (HFB-Gleichungen). Der angenäherte Grundzustand $|\mathrm{HFB}\rangle$ des Kerns übernimmt dabei die Rolle des Quasiteilchenvakuums. Während die Quasipartikel (d. h. die Koeffizienten der BVT) den HFB-Grundzustand eindeutig festlegen, ist umgekehrt die BVT durch den Grundzustand nicht eindeutig bestimmt.

Zum Verständnis dieses Zusammenhangs ist nun die von BLOCH und MESSIAH (BM) [8] angegebene Faktorisierung der BVT von großer Bedeutung. Danach läßt sich die BVT in drei Faktoren zerlegen, von denen der erste und dritte Faktor unitäre Transformationen beschreiben, die mit dem Teilchenzahloperator vertauschen und Basisänderungen der Teilchen bzw. Quasiteilchenzustände bedeuten. Die mittlere Transformation hingegen stellt eine spezielle BVT dar, welche im Gegensatz zu den beiden anderen Faktoren explizit die BCS-Freiheitsgrade enthält und somit für die Paarungseffekte der HFB-Theorie verantwortlich ist. Außerdem kommutiert sie nicht mit dem Teilchenzahloperator, worin die Ursache für die Verletzung der Teilchenzahlinvarianz bei HFB bzw. BCS zu sehen ist. Aufgrund der BM-Zerlegung konnten DIETRICH, MANG und PRADAL [9] in sehr übersichtlicher Weise die Beziehung zwischen dem Variationsprinzip für den HFB-Grundzustand und der Bogoljubov-Valatin-Methode der kanonischen Transformationen herstellen.

Die BM-Faktorisierung besitzt außer ihrem theoretischen auch einen hohen praktischen Wert. So ist sie z. B. zur Begründung von Näherungsverfahren brauchbar. Vor allen Dingen aber liefert sie, wie SCHÜTTE [10] gezeigt hat, bei konsequenter Anwendung auf das numerische Problem ein geeignetes Kriterium dafür, daß keine Lösungen (z. B. sphärische

* Meinem verehrten Lehrer Herrn Prof. Dr. K. BLEULER anläßlich seines 60. Geburtstages zugeeignet.

Sonderdruckanforderungen an Dr. H. G. BECKER, Institut für Theoretische Kernphysik der Universität Bonn, *D-5300 Bonn*, Nußallee 16.

oder schwach deformierte, die energetisch benachbart sind) der HFB-Gleichunge übersehen werden. Ferner stellt sie, was damit zusammenhängt, eine Methode dar, mit deren Hilfe die Instabilität der Lösungen gegenüber Iterationen im Rahmen des Selbstkonsistenzverfahren unterdrückt werden kann.

Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, die mathematische Struktur der BM-Zerlegung und des HFB-Zustandes zu untersuchen, und zwar unter Verwendung von gruppentheoretischen Methoden. Mit der hermiteschen Dichtematrix ϱ und dem komplexen, schiefsymmetrischen „Paarungsensor" $\varkappa$, den in der HFB-Theorie relevanten Größen, wird die sogen. verallgemeinerte Dichtematrix $\mathcal{R}$ definiert, deren Eigenvektoren gerade durch die Spaltenvektoren der BVT-Matrix gegeben sind. BLOCH und MESSIAH [8] zeigen, daß ϱ und $\varkappa$ gleichzeitig auf kanonische Normalformen transformiert werden können. Hieraus und aus dem Eigenwertproblem von $\mathcal{R}$ (hermitesch) schließen sie auf die Zerlegung der BVT. Im Gegensatz dazu wird in unserer Arbeit der umgekehrte Weg eingeschlagen, indem die BM-Faktorisierung zunächst direkt bewiesen wird.

Im 2. und 3. Abschnitt befassen wir uns mit der Gruppe der BVT und ihrer Lie-Algebra und diskutieren die Voraussetzungen, die zum Beweis benötigt werden. Grundlage unseres Beweises, den wir im 4. Abschnitt bringen, bilden zwei Sätze über die Faktorisierung halbeinfacher Lie-Gruppen, die bei HERMANN [11] und HELGASON [12] zu finden sind. Es handelt sich hierbei um weitreichende und zentrale Sätze aus der Theorie der symmetrischen Räume. Vereinfachte Beweise derselben hat REETZ [13] gegeben. Wir halten uns in der Formulierung der Sätze an Hermann und übernehmen z. Tl. auch die dort verwendeten Bezeichnungen. Die BVT erweist sich als unitär-äquivalent zur reellen orthogonalen Gruppe $\mathfrak{O}(2n, R)$ [8], oder anders gesagt, die BVT ist eine unitäre Darstellung von $\mathfrak{O}(2n, R)$ der Dimension $2n$ (n = Anzahl der Einteilchenzustände). Die BM-Zerlegung entspricht dann im wesentlichen einer Faktorisierung nach der Untergruppe $\mathfrak{U}(n)$. Bei dem von uns betrachteten Spezialfall der BV-Gruppe zeigt sich, daß hinter dem zweiten gruppentheoretischen Zerlegungssatz ein einfaches Theorem aus der Matrizenrechnung verborgen ist, welches die Transformation einer komplexen schiefsymmetrischen Matrix auf Normalform betrifft. In der Arbeit von BM [8] ist das gleiche Matrixtheorem im Zusammenhang mit der Transformation von $\varkappa$ auf Normalform von Bedeutung. Allerdings ist der von BM gegebene Beweis desselben nicht vollständig, da er eine i. a. komplexe Normalform liefert, während auch der exakte Beweis von ZUMINO [14] hingegen zeigt, daß sie reell sein muß. Dies hat dann bei BM zur Folge, daß der mittlere Faktor der BVT-Faktorisierung i. a. komplex ist und nicht, wie es sich aus unseren gruppentheoretischen Überlegungen ergibt, eine reelle Transformation darstellt. In dieser Beziehung ist also das Ergebnis von BM (wenn auch geringfügig) zu modifizieren. Ferner erhalten wir für die mittlere Transformation eine charakteristische Beziehung [siehe Gl. (4.2)], die in der Literatur unbekannt zu sein scheint und deshalb bisher noch keine Anwendung gefunden hat.

Der 5. Abschnitt beschäftigt sich mit der expliziten Form des HFB-Zustandes. Zu dem Zweck konstruieren wir eine Darstellung der BVT im Fock-Raum, d. h. jeder BVT wird ein unitärer Operator im Fock-Raum zugeordnet. Diese definieren Abbildungen der Zustände. Insbesondere geht der HFB-Zustand durch eine solche unitäre Transformation aus dem realen Teilchenvakuum $|0\rangle$ hervor. Die so erhaltene explizite Darstellung für $|\mathrm{HFB}\rangle$ ist besonders zur Durchführung des HFB-Variationsverfahrens geeignet, da man unter Verwendung der Gruppeneigenschaft der unitären Transformationen unmittelbar „variierte" HFB-Zustände hinschreiben kann, die sämtlich, und das ist ein weiterer Vorteil, auf 1 normiert sind. Man gelangt so zu einer gruppentheoretischen Fassung des Theorems von Thouless für Zustände vom HFB-Typ. Die Anwendung der BM-Faktorisierung, die sich aufgrund der Darstellungseigenschaften auf die unitären Transformationen im Fock-Raum überträgt, führt zu einer äquivalenten Form von $|\mathrm{HFB}\rangle$, die nur noch von den beiden ersten Transformationen der Zerlegung abhängt. Hierdurch findet die oben erwähnte Tatsache, daß durch das Variationsprinzip nur die ersten beiden Transformationen bestimmt werden, eine einfache Erklärung. Bei der weiteren Umformung des BCS-Anteils von $|\mathrm{HFB}\rangle$ erweist sich der sogen. „Quasispinformalismus" [15, 16] als die adäquate Methode, sowohl unter dem praktischen als auch unter dem gruppentheoretischen Aspekt gesehen. Durch dessen Verwendung wird der Zusammenhang zwischen der „unitären" Form und der in der Literatur üblichen ursprünglichen BCS-Form [9] des HFB-Zustandes besonders durchsichtig. Ein Theorem über die Exponentialabbildung der $\mathfrak{O}(3)$ Lie-Algebra, dessen Beweis im Anhang wiedergegeben ist, spielt hierbei allerdings eine zentrale Rolle [17, 18].

2. Die Gruppe der Bogoljubov–Valatin-Transformationen

Um Komplikationen mathematischer Art zu vermeiden, beschränken wir uns für das Folgende auf eine endliche, wenn auch im Prinzip beliebig große, Anzahl von Einteilchenzuständen $|\alpha\rangle$ (bei numerischen Anwendungen etwa die Oszillatorwellenfunktionen oder die Einteilchenzustände des Nilsson-Modells). Dies entspricht auch der praktischen Situation. Unter dieser Vorausestzung spannt die Gesamtheit

$$\{c_1{}^+ \ldots c_\alpha{}^+ \ldots,\ c_1 \ldots c_\alpha \ldots\} \quad \text{mit} \quad \alpha \varepsilon \{1, 2, \ldots, n\} \tag{2.1}$$

der Operatoren c_α^+ und c_α einen endlichen komplexen linearen Raum $\mathcal{L}$ auf mit $\dim \mathcal{L} = 2n$. Die BVT fassen wir als lineare Abbildung in $\mathcal{L}$ auf. Wir schreiben sie in Matrixform, indem wir die Gesamtheit der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren (2.1) in einen Spaltenvektor zusammenfassen:

$$\begin{pmatrix} a \\ a^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^+ & B^+ \\ \tilde{B} & \tilde{A} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} \equiv \mathcal{B}^+ \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix}. \tag{2.2}$$

Damit diese Transformation „kanonisch" ist, die Quasipartikelerzeugungs- und Quasipartikelvernichtungsoperatoren a^+ und a also Fermi-Vertauschungsrelationen genügen, hat man als notwendige und hinreichende Bedingung für die Transformationsmatrix $\mathcal{B}$ die Unitarität:

$$\mathcal{B}^+ = \mathcal{B}^{-1}. \tag{2.3}$$

Die Invarianz der Fermi-Vertauschungsrelationen und die nichttriviale Forderung, daß sich die Quasipartikeloperatoren ebenfalls wie die ursprünglichen Operatoren c^+, c in Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren (d. h. in zueinander hermitesch-konjugierte Operatoren) unterteilen lassen, sind somit äquivalent mit der Invarianz eines hermiteschen Skalarprodukts in $\mathcal{L}$. Die spezielle Aufteilung der Spaltenvektoren $\binom{c}{c^+}$ bzw. $\binom{a}{a^+}$ hat weiterhin zur Folge, daß die Matrix nicht, wie man sieht, die allgemeinste Form einer unitären $2n \times 2n$-Matrix besitzt, sondern der Einschränkung [2]

$$f \mathcal{B} f = \mathcal{B}^* \tag{2.4}$$

unterliegt. Hierbei bezeichnet f die $2n \times 2n$-Matrix

$$f = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \tilde{f} = f^{-1}. \tag{2.5}$$

Um die Beziehung (2.4) zu verifizieren, gehen wir von der Gleichung

$$\begin{pmatrix} a^+ \\ a \end{pmatrix} = \tilde{\mathcal{B}} \begin{pmatrix} c^+ \\ c \end{pmatrix} \tag{2.6}$$

aus, die nur eine andere Schreibweise der Gl. (2.2) bedeutet. Die Vertauschung der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren können wir aber gerade mit Hilfe von f in der Form

$$\begin{pmatrix} a^+ \\ a \end{pmatrix} = f \begin{pmatrix} a \\ a^+ \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} c^+ \\ c \end{pmatrix} = f \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} \tag{2.7}$$

ausdrücken. Setzen wir dies in Gl. (2.6) ein, so ergibt dann der Vergleich mit (2.2) unmittelbar die Beziehung (2.4). Aus der Gl. (2.4) schließen wir, daß die Determinante von $\mathcal{B}$ reell, also $+1$ oder -1 ist. Die Unitarität von $\mathcal{B}$ zusammen mit der Bedingung (2.4) charakterisieren die allgemeinste BVT. Die Gesamtheit der BVT bildet somit eine Untergruppe $\mathfrak{G}$ der kompakten Lie-Gruppe $\mathfrak{U}(2n)$. Um welche Untergruppe es sich dabei handelt, sieht man sofort, wenn man mit der unitären Transformation

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{pmatrix} = (S^{-1})^+ \tag{2.8}$$

die hermiteschen Operatoren [8]

$$\begin{pmatrix} \gamma \\ \bar{\gamma} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} \tag{2.9}$$

als neue Basis von $\mathcal{L}$ einführt. Dabei geht die Matrix f, deren (tensorielles!) Transformationsgesetz $S^* f S^+$ man aus Gl. (2.4) erhält, in die Einheitsmatrix über. Die Beziehung (2.4) drückt dann einfach die Tatsache aus, daß die BVT in der γ-Basis durch eine reelle orthogonale Matrix dargestellt wird. Es folgt also, daß die BV-Gruppe $\mathfrak{G}$ isomorph zur *reellen* orthogonalen Gruppe $\mathfrak{O}(2n, R)$ ist bzw. eine $2n$-dimensionale unitäre Darstellung von $\mathfrak{O}(2n, R)$ realisiert.

Bei der BM-Faktorisierung spielen diejenigen BVT $\varepsilon\, \mathfrak{G}$ eine besondere Rolle, die nur eine Transformation der zugrunde gelegten Einteilchenbasis $|\alpha\rangle$ bewirken und dementsprechend im Gegensatz zu einer allgemeinen BVT den Teilchenzahloperator $N_{\text{op}} = \sum_\alpha c_\alpha^+ c_\alpha$ ungeändert lassen. Sie bestehen, auf die c-Basis bezogen, aus Matrizen (2.2), deren Untermatrizen auf der Nebendiagonale identisch verschwinden. Im Gegensatz zu den allgemeinen BVT mischen sie nicht Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Aufgrund der Invarianz des Teilchenzahloperators

$$N_{\text{op}} = \tfrac{1}{2}\, (c^+, c) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} + \frac{n}{2} \qquad (\dim \mathcal{L} = 2\,n) \tag{2.10}$$

sind diese Transformationen durch die Bedingung

$$\mathcal{B}^+ g\, \mathcal{B} = g \tag{2.11}$$

mit $$g=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}=\tilde{g}=g^{-1} \tag{2.12}$$

eindeutig festgelegt. Sie bilden eine Untergruppe von $\mathfrak{G}$, die mit der unitären Gruppe $\mathfrak{U}(n)$ identisch ist:

$$\mathfrak{K} \overset{\text{def.}}{=} \{\mathcal{B} \in \mathfrak{G} : g\mathcal{B}g^{-1}=\mathcal{B}\}\,. \tag{2.13}$$

3. Struktur der Lie-Algebra von $\mathfrak{G}$

Die BV-Gruppe $\mathfrak{G}$ hat einige bemerkenswerte Eigenschaften, die gerade für die BM-Faktorisierung grundlegend sind. Diese Eigenschaften äußern sich ntaürlich auch in der ihr zugeordneten Lie-Algebra $\mathfrak{g}$. Im allgemeinen lassen sich die Eigenschaften einer Lie-Gruppe viel leichter an ihrem Infinitesimalring, d. h. an ihrer Lie-Algebra erkennen. Dies ist auch bei der vorliegenden Gruppe $\mathfrak{G}$ der Fall. Wir zeigen nun, daß mit der Matrix g aus Gl. (2.12) ein involutorischer Automorphismus σ der Lie-Algebra $\mathfrak{g}$ definiert werden kann, der eine Zerlegung des „Vektorraumes" $\mathfrak{g}$ in eine direkte Summe von Eigenräumen der linearen Abbildung σ ermöglicht. Hierdurch ist eine Cartan-Zerlegung von $\mathfrak{g}$ gegeben. Sie bildet die wesentliche Voraussetzung für die beiden mathematischen Sätze im nächsten Abschnitt.

Die Lie-Algebra von $\mathfrak{G}$ besteht aus den antihermiteschen Matrizen

$$X=-X^{+} \quad \text{mit} \quad f X f = X^{*}, \tag{3.1}$$

welche die allgemeine Form

$$X=\begin{pmatrix}u & v^{*}\\ v & u^{*}\end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad u^{+}=-u \text{ und } \tilde{v}=-v \tag{3.2}$$

haben. Der Untergruppe $\mathfrak{K}$ entspricht die Unteralgebra

$$\mathfrak{k}=\{X \in \mathfrak{g} : g X g^{-1}=X\}\,. \tag{3.3}$$

Ihre Elemente sind durch die Matrizen X mit $v\equiv 0$ gegeben. Es stellt sich die Frage, ob sich die Gesamtheit $\mathfrak{p}$ der Elemente X mit $u\equiv 0$, die das Komplement von $\mathfrak{k}$ bezüglich $\mathfrak{g}$ bildet, in ähnlicher Weise wie die Elemente von $\mathfrak{k}$ durch die Matrix g charakterisieren lassen. Dies ist in der Tat der Fall; man kann für $X \in \mathfrak{p}$ unmittelbar die Beziehung $g X g^{-1} = -X$ verifizieren. Es gilt also:

$$\mathfrak{p}=\{X \in \mathfrak{g} : g X g^{-1}=-X\}. \tag{3.4}$$

Diesen Sachverhalt können wir mathematisch präzisieren: Durch die Matrix g ist ein involutorischer Automorphismus

$$\sigma(X) \overset{\text{def.}}{=} g X g^{-1} \quad \text{mit} \quad \sigma^2=\text{Identität} \tag{3.5}$$

der Lie-Algebra $\mathfrak{g}$ definiert. Als eine lineare Transformation von $\mathfrak{g}$ besitzt σ die Eigenwerte $+1$ und -1. Dementsprechend kann $\mathfrak{g}$ als eine (innere) direkte Summe $\mathfrak{g}=\mathfrak{k}\oplus\mathfrak{p}$ der Eigenräume von σ dargestellt werden (hier verwenden wir die Vektorraumstruktur von $\mathfrak{g}$). Während die Unteralgebra $\mathfrak{k}$ Eigenraum von σ zum Eigenwert $+1$ (Fixalgebra) ist, muß der Eigenraum zum Eigenwert -1 gemäß Gl. (3.4) mit $\mathfrak{p}$ identifiziert werden. Die so mit Hilfe von σ konstruierte Aufspaltung $\mathfrak{g}=\mathfrak{k}\oplus\mathfrak{p}$ ist eine sogen. kanonische bzw. Cartan-Zerlegung von $\mathfrak{g}$. Die Unteralgebra $\mathfrak{k}$ wird dabei als symmetrische Unteralgebra von $\mathfrak{g}$ bezeichnet.

Die Existenz eines involutiven Automorphismus hat gewissermaßen eine Klassifizierung der Lie-Produkte in $\mathfrak{g}$ zur Folge. Unter Verwendung der Eigenschaft, daß ein Automorphismus per definitionem das Lie-Produkt erhält, lassen sich nämlich die charakteristischen Relationen

$$[\mathfrak{k},\mathfrak{k}]\subset\mathfrak{k}; \quad [\mathfrak{k},\mathfrak{p}]\subset\mathfrak{p}; \quad [\mathfrak{p},\mathfrak{p}]\subset\mathfrak{k} \tag{3.6}$$

ableiten, die einen weiteren Einblick in die Struktur von $\mathfrak{g}$ geben. Den Beweis der ersten Relation können wir übergehen, da sie die schon bekannte Tatsache ausdrückt, daß $\mathfrak{k}$ Unteralgebra von $\mathfrak{g}$ ist. Zum Beweis der zweiten Beziehung setzen wir $X \in \mathfrak{k}$ und $Y \in \mathfrak{p}$, dann gilt

$$\begin{aligned}\sigma([X,Y]) &= [\sigma(X),\sigma(Y)]\\ &= [X,-Y] = -[X,Y] \in \mathfrak{p}.\end{aligned} \tag{3.7}$$

In ähnlicher Weise folgt die dritte Relation, indem man von $X, Y \in \mathfrak{p}$ ausgeht:

$$\begin{aligned}\sigma([X,Y]) &= [\sigma(X),\sigma(Y)]\\ &= [-X,-Y] = [X,Y] \in \mathfrak{k}.\end{aligned} \tag{3.8}$$

Die Relationen (3.6), die wir soeben aus abstrakten Überlegungen gewonnen haben, lassen sich natürlich auch direkt verifizieren, indem man die explizite Darstellung der Elemente von $\mathfrak{k}$ und $\mathfrak{p}$ in Gl. (3.2) benutzt. Die Beziehungen (3.6) erweisen sich auch als hinreichende Bedingungen für die kanonische Zerlegung von $\mathfrak{g}$, so daß diese ebenfalls durch (3.6) definiert werden kann [11].

4. Bloch–Messiah-Faktorisierung

Zunächst bemerken wir, daß der Automorphismus σ von $\mathfrak{g}$ auch einen involutiven Automorphismus der Gruppe $\mathfrak{G}$ (für den wir ebenfalls den Buchstaben σ verwenden) induziert, was durch die Definition (2.13) der Untergruppe $\mathfrak{K}$ nahegelegt wird. Hierzu müssen wir nur zeigen, daß für beliebiges $\mathcal{B} \varepsilon \mathfrak{G}$ das Bildelement $\sigma(\mathcal{B}) = g\mathcal{B}g^{-1}$ in $\mathfrak{G}$ enthalten ist. Die Unitarität von $\sigma(\mathcal{B})$ ist unmittelbar evident. Daß das zweite Kriterium für eine BVT, nämlich $f\sigma(\mathcal{B})f = \sigma(\mathcal{B})^*$, erfüllt ist, folgt sofort aus der Beziehung $[f, g]_+ = 0$. Die Untergruppe $\mathfrak{K}$ spielt natürlich die Rolle der Fixgruppe von σ. In Analogie zur symmetrischen Unteralgebra $\mathfrak{k}$ wird daher $\mathfrak{K}$ als symmetrische Untergruppe bezeichnet.

Im folgenden werden wir uns auf Bogoljubov-Valatin-Transformationen mit Determinante $+1$ beschränken; d. h. wir betrachten die Zusammenhangskomponente $\mathfrak{G}_+$, welche isomorph zu $\mathfrak{SO}(2n, R)$ ist. Weiter unten wird sich zeigen, daß die Beschränkung auf die BVT mit $\det \mathcal{B} = 1$ nur eine Beschreibung von Teilchensystemen mit gerader Teilchenzahl zuläßt. Dies entspricht auch den bisherigen Anwendungen der HFB-Theorie. Da $\mathfrak{SO}(2n, R)$ eine zusammenhängende, kompakte Lie-Gruppe ist, kann jedes Element $\mathcal{B}$ aus $\mathfrak{G}_+$ in der Form $\mathcal{B} = \exp X$ mit $X \varepsilon \mathfrak{g}$ dargestellt werden.

Wir versuchen nun, die BVT in Faktoren aufzuspalten, die einerseits aus einer reinen Paarungstransformation und andererseits aus Transformationen bestehen, welche die Teilchenzahl invariant lassen und dementsprechend nur einen Wechsel der Teilchen- bzw. Quasiteilchenbasis bedeuten. Die ursprüngliche Form (2.2) der BVT bietet kaum einen Anhaltspunkt dafür, wie eine solche Zerlegung durchzuführen ist. Dagegen scheint die Exponentialdarstellung $\mathcal{B} = \exp X$ hierfür geeigneter. Sie besitzt gegenüber der Form (2.2) den Vorteil, daß die Untermatrizen u und v in X unabhängig sind, während zwischen den Untermatrizen A und B in Gl. (2.2) aufgrund der Unitaritätsrelation von $\mathcal{B}$ ein funktionaler Zusammenhang besteht. Die Exponentialform legt nämlich den Ansatz

$$\mathcal{B} = \exp\begin{pmatrix} u & v^* \\ v & u^* \end{pmatrix} = \exp\begin{pmatrix} 0 & v_1^* \\ v_1 & 0 \end{pmatrix} \exp\begin{pmatrix} u_1 & 0 \\ 0 & u_1^* \end{pmatrix} \overset{\text{def.}}{=} e^{Y_1}\, e^{X_1} \tag{4.1}$$

nahe. Einen Hinweis für die Richtigkeit dieser Zerlegung ist darin zu sehen, daß keine Gruppenparameter verlorengehen. Die antihermitesche Matrix u_1 enthält n^2 Parameter. Die komplexe schiefsymmetrische Matrix v_1 wird durch $n(n-1)$ reelle Parameter beschrieben. Wir erhalten also insgesamt $n(2n-1)$ reelle Parameter, was mit der Parameteranzahl von $\mathfrak{G}_+ \cong \mathfrak{SO}(2n, R)$ übereinstimmt. In hinreichend kleiner Umgebung der Gruppeneins ist die Zerlegung (4.1) immer möglich (Beschreibung der Gruppe durch sogen. kanonische Parameter). Der erste Faktor $\exp Y_1$ in (4.1) ist ein Element aus $\mathfrak{P} = \exp(\mathfrak{p})$, womit wir die Gesamtheit der durch die Exponentialabbildung von $\mathfrak{p}$ erzeugten BVT aus $\mathfrak{G}_+$ bezeichnen, und der zweite Faktor $\exp X_1$ ein Element aus $\mathfrak{K}$. Die für die Paarung verantwortlichen Transformationen müssen demnach in $\mathfrak{P}$ enthalten sein. Daß die Faktorisierung (4.1) im „Großen" tatsächlich möglich und exakt ist, garantiert ein mathematischer Satz aus der Theorie der Lie-Gruppen bzw. aus der Theorie der symmetrischen Räume [11, 12] (z. B. bei HERMANN [11], Theorem 6-5 auf S. 33), den wir für unsere Zwecke wie folgt formulieren: Sei $\mathfrak{G}$ eine halbeinfache, zusammenhängende, kompakte Lie-Gruppe, $\mathfrak{K}$ eine symmetrische Untergruppe; d. h. $\mathfrak{g} = \mathfrak{k} \oplus \mathfrak{p}$ eine Cartan-Zerlegung der Lie-Algebra von $\mathfrak{G}$. Ferner sei $\mathfrak{P} = \exp(\mathfrak{p})$ das Bild der Exponentialabbildung von $\mathfrak{p}$. Dann gilt $\mathfrak{G} = \mathfrak{P} \cdot \mathfrak{K}$. Die Voraussetzungen dieses Satzes sind, wie aus unserer ausführlichen Diskussion im vorigen Abschnitt hervorgeht, im Falle der BV-Gruppe erfüllt.

Im Zusammenhang mit der Zerlegung (4.1) stellt sich die Frage, ob $\mathfrak{P}$ analog zur Untergruppe $\mathfrak{K}$ ebenfalls in invarianter Weise durch die Abbildung σ charakterisiert werden kann. Dies ist in der Tat der Fall. Sei $\mathcal{P} = \exp Y$ mit $Y \varepsilon \mathfrak{p}$ ein beliebiges Element aus $\mathfrak{P}$, dann folgt unter Berücksichtigung von Gl. (3.4) für das Bildelement $\sigma(\mathcal{P})$ sofort:

$$\sigma(\mathcal{P}) = g\, e^Y g^{-1} = e^{gYg^{-1}} = e^{-Y} = \mathcal{P}^{-1}. \tag{4.2}$$

Somit ist $\mathfrak{P}$ auch eindeutig definiert durch:

$$\mathfrak{P} = \{\mathcal{B} \varepsilon \mathfrak{G}_+ : \sigma(\mathcal{B}) = g\mathcal{B}g^{-1} = \mathcal{B}^{-1}\}. \tag{4.3}$$

Diese einfache Bedingung scheint völlig unbekannt zu sein und hat bisher noch keine Anwendung gefunden.

Um zur vollständigen BM-Faktorisierung zu gelangen, müssen wir aus dem ersten Faktor der Zerlegung (4.1) die speziellen Paarungstransformationen extrahieren. Hierfür stehen uns zwei Möglichkeiten zur Verfügung. Die erste beruht auf einem Theorem aus der Matrizenrechnung (d. h. aus der linearen Algebra), die zweite dagegen auf einem rein gruppentheoretischen Satz. Bevor wir letzteren zitieren, führen wir die Ableitung nach der ersten Methode durch, da diese sehr instruktiv ist und den Inhalt des abstrakten gruppentheoretischen Satzes plausibel macht. Sie besteht darin, die im Exponenten des 1. Faktors in Gl. (4.1) auftretende antisymmetrische Untermatrix v_1 auf eine Normalform zu transformieren.

Theorem: Sei $v = -\tilde{v}$ eine komplexe (!) schiefsymmetrische $n \times n$-Matrix. Dann existiert eine unitäre Matrix $k = (k^+)^{-1}$ derart, daß v gemäß der Vorschrift $\tilde{k}\, v\, k$ (typisches Transformationsgesetz eines Tensors 2. Stufe) auf die reelle(!) Normalform

$$\tilde{k}\, v\, k = a = \begin{pmatrix} \boxed{\begin{matrix} 0 & \alpha_1 \\ -\alpha_1 & 0 \end{matrix}} & & & & & \cdot \\ & \boxed{\begin{matrix} 0 & \alpha_2 \\ -\alpha_2 & 0 \end{matrix}} & & & & \cdot \\ & & \ddots & & & \vdots \\ & & & \ddots & & 0 \\ & & & & \boxed{\begin{matrix} 0 & \alpha_p \\ -\alpha_p & 0 \end{matrix}} & 0 \\ \cdot\;\cdot\;\cdot & & \cdot\;\cdot\;\cdot & & 0 \quad 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{4.4}$$

gebracht werden kann. Die Zahlen α_k sind reell und nichtnegativ. Wenn die Dimension n eine gerade Zahl ist, entfällt in (4.4) die letzte Zeile und Spalte. Das Theorem spielt in der HFB-Theorie eine bedeutende Rolle (Anwendung auf die anomale Dichte bzw. den sogen. Paarungstensor) und wurde von BLOCH-MESSIAH [8] und ZUMINO [14] angegeben. Allerdings ist der Beweis von Bloch-Messiah nicht vollständig (bei BM sind die Größen α_k i. allg. komplex). Ein sehr einfacher und übersichtlicher Beweis ist in [18] zu finden.

Wenden wir (4.4) auf den 1. Faktor der Zerlegung (4.1) an, so folgt als wichtiges Resultat

$$\begin{pmatrix} 0 & v_1{}^* \\ v_1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & k\,a\,\tilde{k} \\ k^*\,a\,k^+ & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k & 0 \\ 0 & k^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & a \\ a & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k^+ & 0 \\ 0 & \tilde{k} \end{pmatrix}. \tag{4.5}$$

Mit anderen Worten: Jedes Element $Y_1 \varepsilon\, \mathfrak{p}$ kann in der Form

$$Y_1 = \mathcal{K}\, M\, \mathcal{K}^+ \tag{4.6}$$

dargestellt werden, wobei die unitäre Matrix $\mathcal{K}$ ein Element der Untergruppe $\mathfrak{K}$ und die Matrix M ein spezielles aus der Normalform a gebildetes Element aus $\mathfrak{p}$ ist. Setzen wir (4.6) in (4.1) ein und definieren $\mathcal{K} \equiv \mathcal{K}_1$ und $\mathcal{K}^+ \exp\{X_1\} \equiv \mathcal{K}_3$, so erhalten wir für die allgemeine BVT endgültig die Bloch-Messiah-Zerlegung:

$$B = \mathcal{K}_1\, e^M\, \mathcal{K}_3\,. \tag{4.7}$$

Im Gegensatz zu BM ergibt sich aus unserer Ableitung, daß der mittlere Faktor reell ist. Die erste und letzte Transformation gehören zur Untergruppe $\mathfrak{K}$, während die zweite eine spezielle Transformation aus $\mathfrak{P}$ darstellt und als solche durch die Bedingung (4.2) charakterisiert ist. Letztere enthält die BCS-Freiheitsgrade der BVT und ist für die Verletzung der Teilchenzahlinvarianz verantwortlich. Sie stimmt mit dem in der BCS-Theorie verwendeten Spezialfall der BVT überein. Im nächsten Abschnitt wird die Zerlegung (4.7), insbesondere der zweite Faktor, ausführlicher diskutiert.

Unter dem Aspekt der Lie-Algebra gesehen, sind die Matrizen M Elemente einer maximalen Abelschen Unteralgebra bzw. Cartan-Unteralgebra von $\mathfrak{p}$, die wir mit $\mathfrak{a}$ bezeichnen. Die Lie-algebraische Fassung von (4.6) lautet dann

$$\mathfrak{p} = \mathrm{Ad}\; \mathfrak{K}(\mathfrak{a})\,. \tag{4.8}$$

Vergleicht man diese mit der Aussage

$$\mathrm{Ad}\; \mathfrak{K}(\mathfrak{p}) \subset \mathfrak{p}\,, \tag{4.9}$$

die mit der 2. Relation in Gl. (3.6) äquivalent ist, so sieht man, daß (4.8) eine wesentliche und nichttriviale Verschärfung von (4.9) bedeutet. Das Theorem (4.8), welches für allgemeinere Gruppen gültig ist und hinter dem sich also in dem von uns betrachteten Fall der BV-Gruppe ein einfaches Lemma der Matrizenrechnung verbirgt, läßt sich natürlich rein gruppentheoretisch oder genauer gesagt, rein differentialgeometrisch beweisen und bildet ein Hauptresultat in der Theorie der symmetrischen Räume [11, 12]. Im wesentlichen wird hierzu die Cartan-Zerlegung von $\mathfrak{g}$ vorausgesetzt. Aus (4.8) folgt unmittelbar

$$\mathfrak{P} = \mathrm{Ad}\; \mathfrak{K}(\mathfrak{A}) \quad \text{mit} \quad \mathfrak{A} = \exp(\mathfrak{a})\,, \tag{4.10}$$

was zusammen mit $\mathfrak{G}_+ = \mathfrak{P} \cdot \mathfrak{K}$ wiederum die BM-Faktorisierung liefert.

5. Äquivalente Darstellungen des HFB-Zustandes

Ziel dieses Abschnittes ist es, die Struktur des HFB-Zustandes aufzuklären und verschiedene, äquivalente Ausdrücke für denselben herzuleiten. Zu dem Zweck konstruieren wir eine Darstellung der BV-Gruppe im Fock-Raum, d. h. wir ordnen jeder BVT einen unitären Operator im Fock-Raum zu. In entsprechender Weise übertragen wir die BM-Faktorisierung (was aufgrund der Darstellungseigenschaften ohne weiteres möglich ist). Die durch eine BVT induzierte unitäre Transformation der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren definiert natürlich auch eine Transformation der Zustände des Fock-Raumes. Man kann nun leicht zeigen, daß der HFB-Zustand durch eine solche unitäre Transformation aus dem Vakuumzustand $|0\rangle$ der realen Teilchen hervorgeht. Damit gelangen wir zu expliziten Ausdrücken, u. a. zu der bekannten BCS-Form [9] des HFB-Zustandes. Bei den Ableitungen in diesem Abschnitt findet das Konzept des „elementaren Quasispins" Anwendung.

Jeder BVT in Gl. (4.1) wird gemäß der Vorschrift

$$\exp S_{\mathrm{op}} \overset{\mathrm{def}}{=} \exp\left\{\tfrac{1}{2}(c^+, c)\begin{pmatrix} u & v^* \\ v & u^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix}\right\} \qquad (5.1)$$

ein Operator im Fock-Raum zugeordnet. Aus Gl. (3.2) folgt, daß $S_{\mathrm{op}}^+ = -S_{\mathrm{op}}$, d. h. der Operator $\exp\{S_{\mathrm{op}}\}$ unitär ist. Zur Konstruktion von (5.1) bemerken wir folgendes: Wir haben gesehen, daß $\mathfrak{G}_+$ isomorph zu $\mathfrak{SO}(2n, R)$ ist. Eine Darstellung der Lie-Algebra von $\mathfrak{SO}(2n, R)$ im Fock-Raum erhält man bekanntlich (siehe z. B. LIPKIN [19]), wenn man als Generatoren die in den $2n$ γ-Operatoren (2.9) bilinearen Ausdrücke

$$L_{ij} = \gamma_i \gamma_j = -L_{ji} \quad \text{mit} \quad i \neq j \quad (i, j = 1, \ldots, 2n)$$

verwendet (γ steht hier für die Gesamtheit der $2n$ Operatoren γ und $\bar{\gamma}$, also $\gamma_i \equiv \gamma_i$ für $i = 1, \ldots, n$ und $\gamma_i \equiv \bar{\gamma}_{i-n}$ für $i = n+1, \ldots, 2n$). Da die γ-Operatoren hermitesch sind, folgt für die Operatoren $L_{ij} = -L_{ij}^+$, die Antihermitezität. Der Übergang zur Darstellung von $\mathfrak{SO}(2n, R)$ erfolgt, wie immer, durch die Exponentialabbildung der Lie-Algebra. Ein beliebiges Element schreibt sich dann in der Form $\exp\{\frac{1}{2}\sum_{ij} R_{ij}\gamma_i\gamma_j\}$, wobei R eine reelle, schiefsymmetrische $2n \times 2n$-Matrix ist. Führen wir an Stelle der γ-Operatoren mittels (2.9) die c-Operatoren ein, so gelangen wir schließlich zur Darstellung von $\mathfrak{G}_+$ im Fock-Raum in der Form (5.1). Damit ist diese hinreichend motiviert.

Als nächstes zeigen wir, daß der Zusammenhang zwischen den Quasipartikeloperatoren und den Operatoren c und c^+ gerade durch die unitäre Transformation mit dem Operator (5.1) hergestellt wird:

$$\begin{pmatrix} a \\ a^+ \end{pmatrix} = e^{S_{\mathrm{op}}}\begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} e^{-S_{\mathrm{op}}} = \exp\left\{-\begin{pmatrix} u & v^* \\ v & u^* \end{pmatrix}\right\}\begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix}. \qquad (5.2)$$

Hierbei ist die mit $e^{S_{\mathrm{op}}}$ „transformierte" Spalte als ein Spaltenvektor zu verstehen, der mit den entsprechend transformierten Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren gebildet wird. Zum Beweis der für das folgende grundlegenden Beziehung (5.2) differenzieren wir die Operatoren

$$\begin{pmatrix} a(t) \\ a^+(t) \end{pmatrix} = e^{t S_{\mathrm{op}}}\begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} e^{-t S_{\mathrm{op}}}, \quad \begin{pmatrix} a(t) \\ a^+(t) \end{pmatrix}_{t=0} \equiv \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} \qquad (5.3)$$

nach dem reellen Parameter t:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} a(t) \\ a^+(t) \end{pmatrix} = e^{t S_{\mathrm{op}}}\left[\begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix}, S_{\mathrm{op}}\right] e^{-t S_{\mathrm{op}}}. \qquad (5.4)$$

Der Kommutator errechnet sich zu

$$\left[\begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix}, S_{\mathrm{op}}\right] = \begin{pmatrix} u & v^* \\ v & u^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix}, \qquad (5.5)$$

wobei die Eigenschaften (3.2) der Untermatrizen u und v wesentlich benutzt werden. Aus (5.4) folgt somit für die Gesamtheit der Operatoren $a(t)$ und $a^+(t)$ das lineare Differentialgleichungssystem:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} a(t) \\ a^+(t) \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} u & v^* \\ v & u^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a(t) \\ a^+(t) \end{pmatrix}. \qquad (5.6)$$

Die Integration unter Berücksichtigung der Anfangsbedingung (5.3) für $t = 0$ liefert unmittelbar die Lösung

$$\begin{pmatrix} a(t) \\ a^+(t) \end{pmatrix} = \exp\left\{-t\begin{pmatrix} u & v^* \\ v & u^* \end{pmatrix}\right\}\begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix}, \qquad (5.7)$$

die für $t = 1$ mit der Beziehung (5.2) übereinstimmt, womit diese bewiesen ist.

Da die Gruppe der unitären Transformationen (5.1) eine Darstellung der BV-Gruppe realisiert, können wir auch die BM-Zerlegung auf den Fock-Raum übertragen. Dies folgt außerdem aus der Tatsache, daß sich die Ableitungen im 3. und 4. Abschnitt sinngemäß für die von den unitären Transformationen (5.1) gebildete Gruppe und ihre Lie-Algebra wiederholen lassen. Gemäß der Vorschrift (5.1) haben wir dann die zur Gl. (4.7) analoge Beziehung für die Operatoren:

$$\exp S_{\mathrm{op}} = \exp\{S_{\mathrm{op}}^{(1)}\}\exp\{S_{\mathrm{op}}^{\mathrm{BCS}}\}\exp\{S_{\mathrm{op}}^{(3)}\}. \qquad (5.8)$$

Speziell gilt für den mittleren Faktor:

$$\begin{aligned} &\exp\{S_{\mathrm{op}}^{\mathrm{BCS}}\}\begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix}\exp\{-S_{\mathrm{op}}^{\mathrm{BCS}}\} \\ &= \exp\left\{-\begin{pmatrix} 0 & \alpha \\ \alpha & 0 \end{pmatrix}\right\}\begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathrm{ch}\,\alpha & -\mathrm{sh}\,\alpha \\ -\mathrm{sh}\,\alpha & \mathrm{ch}\,\alpha \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix}. \end{aligned} \qquad (5.9)$$

Die Untermatrizen $\mathrm{ch}\,\alpha$ und $\mathrm{sh}\,\alpha$ sind mittels den unendlichen Reihen für den hyperbolischen Cosinus und Sinus definiert. Wegen der einfachen Gestalt der Matrix α lassen sie sich expliziert angeben:

$$\operatorname{ch} a = \begin{pmatrix} \begin{matrix}\cos\alpha_1 & 0\\ 0 & \cos\alpha_1\end{matrix} & & & & \vdots \\ & \begin{matrix}\cos\alpha_2 & 0 \\ 0 & \cos\alpha_2\end{matrix} & & & \vdots\\ & & \ddots & & \vdots \\ & & & \begin{matrix}\cos\alpha_p & 0\\0&\cos\alpha_p\end{matrix} & \begin{matrix}0\\0\end{matrix} \\ \cdots & \cdots & & \begin{matrix}0 & 0\end{matrix} & 1\end{pmatrix}; \quad p=\frac{n-1}{2},$$

$$\operatorname{sh} a = \begin{pmatrix} \begin{matrix}0 & \sin\alpha_1\\ -\sin\alpha_1 & 0\end{matrix} & & & & \vdots \\ & \begin{matrix}0 & \sin\alpha_2 \\ -\sin\alpha_2 & 0\end{matrix} & & & \vdots\\ & & \ddots & & \vdots \\ & & & \begin{matrix}0 & \sin\alpha_p\\-\sin\alpha_p&0\end{matrix} & \begin{matrix}0\\0\end{matrix} \\ \cdots & \cdots & & \begin{matrix}0 & 0\end{matrix} & 0\end{pmatrix}; \quad p=\frac{n-1}{2}. \qquad (5.10)$$

Hierbei ist wiederum der Fall angenommen, daß die Anzahl n der zugrunde liegenden Einteilchenzustände ungerade ist. Für eine gerade Anzahl hat man die letzte Zeile und Spalte in $\operatorname{ch} \alpha$ bzw. $\operatorname{sh} \alpha$ zu streichen und $p = n/2$ zu setzen. Um die durch „Paarung" ausgezeichneten zweidimensionalen Unterräume von $\mathfrak{L}$ explizit zu kennzeichnen, führen wir die Schreibweise $|\bar{\varkappa}\rangle$ für den mit $|\varkappa\rangle$ „gepaarten" Einteilchenzustand ein und schreiben z. B. den Zeilenvektor (c^+, c) in der Form $(c_1^+, c_{\bar{1}}^+, c_2^+, c_{\bar{2}}^+, \ldots, c_1, c_{\bar{1}}, \ldots)$. Bei der Einteilung der Gesamtheit der n Einteilchenzustände in Paare bleibt, falls n ungerade ist, ein ungepaarter Zustand übrig. Dies gilt allerdings nur unter der Voraussetzung, daß die Parameter α_k sämtlich $\neq 0$ sind. Andernfalls treten auch bei geradem n (wie es sich bei den numerischen Anwendungen auf Kerne zeigt) ungepaarte Zustände auf. Der Operator $S_{\text{op}}^{\text{BCS}}$ in Gl. (5.9) vereinfacht sich zu

$$S_{\text{op}}^{\text{BCS}} = \sum_{\varkappa=1}^{p} \alpha_\varkappa (c_\varkappa^+ c_{\bar{\varkappa}}^+ + c_\varkappa c_{\bar{\varkappa}});$$

$$p = \begin{cases} n/2 & \text{für } n = \text{gerade}, \\ (n-1)/2 & \text{für } n = \text{ungerade}, \end{cases} \qquad (5.11)$$

während sich für die spezielle BVT die übersichtliche Form

$$\begin{aligned} a_\varkappa^+ &= \exp\{S_{\text{op}}^{\text{BCS}}\}\, c_\varkappa^+ \exp\{-S_{\text{op}}^{\text{BCS}}\} \\ &= c_\varkappa^+ \cos\alpha_\varkappa - c_{\bar{\varkappa}} \sin\alpha_\varkappa, \\ a_{\bar{\varkappa}}^+ &= \exp\{S_{\text{op}}^{\text{BCS}}\}\, c_{\bar{\varkappa}}^+ \exp\{-S_{\text{op}}^{\text{BCS}}\} \\ &= c_{\bar{\varkappa}}^+ \cos\alpha_\varkappa + c_\varkappa \sin\alpha_\varkappa \end{aligned} \qquad (5.12)$$

ergibt. Bei ungeradem n gilt für den letzten Zustand $(c_n^+)_{\text{trans}} = c_n^+$, wie man aus (5.10) oder aus der Tatsache entnimmt, daß dieser nicht explizit in dem Operator $S_{\text{op}}^{\text{BCS}}$ (5.11) enthalten ist. Das Transformationsgesetz für die Vernichtungsoperatoren $c_\varkappa$ und $c_{\bar{\varkappa}}$ erhält man, indem man in Gl. (5.12) zu den hermitesch konjugierten Operatoren übergeht. Auf die Beziehungen (5.12) werden wir im Zusammenhang mit dem Quasispin noch einmal zu sprechen kommen.

Die Darstellung der BVT als unitäre Transformation im Fock-Raum hat den Vorteil, daß sie unmittelbar auf einen Ansatz für den HFB-Zustand führt. Setzt man nämlich

$$|\text{HFB}\rangle = \exp S_{\text{op}} |0\rangle, \qquad (5.13)$$

so wird die Vakuumbedingung

$$a_i |\text{HFB}\rangle = e^{S_{\text{op}}} c_i e^{-S_{\text{op}}} |\text{HFB}\rangle \equiv 0 \qquad (5.14)$$

automatisch erfüllt. Außerdem ist $|\text{HFB}\rangle$, was für die Anwendungen bequem ist, auf 1 normiert. Einen Einblick in die Struktur von $|\text{HFB}\rangle$ erhält man, wenn man von der Faktorisierung (5.8) Gebrauch macht. Da die Wirkung von $\exp\{S_{\text{op}}^{(3)}\}$ auf den Vakuumvektor

$$\begin{aligned} \exp\{S_{\text{op}}^{(3)}\} |0\rangle &= \exp\left\{\tfrac{1}{2} (c^+, c) \begin{pmatrix} u_3 & 0 \\ 0 & u_3^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix}\right\} |0\rangle \\ &= \exp\{-\tfrac{1}{2} \operatorname{Spur} u_3\} |0\rangle \end{aligned} \qquad (5.15)$$

nur darin besteht, diesen mit einem komplexen Phasenfaktor vom Betrag 1 (wegen $u_3^+ = -u_3$) zu multiplizieren, bekommen wir

$$|\,\mathrm{HFB}\rangle = \exp\{S_{\mathrm{op}}^{(1)}\}\exp\{S_{\mathrm{op}}^{\mathrm{BCS}}\}\,|\,0\rangle\,. \tag{5.16}$$

Der HFB-Zustand hängt also explizit nur von den beiden ersten Faktoren der BM-Zerlegung ab. Hierdurch wird die Tatsache erklärt, daß durch das Variationsverfahren der HFB-Theorie dementsprechend nur die beiden ersten Transformationen eindeutig festgelegt werden, während die dritte, die sich als Basistransformation der Quasipartikel interpretieren läßt, völlig frei bleibt. Die Lösung der aus dem Variationsprinzip folgenden Euler-Lagrangeschen Gleichungen garantiert, daß die Terme H_{20} und H_{02} des Quasiteilchen-Hamilton-Operators verschwinden. Über die beiden ersten Transformationen ist damit verfügt. Die dritte wird in sinnvoller Weise dazu verwendet, den Einteilchenoperator H_{11} zu diagonalisieren (DIETRICH, MANG und PRADAL [9]). Hierbei bezeichnet H_{mn}, wie in der Literatur allgemein üblich, eine Linearkombination von Produkten aus m Quasipartikelerzeugungs- und n Quasipartikelvernichtungsoperatoren in Normalordnung. Die vollständige Lösung der HFB-Gleichungen [2], bei deren Berechnung die BM-Faktorisierung auch in numerischer Hinsicht [10] eine Rolle spielt, legt die gesamte BVT fest.

Den BCS-Anteil $\exp\{S_{\mathrm{op}}^{\mathrm{BCS}}\}$ in $|\,\mathrm{HFB}\rangle$ können wir noch auf die in der Literatur übliche konventionelle Form bringen. Hierzu erweist sich das Konzept des „elementaren Quasispins“ [15, 16] als grundlegend. Die Quasispinoperatoren sind definiert durch

$$\sigma_+^\varkappa = c_\varkappa^+\, c_{\bar\varkappa}^+ \qquad \sigma_-^\varkappa \equiv (\sigma_+)^+ = c_{\bar\varkappa}\, c_\varkappa$$
$$\sigma_3^\varkappa = \tfrac{1}{2}\,(c_\varkappa^+\, c_\varkappa + c_{\bar\varkappa}^+\, c_{\bar\varkappa} - 1)\,,\ (\sigma_3^\varkappa)^+ = \sigma_3^\varkappa \tag{5.17}$$

und genügen den Vertauschungsrelationen

$$[\sigma_+^\varkappa\,,\sigma_-^\varkappa] = 2\,\sigma_3^\varkappa, \qquad [\sigma_3^\varkappa\,,\sigma_\pm^\varkappa] = \pm\,\sigma_\pm^\varkappa\,. \tag{5.18}$$

Sie bilden eine abgeschlossene Algebra, die isomorph zur Drehimpulsalgebra, d. h. zur Lie-Algebra der Drehgruppe $\mathfrak{O}(3)$ ist. Aus den Eigenwerten von $\sigma_3{}^\varkappa$ entnimmt man, daß die Operatoren (5.17) eine Spin $\frac{1}{2}$-Darstellung im Fock-Raum realisieren; daher die Bezeichnung „elementarer“ Quasispin. Jedem Paar von Zuständen $(\varkappa, \bar\varkappa)$ ist ein solcher Quasispin zugeordnet. Von entscheidender Bedeutung für die Umformung von

$$\exp\{S_{\mathrm{op}}^{\mathrm{BCS}}\} = \prod_{\varkappa=1}^{p} \exp\{\alpha_\varkappa(\sigma_+^\varkappa - \sigma_-^\varkappa)\} \tag{5.19}$$

ist nun der für die Drehgruppe und ihre Darstellungen gültige Zerlegungssatz

$$e^{\alpha(J_+ - J_-)} = e^{J_+ \operatorname{tg}\alpha}\, e^{-J_- \sin\alpha\cos\alpha}\, e^{-J_3 \log\cos^2\alpha}\,, \tag{5.20}$$

dessen Beweis im Anhang durchgeführt wird. Dieser Satz läßt sich auf jeden Faktor in (5.19) separat anwenden, und wir erhalten wegen der Vertauschbarkeit der zu verschiedenen $(\varkappa, \bar\varkappa)$ gehörigen Quasispinoperatoren insgesamt

$$\exp\{S_{\mathrm{op}}^{\mathrm{BCS}}\} = \exp\left\{\sum_{\varkappa=1}^{p}\sigma_+^\varkappa \operatorname{tg}\alpha_\varkappa\right\}\exp\left\{-\sum_{\varkappa=1}^{p}\sigma_-^\varkappa \sin\alpha_\varkappa\cos\alpha_\varkappa\right\}\exp\left\{-\sum_{\varkappa=1}^{p}\sigma_3^\varkappa \log\cos^2\alpha_\varkappa\right\}. \tag{5.21}$$

Setzt man dieses Ergebnis, welches in [17] zur Untersuchung der Struktur der BCS-Theorie an Hand des „degenerate model“ verwendet wurde, in den Ausdruck (5.16) für $|\,\mathrm{HFB}\rangle$ ein und berücksichtigt man bei der sukzessiven Anwendung der einzelnen Faktoren auf den Vakuumzustand, daß

$$\sigma_3^\varkappa\,|\,0\rangle = -\tfrac{1}{2}\,|\,0\rangle \quad \text{und} \quad \sigma_-^\varkappa\,|\,0\rangle = 0 \tag{5.22}$$

ist, so ergibt sich

$$|\,\mathrm{HFB}\rangle = \left(\prod_{\varkappa=1}^{p}\cos\alpha_\varkappa\right) \cdot \exp\{S_{\mathrm{op}}^{(1)}\}\exp\left\{\sum_{\varkappa=1}^{p}\sigma_+^\varkappa \operatorname{tg}\alpha_\varkappa\right\}|\,0\rangle\,. \tag{5.23}$$

Wird der BCS-Operator als Produkt über $\varkappa$ geschrieben und für die Exponentialfunktion die bekannte Reihenentwicklung benutzt, folgt schließlich

$$|\,\mathrm{HFB}\rangle = \exp\{S_{\mathrm{op}}^{(1)}\}\prod_{\varkappa=1}^{p}(\cos\alpha_\varkappa + c_\varkappa^+\, c_{\bar\varkappa}^+ \sin\alpha_\varkappa)\,|\,0\rangle \tag{5.24}$$

in der gewohnten BCS-Form [9]. Gleichung (5.24) macht noch einmal deutlich, worin die Erweiterung von HF und BCS besteht: Durch das Variationsprinzip werden die Parameter $\alpha_\varkappa$ *und* die Einteilchenzustände

$$b_\varkappa^+ = \exp\{S_{\mathrm{op}}^{(1)}\}\, c_\varkappa^+\, \exp\{-S_{\mathrm{op}}^{(1)}\} = \sum_\alpha (e^{u_1})_{\alpha\varkappa}\, c_\alpha^+\,,$$
$$b_{\bar\varkappa}^+ = \exp\{S_{\mathrm{op}}^{(1)}\}\, c_{\bar\varkappa}^+\, \exp\{-S_{\mathrm{op}}^{(1)}\} = \sum_\alpha (e^{u_1})_{\alpha\bar\varkappa}\, c_\alpha^+ \tag{5.25}$$

in einem einheitlichen selbstkonsistenten Verfahren bestimmt. Da (5.23) bzw. (5.24) eine Überlagerung von Zuständen mit gerader Teilchenzahl darstellt, können mit (5.24) nur Teilchensysteme mit gerader Teilchenzahl beschrieben werden. Die Beschränkung auf BVT mit Determinante $+1$ schließt also den sogen. „blocking effect", der zur Beschreibung ungerader Kerne notwendig wäre, aus.

Bezieht man die zur Formulierung der HFB-Theorie relevanten Dichtematrizen ϱ und $\varkappa$ (Paarungstensor) auf die Einteilchenbasis, welche durch die Erzeugungsoperatoren b^+ in (5.25) definiert ist, so nehmen diese gleichzeitig ihre Normalformen an. Man überzeugt sich leicht davon, daß die Einteilchendichte ϱ diagonal ist, während der antisymmetrische Paarungstensor $\varkappa$ in eine zur Matrix α in Gl. (4.4) analoge Form übergeht. Dieses wichtige Resultat bildet in der Arbeit von BM [8] die Grundlage bzw. die Ausgangsbasis für den Beweis der BM-Faktorisierung (mit ϱ und $\varkappa$ wird die sogen. verallgemeinerte Dichtematrix $\mathcal{R}$ definiert, deren Eigenvektoren unmittelbar durch die Spaltenvektoren der BVT-Matrix gegeben sind). Im Gegensatz zu BM folgt aus unserer Ableitung, daß die Normalform von $\varkappa$ reell ist [vergleiche hierzu die Bemerkung im Anschluß an Gl. (4.4)]. Damit haben wir sämtliche Ergebnisse von BM [8] verifiziert.

Die spezielle BVT in Gl. (5.12) läßt sich, das sei vollständigkeitshalber abschließend erwähnt, auch im Rahmen des Quasispinformalismus diskutieren [16, 17]. Hierzu bemerken wir, daß die Gesamtheit der Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned}
&[\sigma_+^\varkappa, c_\varkappa^+] = 0\,, \quad [\sigma_-^\varkappa, c_\varkappa^+] = c_{\bar\varkappa},\\
&[\sigma_+^\varkappa, c_{\bar\varkappa}] = c_\varkappa^+ \; [\sigma_-^\varkappa, c_{\bar\varkappa}] = 0\,, \qquad (5.26)\\
&[\sigma_3^\varkappa, c_\varkappa^+] = \tfrac{1}{2} c_\varkappa^+, \quad [\sigma_3^\varkappa, c_{\bar\varkappa}] = -\tfrac{1}{2} c_{\bar\varkappa},
\end{aligned}$$

einen irreduziblen (sphärischen) Tensoroperator $\mathcal{T}^{(\frac{1}{2})}$ der Stufe $\frac{1}{2}$ definiert, dessen Komponenten

$$\mathcal{T}^{(\frac{1}{2})}_{+\frac{1}{2}} = c_\varkappa^+ \quad \text{und} \quad \mathcal{T}^{(\frac{1}{2})}_{-\frac{1}{2}} = c_{\bar\varkappa} \qquad (5.27)$$

in charakteristischer Weise aus den Operatoren $c_\varkappa^+$ und $c_{\bar\varkappa}$ gebildet werden. Auf Grund dieser Tatsache ist das Transformationsverhalten dieser Operatoren eindeutig festgelegt: Sie transformieren sich wie die Komponenten eines Spinors gemäß der $D^{(\frac{1}{2})}$-Darstellung der [zur $\mathfrak{D}(3)$ isomorphen] Quasispingruppe. Da die spezielle BVT

$$\begin{aligned}
&\exp\{\alpha_\varkappa(\sigma_+^\varkappa - \sigma_-^\varkappa)\}\, c_\varkappa^+ \exp\{-\alpha_\varkappa(\sigma_+^\varkappa - \sigma_-^\varkappa)\}\\
&\quad \equiv \exp\{2\,i\,\alpha_\varkappa\,\sigma_2^\varkappa\}\, c_\varkappa^+ \exp\{-2\,i\,\alpha_\varkappa\,\sigma_2^\varkappa\} \qquad (5.28)
\end{aligned}$$

eine Drehung um die 2-Achse bedeutet, braucht man sich nur die entsprechende $D^{(\frac{1}{2})}$-Matrix zu verschaffen (die in diesem Fall besonders einfach ist), um die für die BCS-Theorie grundlegenden Gln. (5.12) zu erhalten.

Anhang

Beweis des Zerlegungssatzes (5.20)

Zunächst werden einige Vertauschungsrelationen (VR) der Form $[A, \exp B]$ für die Drehimpulsoperatoren J_+, J_- und J_3 abgeleitet, die zum Beweis des Satzes benötigt werden. Genügen die Operatoren A und B den Voraussetzungen

$$[A,B] = C; \quad [C,B] = D; \quad [D,B] = 0\,, \qquad (A.1)$$

so folgt daraus für den Kommutator der Operatoren A und B^n:

$$[A, B^n] = \frac{n(n-1)}{2} B^{n-2} D + n B^{n-1} C\,. \qquad (A.2)$$

Für $n=1$ ist diese Beziehung trivial. Man beweist sie durch Induktion über n. Mit Hilfe der Formel (A.2) läßt sich leicht ein Ausdruck für die VR von A mit dem Operator $\exp\{\alpha B\}$, wobei unter α eine beliebige reelle Zahl zu verstehen ist, ableiten:

$$[A, e^{\alpha B}] = e^{\alpha B}(\tfrac{1}{2}\alpha^2 D + \alpha C)\,. \qquad (A.3)$$

Schieben wir den Operator $\exp\{\alpha B\}$ nach rechts durch, so folgt unter Anwendung von

$$[C, e^{\alpha B}] = \alpha\, e^{\alpha B} D = \alpha D\, e^{\alpha B} \qquad (A.4)$$

für (A.3) die äquivalente Beziehung

$$[A, e^{\alpha B}] = (-\tfrac{1}{2}\alpha^2 D + \alpha C)\, e^{\alpha B}\,. \qquad (A.5)$$

Da die Drehimpulsoperatoren die Voraussetzungen in (A.1) erfüllen, lassen sich die Formeln (A.3) und (A.5) anwenden:

$$[e^{\alpha J_+}, J_-] = e^{\alpha J_+}(\alpha^2 J_+ + 2\,\alpha J_3)\,, \qquad (A.6)$$

$$[e^{\alpha J_+}, J_-] = (-\alpha^2 J_+ + 2\,\alpha J_3)\, e^{J_+}, \qquad (A.7)$$

$$[e^{\alpha J_+}, J_3] = -\alpha J_+\, e^{\alpha J_+}\,. \qquad (A.8)$$

Zu den VR zwischen den Operatoren $\exp\{J_-\}$, J_+ und J_3 gelangt man, indem man in (A.6) – (A.8) zu den hermitesch-konjugierten Operatoren übergeht $(J_+{}^+ = J_-)$ und dabei die Hermizität von J_3 berücksichtigt.

Nach diesen Vorbereitungen kommen wir zum Beweis des Theorems. Der Operator

$$U(\alpha) = e^{\alpha(J_+ - J_-)}\,, \qquad (A.9)$$

den wir als eine Funktion des reellen Parameters α auffassen, ist eindeutig bestimmt durch die Differentialgleichung mit der Anfangsbedingung:

$$U'(\alpha) = (J_+ - J_-)\, U(\alpha); \quad U(\alpha = 0) = 1. \tag{A.10}$$

Zur Faktorisierung von $U(\alpha)$ machen wir den Ansatz

$$\bar{U}(\alpha) = e^{f(\alpha) J_+}\, e^{g(\alpha) J_-}\, e^{h(\alpha) J_3}. \tag{A.11}$$

Falls wir die Funktionen $f(\alpha)$, $g(\alpha)$ und $h(\alpha)$ so bestimmen können, daß sich für $\bar{U}(\alpha)$ die Differentialgleichung (A.10) mit der Anfangsbedingung $\bar{U}(\alpha = 0) = 1$ ergibt, so wäre dann auf Grund des Eindeutigkeitssatzes für Lösungen gewöhnlicher Differentialgleichungen die Identität $U(\alpha) \equiv \bar{U}(\alpha)$ bewiesen. Nach einer längeren Rechnung, bei der auf die Reihenfolge der Operatoren [es handelt sich bei (A.9) und (A.11) um operatorwertige Funktionen] zu achten ist und bei der die VR (A.6) – (A.8) verwendet werden, erhalten wir für die erste Ableitung von $\bar{U}(\alpha)$

$$\begin{aligned} \bar{U}'(\alpha) &= \{f' - f^2(g' + h' g) - h' f\}\, J_+ \bar{U}(\alpha) \\ &+ (g' + h' g)\, J_- \bar{U}(\alpha) + \{2 f (g' + h' g) + h'\} J_3 \bar{U}(\alpha). \end{aligned} \tag{A.12}$$

Der Vergleich mit (A.10) führt auf das Differentialgleichungssystem

$$\begin{gathered} f' - f^2(g' + h' g) - h' f = 1, \\ g' + h' g = -1, \qquad 2 f (g' + h' g) + h' = 0 \end{gathered} \tag{A.13}$$

für die gesuchten Funktionen f, g und h. Die allgemeinen Lösungen lassen sich angeben:

$$\begin{aligned} f(\alpha) &= \operatorname{tg}(\alpha + \alpha_1), \\ g(\alpha) &= c \cos^2 \alpha - \sin \alpha \cos \alpha, \\ h(\alpha) &= -\log(b \cos^2 \alpha); \end{aligned} \tag{A.14}$$

α_1, b, c sind Integrationskonstanten. Die Anfangsbedingung $\bar{U}(\alpha = 0)$, für die

$$f(\alpha = 0) = g(\alpha = 0) = h(\alpha = 0) = 0 \tag{A.15}$$

hinreichend ist, kann erfüllt werden, wenn man

$$\alpha_1 = 0; \quad c = 0 \quad \text{und} \quad b = 1 \tag{A.16}$$

setzt. Damit haben wir den für die Drehgruppe und ihre Darstellungen gültigen Zerlegungssatz

$$e^{\alpha(J_+ - J_-)} = e^{J_+ \operatorname{tg} \alpha}\, e^{-J_- \sin \alpha \cos \alpha}\, e^{-J_3 \log \cos^2 \alpha} \tag{A.17}$$

vollständig bewiesen.

Herrn Prof. Dr. K. Bleuler, Herrn Prof. Dr. D. Schütte und ihren Mitarbeitern, insbesondere Herrn Dr. A. Reetz, sei für zahlreiche Diskussionen herzlichst gedankt.

[1] J. G. Valatin, Phys. Rev. **122**, 1012 [1961].
[2] M. Baranger, Cargèse Lectures in Theoretical Physics 1962, W. A. Benjamin Inc., New York 1963.
[3] M. Baranger, Phys. Rev. **130**, 1244 [1963].
[4] H. H. Wolter, A. Faessler, and P. U. Sauer, Nucl. Phys. **A 116**, 145 [1968].
[5] A. Faessler, P. U. Sauer, and M. M. Stingl, Z. Phys. **212**, 1 [1968].
[6] R. Beck, H. J. Mang, and P. Ring, Z. Phys. **231**, 10 und 26 [1971].
[7] H. H. Wolter, A. Faessler, and P. U. Sauer, Nucl. Phys. **A 167**, 108 [1971].
[8] C. Bloch and A. Messiah, Nucl. Phys. **39**, 95 [1962].
[9] K. Dietrich, H. J. Mang, and J. Pradal, Z. Phys. **190**, 357 [1966].
[10] D. Schütte, Nucl. Phys. **A 161**, 73 [1971].
[11] R. Hermann, Lie Groups for Physicists, W. A. Benjamin Inc., New York 1966.
[12] S. Helgason, Differential Geometry and Symmetric Spaces, Academic Press, New York 1962.
[13] A. Reetz, Preprint Inst. f. Theor. Kernphysik der Universität Bonn.
[14] B. Zumino, J. Math. Phys. **3**, 1055 [1962].
[15] R. D. Lawson and M. H. Macfarlane, Nucl. Phys. **66**, 80 [1965].
[16] M. H. Macfarlane, Lectures in Theoretical Physics, Vol. VIII C, Boulder 1966.
[17] H. G. Becker, Diplomarbeit Inst. f. Theor. Kernphysik der Universität Bonn, unveröffentlicht.
[18] H. G. Becker, Preprint Inst. f. Theor. Kernphysik der Universität Bonn.
[19] H. J. Lipkin, Lie Groups for Pedestrians, 2nd ed., North-Holland Publishing Comp., Amsterdam 1966.