

Eine Methode zur Lösung
beliebiger bosonischer und fermionischer
Vielteilchensysteme

Inaugural-Dissertation
zur
Erlangung des Doktorgrades
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Universität zu Köln

vorgelegt von
Stefan Heinze
aus Köln

Köln 2008

Berichtersteller:

Prof. Dr. Jan Jolie
Prof. Dr. Andreas Zilges

Tag der mündlichen Prüfung: 18.04.2008

Abstract

In the present dissertation different classes of quantum mechanical many body systems are investigated numerically and analytically considering symmetries in the formalism of second quantization. All algebraic ideas which are necessary to develop a numerical computer code which is able to calculate the eigenvalues and eigenstates of a very general quantum many body hamiltonian are explained. The two most crucial problems are branching rules and the calculation of isoscalar factors. Methods are presented to solve these problems numerically for the general case. The most important point is the calculation of isoscalar factors with a nonrecursive method and without any numerical error. All presented ideas were implemented in the program „ArbModel“.

With this very flexible computer code at hand, systems of identical particles were investigated in general. General formulas were derived for the presence of dynamical symmetry. Weaker conditions are necessary for the conservation of the so called seniority quantum number. This situation is called partial dynamical symmetry. These conditions were investigated in detail. Although other authors have previously investigated this problem, some new cases were discovered and new conditions could be derived. Most surprisingly, cases were found in which the seniority quantum number is generally broken except for some specific states. These states are solvable and formulae for their energies are presented. All analytically derived results were checked with „ArbModel“.

As further applications for the code, two selected models with distinguishable particles are investigated. The predictions of a very new theory, which connects quantum phase transitions and exceptional points, are verified with the sd-Interacting-Boson-Model 1 (sd-IBM1) and a very high particle number. For the Interacting-Boson-Fermion-Model a selected dynamical symmetry was investigated. The branching rules for this Bose-Fermi-Symmetry were calculated in detail and selection rules for M1-transitions were derived. Again, all analytic results were checked numerically.

Since „ArbModel“ verifies all analytic results of this work, the proof for correctness of this code was also given.

Kurzzusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit werden mehrere Klassen quantenmechanischer Vielteilchensysteme im Formalismus der zweiten Quantisierung aus dem Blickpunkt von Symmetrien sowohl numerisch als auch analytisch untersucht. Um die numerischen Berechnungen durchführen zu können, wurde ein Computerprogramm mit Namen „ArbModel“ mit den entsprechenden Fähigkeiten entwickelt. Hierbei wurde großen Wert auf Allgemeinheit gelegt, so dass Hamiltonians zu einer sehr großen Anzahl unterschiedlichster Modelle aufgestellt und diagonalisiert werden können. Alle Ideen, die für die Programmierung eines derartigen Programms notwendig sind, wurden erklärt und in dem numerischen Code verwirklicht.

Mit diesem Programm zur Verfügung wurden Vielteilchensysteme, welche lediglich aus identischen Teilchen bestehen, im Allgemeinen untersucht. Es wurden allgemeine Bedingungen für das Vorhandensein einer dynamischen Symmetrie hergeleitet. Bedingungen für die schwächere Forderung nach der Erhaltung der sog. Senioritätsquantenzahl wurden ebenfalls im Detail untersucht. Obwohl derartige Untersuchungen in der Vergangenheit bereits stattgefunden haben, konnten neue Fälle gefunden und neue Bedingungen aufgestellt werden. Als überraschendes Ergebnis wurden Beispiele entdeckt, für welche die Seniorität im Allgemeinen gebrochen, für ein paar spezifische Zustände jedoch erhalten ist. Diese Zustände sind lösbar und entsprechende Formeln für ihre Anregungsenergien wurden angegeben. Alle analytischen Ergebnisse wurden mit „ArbModel“ überprüft.

Als weitere Anwendungen für den numerischen Code wurden die Vorhersagen einer sehr neuen Theorie, welche Quantenphasenübergänge mit sog. Verzweigungspunkten in Verbindung bringt, verifiziert. Hierfür wurde das sd-Interacting-Boson-Model 1 (sd-IBM1) mit einer sehr hohen Teilchenzahl verwendet. Außerdem wurde eine bestimmte dynamische Symmetrie des Interacting-Boson-Fermion-Models untersucht. Verzweigungsregeln für diese Bose-Fermi-Symmetrie wurden aufgestellt, sowie Auswahlregeln für M1-Übergänge abgeleitet. Auch hier verifiziert der numerische Code alle analytischen Ergebnisse.

Da „ArbModel“ alle analytischen Ergebnisse dieser Arbeit reproduziert, wurde somit auch der Beweis für Korrektheit dieses Programms gegeben.

Inhaltsverzeichnis

Abstract	3
Kurzzusammenfassung	5
1 Einleitung	1
2 Das quantenmechanische Vielteilchenproblem	3
2.1 Die Austauschsymmetrie und die zweite Quantisierung	4
2.2 Teilchenzahlerhaltung und die $U(n)$ -Symmetrie	6
2.3 Das M -Schema und die $SO(2)$ -Symmetrie	7
2.4 Das J -Schema und die $SU(2)$ -Symmetrie	8
2.5 Quantenzahlen der Vielteilchenbasis	10
2.5.1 Symmetrien und Quantenzahlen identischer Teilchen	11
2.5.2 Das Finden der Quantenzahlen für identische Teilchen	14
2.5.3 Koppeln der Teilsysteme	18
2.6 Die Berechnung von Matrixelementen	20
2.7 Das CFP-Problem	21
2.8 Zustände mit guten Quantenzahlen N und M	26
2.8.1 Fermionen	27
2.8.2 Bosonen	28
2.9 Matrixelemente ohne numerische Fehler	28
2.10 Dünn besetzte Matrizen	29
2.11 Das Programm „ArbModel“	30
3 Systeme identischer Teilchen	31
3.1 Die Multiplizität der Reduktionen $USp(n) \supset SU(2)$ und $SO(n) \supset SO(3)$	32
3.2 Die Casimiroperatoren der Gruppenkette	33
3.3 Dynamische Symmetrien identischer Teilchen	35
3.3.1 Dynamische Symmetrien für Bosonen	35
3.3.2 Dynamische Symmetrien für Fermionen	40
3.4 Seniorität erhaltende Wechselwirkungen	44
3.4.1 Hamiltonians mit guter Seniorität	44
3.4.2 Partielle Erhaltung der Seniorität	49
3.4.3 Brechung der Seniorität nach einem Muster	55
3.5 Bose-Einstein-Kondensate	56
4 Systeme mit unterscheidbaren Teilchen	61
4.1 Quantenphasenübergänge	61
4.1.1 Das sb-Bosonen-System	62
4.1.2 Das sd-Interacting-Boson-Model 1	63
4.1.3 Niveauabstoßungen auf der reellen Achse	68
4.1.4 Verzweigungspunkte des Quantenhamiltonians	71

4.1.5	Coulomb-Analogie für Verzweigungspunkte	74
4.2	Das sd-Interacting-Boson-Fermion-Fermion-Model 1	78
4.2.1	Die Gruppenkette und der Hamiltonian	79
4.2.2	Der Verzweigungsbaum für $N_b = 4$	80
4.2.3	$M1$ -Übergänge	82
4.2.4	Vollständige Niveaustuktur für $N_b = 4, N_f = 2$	84
5	Zusammenfassung und Ausblick	87
A	Manual for the numerical code	91
A.1	What the code can do	91
A.2	A simple example: sd-IBM1 calculations	91
A.3	Input file reference	93
B	Die Berechnung von 3j-, 6j- und 9j-Symbolen	99
C	Nebenrechnungen	101
C.1	Zweikörperterme identischer Teilchen	101
C.2	Allgemeine Zweikörperterme	103
C.3	Der Kommutator $[\hat{V}^{(J)}, \hat{V}^{(0)}]$	104
C.4	Multiplizitäten	106
C.4.1	$C(3, 0, j)$ und $C(3, 1, j)$ für Bosonen	107
C.4.2	$C(3, j, j)$ für Fermionen	107
C.4.3	$C(3, j, j)$ für Bosonen	110
C.4.4	Die Multiplizität der Reduktion $SO(2j + 1) \supset SO(3)$ numerisch	111
C.5	Verzweigungsregeln	112
C.5.1	$U^B(6) \otimes U^F(4) \supset SO^B(6) \otimes SU^F(4)$	112
C.5.2	$SO^B(6) \otimes SU^F(4) \supset SU^{BF}(4)$	113
C.5.3	$SU^{BF}(4) \supset USp^{BF}(4)$	114
C.5.4	$USp^{BF}(4) \supset SU^{BF}(2)$	115
D	Formelsammlung und Konventionen	119
D.1	Erzeuger- und Vernichterooperatoren	119
D.2	Reduzierte Matrixelemente	120
D.3	Zweiteilchenoperatoren	120
D.4	Drehimpulskopplung	121
D.5	CFPs	122
D.6	Sonstiges	123
E	Eigene Veröffentlichungen	125
	Erklärung	133
	Lebenslauf	135

Abbildungsverzeichnis

3.1	Senioritätserhaltung für h-Bosonen	48
3.2	Experimentelle und berechnete Zustände von ^{94}Ru und ^{96}Pd	53
3.3	Phasendiagramme von Bose-Einstein-Kondensaten mit $j > 2$	59
3.4	Energieniveaus von Bose-Einstein-Kondensaten mit $j = 4$	60
4.1	Die Niveaudynamik für $SU(3) \rightarrow U(5)$	69
4.2	Die Niveaudynamik für $O(6) \rightarrow U(5)$	70
4.3	Die Niveaudynamik für $O(2l + 2) \rightarrow U(2l + 1)$	71
4.4	Verzweigungspunkte am Beispiel des Zwei-Niveau-Systems	72
4.5	$C_i(\lambda)$ für $N = 100$	75
4.6	$C_x(\lambda)$ für $N = 100, 500, 1000$	76
4.7	$C_x(\lambda)$ für $N = 10^5$	77
4.8	Vollständige $U^B(6) \times U^F(4)$ Niveaustuktur	85

Kapitel 1

Einleitung

Das Vielkörperproblem ist für nahezu alle Bereiche der Physik von großer Bedeutung. Darunter fällt die Hadronen- und Kernphysik ebenso wie die Atom-, Molekül- und Festkörperphysik. In dieser Arbeit werden quantenmechanische Vielteilchensysteme im Formalismus der zweiten Quantisierung untersucht. Besonderes Augenmerk wird hierbei auf die Auswirkungen von Symmetrien gelegt. Symmetrien bilden die Grundlage zum Verständnis von Regularitäten, die in den Spektren, Wellenfunktionen oder Übergangsstärken von Vielteilchensystemen beobachtet werden. Auch für die Elementarteilchenphysik spielen Symmetrien für das Verständnis der beobachteten Teilchen eine zentrale Rolle. Daher kann die Relevanz des Verständnisses von Auswirkungen evtl. vorhandener Symmetrien nicht unterschätzt werden. Da die Anwendung algebraischer Strukturen in der Physik derart vielfältig ist, kann das Thema unmöglich erschöpfend behandelt werden. Entsprechend muss eine Auswahl getroffen werden.

Atomkerne eignen sich besonders gut zum Studium von Symmetrien quantenmechanischer Vielteilchensysteme, da diese aus einer endlichen aber nicht zu kleinen Anzahl stark wechselwirkender Teilchen bestehen. Da die Wechselwirkung der Nukleonen untereinander viel stärker ist als die Wechselwirkung des Kerns mit der Atomhülle, kann der Kern als abgeschlossenes Quantensystem betrachtet werden. Des weiteren finden sich in der Natur alle Teilchenzahlen bis zu etwa 240 (Uran 238 ist das schwerste natürlich vorkommende Isotop) und im Labor lassen sich Kerne mit bis zu etwa 300 Nukleonen erzeugen. Es stehen also stark wechselwirkende, abgeschlossene Quantensysteme mit beliebigen Teilchenzahlen bis zu 300 zur Verfügung. Um die Eigenschaften der Kerne zu berechnen, können unterschiedlichste Methoden verwendet werden. Evtl. vorhandene Symmetrien können es ermöglichen, analytische Formeln für z.B. die Anregungsenergien zu finden. Meistens jedoch ist man auf numerische Methoden angewiesen. Doch auch dann spielen Symmetrien eine wichtige Rolle, da sie die Berechnung vereinfachen oder beschleunigen können und die Eigenvektoren bezüglich einer Basis ausgedrückt werden können, die zu einer sog. dynamischen Symmetrie gehört. Für die physikalische Interpretation der berechneten Wellenfunktion spielen dynamische Symmetrien eine große Rolle. Oftmals ist eine Symmetriebrechung nur leicht. Die starke Kraft z.B. unterscheidet sich nur wenig für Protonen und Neutronen (dies führt zum sog. Isospin). Des weiteren ist die sog. Paarungswechselwirkung stark, was zur Senioritätsquantenzahl führt. Die starke Paarungskraft rechtfertigt für tief liegende Anregungsenergien ebenso die Behandlung eines Fermionenpaars als Boson, denn zwei identische Fermionen können nur zu ganzzahligem Spin koppeln. Dies ist wiederum die Folge einer Symmetrie. Es handelt sich hierbei um die Austauschsymmetrie identischer Fermionen. Dies führt zum sogenannten Interacting-Boson-Model (IBM) [1]. Solche und ähnliche Argumentationsketten, bei denen Symmetrieargumente im mehreren Schritten auftauchen, sind in der Physik keine Seltenheit.

Aufgrund der Komplexität des Problems bzw. der Anzahl der Teilchen können numerische Berechnungen normalerweise nicht von Hand durchgeführt werden. Selbst für den Computer ist dies für die meisten Kerne nur unter der Verwendung von Näherungen möglich. Selbst die Behandlung eines Protons oder Neutrons als elementares Fermion ohne innere Struktur ist genau

genommen eine Näherung. Man ist auf Computerprogramme angewiesen, die das quantenmechanische Vielteilchenproblem für Fermionen-, Bosonen- und Mischsysteme lösen können. Es existieren mehrere Computerprogramme sowohl für fermionische Modelle wie z.B. das Schalenmodell der Atomkerne (Computercode Oxbash [2, 3]) als auch für das IBM (Programmpaket Phint [4]). Die Flexibilität dieser Programme ist jedoch sehr eingeschränkt. Beispielsweise ist es dem Benutzer nicht möglich, mit Phint die Anregungsenergien eines Modells zu berechnen, welches z.B. zwei g-Bosonen mit einbezieht. Um Vielteilchensysteme im Allgemeinen zu untersuchen, ist ein Programm wünschenswert, welches dem Benutzer eine möglichst große Freiheit bei der Festlegung der verwendeten Teilchensorten und des Hamiltonians lässt.

Der erste Teil dieser Arbeit befasst sich mit der Entwicklung eines solchen Programms. Bei der Programmierung wurde großen Wert auf Allgemeinheit gelegt, so dass mit diesem Code Rechnungen zu sehr unterschiedlichen Modellen durchgeführt werden können. Zu den einfachsten Modellen gehören solche, die nur aus einer Teilchensorte bestehen. Diese Modelle werden im zweiten Teil behandelt. Trotz ihrer Einfachheit ist es im Allgemeinen nicht möglich, die Eigenwerte eines entsprechenden Hamiltonians ohne numerisches Diagonalisieren anzugeben. Wann immer sich der Hamiltonian als Linearkombination von paarweise vertauschenden Casimiroperatoren einer dynamischen Symmetrie schreiben lässt, ist dies jedoch möglich. Es existieren also (abhängig vom Teilchenspin) eine oder mehrere Bedingungen, bei denen das System in einer dynamischen Symmetrie vorliegt. Diese dynamischen Symmetrien bilden eine wichtige Grundlage für den numerischen Code. Außerdem können die numerischen Ergebnisse mittels der dynamischen Symmetrien überprüft werden. Systeme aus identischen Teilchen sind jedoch nicht nur aus rein theoretischer Sicht interessant. Im Schalenmodell der Atomhülle sowie des Atomkerns können sich mehrere Fermionen in der gleichen Schale befinden und müssen als identische Teilchen behandelt werden. Das gleiche Argument gilt für Modelle, die Fermionenpaare als Bosonen behandeln (z.B. sd-IBM1). Eine weitere Anwendung sind Bose-Einstein-Kondensate (siehe Kapitel 3.5). Liegt das System nicht in einer dynamischen Symmetrie vor, so können immer noch einzelne Quantenzahlen erhalten sein. Man spricht dann von einer partiellen dynamischen Symmetrie (siehe Kapitel 3.4). Noch schwächer ist die Forderung nach der Erhaltung einer Quantenzahl für nur einen oder ein paar Zuständen. Dieser besonders interessante Fall tritt für identische Fermionen mit Spin $j = 9/2$ sowie für f-Bosonen auf (siehe Kapitel 3.4.2). Die Überprüfung des Programms anhand von Symmetrien identischer Teilchen geht also Hand in Hand mit physikalisch relevanten Ausarbeitungen der entsprechenden Modelle, was zu mehreren Veröffentlichungen geführt hat (siehe Anhang E).

Der dritte Teil behandelt einige Modelle, die mehr als nur eine Teilchensorte enthalten (wie z.B. das sog. sd-IBM1). Während Modelle identischer Teilchen im Kapitel 3 im Allgemeinen beschrieben werden, ist eine vergleichbare Analyse bei mehreren Teilchensorten nicht ohne weiteres möglich. Bei den untersuchten Modellen dieser Art musste daher eine Auswahl getroffen werden. Um die allgemeine Anwendbarkeit des in Kapitel 2 vorgestellten Programms zu unterstreichen, behandelt das Kapitel 4 zwei sehr unterschiedliche Themen. Untersucht werden Quantenphasenübergänge zweiter Ordnung eines bosonischen Systems bestehend aus s-Bosonen sowie einer weiteren bosonischen Teilchensorte mit beliebigem Spin. Derartige Modelle finden in vielen Bereichen Anwendung [1, 5, 6, 7, 8]. Der zweite Schwerpunkt bezieht sich auf eine Bose-Fermi-Symmetrie des Interacting-Boson-Fermion-Modells (kurz IBFM). Es besteht aus einem gewöhnlichen sd-IBM1 mit zusätzlichen Fermionen des Spin $j = 3/2$. Die Anzahl dieser Fermionen kann aufgrund des Pauliprinzipis $N_f = 0, 1, 2, 3, 4$ betragen. Für die leere bzw. voll gefüllte Schale ($N_f = 0$ bzw. $N_f = 4$) entspricht dies einem sd-IBM1. Eine Ausarbeitung für den Fall $N_f = 1$ findet sich z.B. in [5]. Aufgrund einer Art Spiegelsymmetrie an der halb gefüllten Schale ist dies sehr analog zu $N_f = 3$. Daher behandelt Kapitel 4.2 den Fall $N_f = 2$, welcher die reichhaltigsten Symmetriestrukturen liefert. Auch hier wurden alle analytischen Ergebnisse numerisch überprüft.

Kapitel 2

Das quantenmechanische Vielteilchenproblem

Die stationären Zustände eines Quantensystems ergeben sich als Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (2.1)$$

Ganz allgemein kann das quantenmechanische Vielteilchenproblem gelöst werden, indem man sich eine beliebige vollständige Basis $|i\rangle$ wählt, die Hamiltonmatrix $H_{ij} = \langle i|\hat{H}|j\rangle$ berechnet und diagonalisiert. Die Eigenwerte von \hat{H} entsprechen den Anregungsenergien des Systems und die zugehörigen Wellenfunktionen sind die Eigenvektoren. Die Übergangsstärken für z.B. elektrische Quadrupolstrahlung ist dann durch die Matrixelemente des entsprechenden Operators bezüglich zweier Eigenzustände gegeben. Es muss also im Allgemeinen eine unendlich dimensionale Matrix diagonalisiert werden. Für den Computerprogrammierer stellt dies für gewöhnlich ein mehr oder weniger unlösbares Problem dar. Man bräuchte eine allgemeine, gut zu implementierende Methode zum Diagonalisieren unendlich dimensionaler Hamiltonians. Darüber hinaus müssten auch die H_{ij} bekannt sein. Für gewöhnlich beschränkt man in der Praxis die Basis in einer angemessenen Art und Weise, so dass die Matrix eine für den Computer handhabbare Größe annimmt. Hat man z.B. zwei Teilchen in einem Potenzial, so könnte man die Basis auf alle möglichen Produkte zweier gebundener Einteilchenzustände beschränken. Unter der Annahme, dass die Wechselwirkung mit den ungebundenen Zuständen klein ist, verursacht dies nur kleine Fehler. Ist die Wechselwirkung nicht zu vernachlässigen, werden hoch angeregte Zustände nahe des Kontinuums falsch berechnet, tiefliegende Zustände jedoch werden immer noch richtig reproduziert. Da man in der Praxis oft an den tiefsten Anregungen interessiert ist, bietet sich diese Art der Näherung an. Da nur endlich viele gebundene Einteilchenzustände existieren, vereinfacht sich das Problem dadurch erheblich, denn die Dimension des Hamiltonian ist nur noch endlich und nicht mehr unendlich.

Man braucht also ein Computerprogramm, welches als Input in geeigneter Weise die zu verwendende Basis sowie den Hamiltonian erhält und als Output die Eigenwerte und Eigenvektoren zurückgibt. Darüber hinaus sollte es Matrixelemente bezüglich der Eigenvektoren berechnen können, um Übergangsstärken zu beschreiben.

Seien $\Phi_i(\mathbf{r})$ die Basisfunktionen. Dann ist die Hamiltonmatrix gegeben durch

$$H_{ij} = \int \Phi_j^*(\mathbf{r})\hat{H}\Phi_i(\mathbf{r})d\mathbf{r} \quad (2.2)$$

Für frei gewählte $\Phi_i(\mathbf{r})$ gestaltet sich das Anwenden von \hat{H} auf die Basiszustände und das Auswerten der Integrale in einem Computerprogramm in vernünftiger Rechenzeit evtl. als sehr schwierig. Die Rechenzeit spielt hierbei eine große Rolle, denn die Anzahl der Matrixelemente kann in der Praxis 10^{10} bei weitem übersteigen. Bei richtiger Wahl der Basis sind die meisten dieser Matrixelemente jedoch Null.

2.1 Die Austauschsymmetrie und die zweite Quantisierung

Sei \hat{H} der zeitunabhängige Hamiltonian des betrachteten Quantensystems. Eine Gruppe \mathcal{G} von Koordinatentransformationen $G_a r = r'$ definiert einen entsprechenden Satz von Transformationen $T(G_a)$ in Raum der Wellenfunktionen. Wenn der Hamiltonian invariant ist bezüglich aller Transformationen der Gruppe \mathcal{G} , wenn also gilt

$$T(G_a)\hat{H}T^{-1}(G_a) = \hat{H} \quad (2.3)$$

für alle G_a , so ist \mathcal{G} eine Symmetriegruppe des Hamiltonians bzw. des betrachteten Systems. Durch Multiplikation der rechten Seite mit $T(G_a)$ erhält man $T(G_a)\hat{H} = \hat{H}T(G_a)$, also:

$$\left[T(G_a), \hat{H} \right] = 0 \quad (2.4)$$

Der Hamiltonian kommutiert also mit allen Transformationen der Gruppe.

Dies ist z.B. dann der Fall, wenn es sich um mehrere identische Teilchen handelt. In der klassischen Mechanik ist es möglich, innerhalb eines Systems identischer Teilchen zwischen diesen zu unterscheiden. Man kann ein bestimmtes Teilchen auswählen und seinen Weg verfolgen. In der Quantenmechanik wird die Bewegung von Teilchen durch Wellenfunktionen beschrieben, so dass es nicht möglich ist, von einer bestimmten Teilchenbahn zu sprechen. Dies ist das Heisenbergsche Unbestimmtheitsprinzip. In der Quantenmechanik sind identische Teilchen daher ununterscheidbar in dem Sinne, dass man nicht bestimmen kann, welches man gerade gemessen hat. Die mathematische Konsequenz davon ist, dass alle Observablen von Operatoren repräsentiert werden, welche bezüglich der Permutation ihrer Argumente zu unterschiedlichen identischen Teilchen symmetrisch sind. Daher ist der Hamiltonian invariant unter Austausch von Argumenten identischer Teilchen, so dass die Gruppe \mathcal{S}_n der Permutationen eine Symmetriegruppe des Systems ist. Da also der Operator \hat{H} angewendet auf eine Wellenfunktion mit einer bestimmten Austauschsymmetrie (total symmetrisch, antisymmetrisch oder auch gemischt symmetrisch) diese Austauschsymmetrie konserviert, zerfällt die Hamiltonmatrix bei Wahl einer Basis mit guter Austauschsymmetrie in Blöcke. Alle Matrixelemente bezüglich zweier Zustände mit unterschiedlicher Austauschsymmetrie sind Null.

Ein Eigenzustand zu einer irreduziblen Darstellung von \mathcal{S}_n mit einer Dimension d ist d -fach entartet und da \mathcal{S}_n Symmetriegruppe aller Operatoren ist, kann diese Entartung nicht aufgehoben werden. In der Natur sind jedoch nur die beiden eindimensionalen irreduziblen Darstellungen, welche zu total symmetrischen und total antisymmetrischen Zuständen gehören, verwirklicht. Daher braucht die verwendete Basis auch nur diese Zustände zu enthalten. Dies ist keine rein empirische Tatsache, obwohl dies in der Literatur oft so hingestellt wird (z.B. in [9]), wie folgende kurze Argumentationskette zeigt. Alle Zustände sind Eigenzustände der Permutationsoperatoren \hat{P}_{ij} .

$$\hat{P}_{ij}|\Psi\rangle = \lambda_{ij}|\Psi\rangle \quad (2.5)$$

Zweifache Anwendung des gleichen Permutationsoperators liefert wieder den Ausgangszustand.

$$\hat{P}_{ij}\hat{P}_{ij}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle \quad (2.6)$$

Daher gilt $\lambda_{ij}^2 = 1$ und damit $\lambda_{ij} = \pm 1$. Totale Symmetrie bzw. totale Antisymmetrie bedeutet, dass alle Eigenwerte das gleiche Vorzeichen besitzen, denn gemischte Vorzeichen würden gemischt symmetrischen Zuständen entsprechen. Wir zeigen nun, dass diese nicht existieren. Dazu betrachten wir ein System aus drei identischen Teilchen. Die Zustände bezeichnen wir mit $|a, b, c\rangle$. Die Argumente der Wellenfunktion für das n -te Teilchen werden in der Liste der Argumente immer an n -ter Stelle aufgeführt. Wir betrachten den Operator $\hat{P}_{12}\hat{P}_{13}\hat{P}_{12}$.

$$\hat{P}_{12}\hat{P}_{13}\hat{P}_{12}|a, b, c\rangle = \hat{P}_{12}\hat{P}_{13}|b, a, c\rangle = \hat{P}_{12}|c, a, b\rangle = |a, c, b\rangle \quad (2.7)$$

Daher gilt $\hat{P}_{12}\hat{P}_{13}\hat{P}_{12} = \hat{P}_{23}$ und somit $\lambda_{12}\lambda_{13}\lambda_{12} = \lambda_{23}$. Mit $\lambda_{ij} = \pm 1$ folgt dann $\lambda_{13} = \lambda_{23}$. Ganz allgemein gilt

$$\hat{P}_{ij}\hat{P}_{ik}\hat{P}_{ij} = \hat{P}_{jk} \quad (2.8)$$

und daher

$$\lambda_{ik} = \lambda_{jk} \quad (2.9)$$

Iterativ folgt also, dass alle Eigenwerte gleich sind.

Sei \hat{P}_{ij} der Permutationsoperator, der die identischen Teilchen mit den Indizes i und j vertauscht. Für eine symmetrische Wellenfunktion Ψ_S bzw. eine antisymmetrische Wellenfunktion Ψ_A gilt dann:

$$\begin{aligned} \hat{P}_{ij}\Psi_S &= \Psi_S \\ \hat{P}_{ij}\Psi_A &= -\Psi_A \end{aligned} \quad (2.10)$$

Für zwei identische Teilchen mit antisymmetrischer Wellenfunktion ist es nicht möglich, den selben Einteilchenzustand anzunehmen, denn daraus folgt $\Psi_A = -\Psi_A$, also $\Psi_A = 0$. Dies ist das Pauliprinzip. Man bezeichnet Teilchen mit symmetrischer Wellenfunktion (Bose-Einstein-Statistik) als Bosonen und solche mit antisymmetrischer Wellenfunktion (Fermi-Dirac-Statistik) als Fermionen. Da die Indizes identischer Teilchen nicht beobachtbar sind, ist es möglich, die Quantenmechanik ohne sie zu formulieren. Dies nennt man die Besetzungszahldarstellung oder zweite Quantisierung. Der Formalismus der zweiten Quantisierung enthält die fundamentalen Symmetrierelationen bosonischer und fermionischer Wellenfunktionen implizit. Symmetrisierungen und Antisymmetrisierungen sind in allen Ausdrücken der zweiten Quantisierung automatisch vorhanden und müssen nicht erst von Hand hinzugefügt werden. Möglich wird diese Formulierung der Quantenmechanik also durch das Vorhandensein einer Symmetrie:

$$[\hat{H}, \hat{P}_{ij}] = 0 \quad (2.11)$$

Sei x_i der Satz aller Koordinaten eines Teilchen, also z.B. Orts und Spinkoordinaten. Und Φ_j eine orthonormale Einteilchenbasis eines quantenmechanischen Vielteilchenproblems. Dann kann jede Vielteilchenwellenfunktion identischer Bosonen (Fermionen) nach Permanenten (Determinanten) bezüglich der Einteilchenbasis entwickelt werden. Zu jeder Konfiguration $K = (k_1, \dots, k_N)$ der Teilchen (N ist die Anzahl der Teilchen), also zu jeder möglichen Verteilung auf die Einteilchenzustände gibt es einen Entwicklungskoeffizienten C_K . Die k_i sind hierbei die Indizes des Einteilchenzustände. Es gilt also

$$\Psi(x_1, \dots, x_N) = \sum_K \frac{C_K}{\sqrt{N!}} \text{per} \begin{pmatrix} \Phi_{k_1}(x_1) & \cdots & \Phi_{k_N}(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi_{k_1}(x_N) & \cdots & \Phi_{k_N}(x_N) \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

für Bosonen und

$$\Psi(x_1, \dots, x_N) = \sum_K \frac{C_K}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \Phi_{k_1}(x_1) & \cdots & \Phi_{k_N}(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi_{k_1}(x_N) & \cdots & \Phi_{k_N}(x_N) \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

für Fermionen. In der zweiten Quantisierung ordnet man den einzelnen Termen in der Summe neue Namen zu, welche nur noch die Anzahl der sich in den verschiedenen Einteilchenzuständen befindlichen Teilchen enthalten. Diese Anzahl ist $0, \dots, \infty$ für Bosonen und $0, 1$ für Fermionen.

$$|\Psi\rangle = \sum_{n_1+n_2+\dots=N} C_{\underline{n}} |n_1, n_2, \dots\rangle \quad (2.14)$$

mit $\underline{n} = (n_1, n_2, \dots)$. Hierbei ist n_i die Anzahl des Vorkommens des Wertes i in der Konfiguration K (i ist hierbei der Index der Einteilchenzustände). Die Zustände $|n_1, n_2, \dots\rangle$ sind also bezüglich

einer bestimmten Einteilchenbasis definiert. Man definiert nun Operatoren, die ein Teilchen im Basiszustand Φ_j erzeugen bzw. vernichten. Es gilt

$$\begin{aligned} c_j^\dagger |.., n_j, ..\rangle &:= \sqrt{n_j + 1} |.., n_j + 1, ..\rangle \\ c_j |.., n_j, ..\rangle &:= \sqrt{n_j} |.., n_j - 1, ..\rangle \end{aligned} \quad (2.15)$$

für Bosonen und

$$\begin{aligned} c_j^\dagger |.., n_j, ..\rangle &:= (-1)^{\sum_{i < j} n_i} (n_j + 1) |.., n_j + 1, ..\rangle \\ c_j |.., n_j, ..\rangle &:= (-1)^{\sum_{i < j} n_i} n_j |.., n_j - 1, ..\rangle \end{aligned} \quad (2.16)$$

für Fermionen. Für die so definierten Operatoren gelten folgende Kommutator- bzw. Antikommutatorrelationen:

$$\begin{aligned} [c_i, c_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad [c_i, c_j] = 0 \quad [c_i^\dagger, c_j^\dagger] = 0 & \quad \text{für Bosonen} \\ \{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij} \quad \{c_i, c_j\} = 0 \quad \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0 & \quad \text{für Fermionen} \end{aligned} \quad (2.17)$$

Alle Zustände können durch Polynome in den Erzeugeroperatoren angewendet auf das Teilchenvakuum ausgedrückt werden. Für einen N -Teilchenzustand gilt:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \sum_{n_1+n_2+\dots=N} C_{\underline{n}} |n_1, n_2, ..\rangle \\ &= \sum_{n_1+n_2+\dots=N} C_{\underline{n}} \prod_i \frac{1}{\sqrt{n_i!}} (c_i^\dagger)^{n_i} |0\rangle \end{aligned} \quad (2.18)$$

In dem so aufgespannten Raum (dem sog. Fockraum) lassen sich alle linearen Operatoren durch Polynome in den Erzeugern und Vernichtern darstellen. Wir betrachten im Folgenden Hamiltonians, welche die Teilchenzahl erhalten. Für Ein- und Zweiteilchenoperatoren gilt:

$$\hat{O}_1 = \sum_i \hat{o}_i = \sum_{i,j} \langle i | \hat{o} | j \rangle c_i^\dagger c_j = \sum_{i,j} \langle \phi_i | \hat{o} | \phi_j \rangle c_i^\dagger c_j \quad (2.19)$$

$$\hat{O}_2 = \sum_{a \neq b} \hat{o}(a, b) = \sum_{i,j,k,l} \langle i, j | \hat{o} | l, k \rangle c_i^\dagger c_j^\dagger c_k c_l = \sum_{i,j,k,l} \langle \phi_i^{(1)} \phi_j^{(2)} | \hat{o}(1, 2) | \phi_l^{(1)} \phi_k^{(2)} \rangle c_i^\dagger c_j^\dagger c_k c_l \quad (2.20)$$

Hierbei ist $\langle i | \hat{o} | j \rangle$ das Matrixelement des Einteilchenoperators, aus dem sich die \hat{o}_i ergeben, gebildet mit den Einteilchenbasiszuständen bezüglich denen quantisiert wurde. Analoges gilt für die Zweiteilchenmatrixelemente. In der Praxis können diese Matrixelemente als Parameter behandelt werden. Die Operatoren in der zweiten Quantisierung enthalten die Teilchenzahl also nicht mehr explizit. Die Teilchenzahlabhängigkeit liegt nur noch bei den Zuständen. Durch die Anwendung von (2.15), (2.16) und (2.17) ist es einfach, in einem Computerprogramm die Wirkung von beliebigen Operatoren auf gegebene Zustände sowie Skalarprodukte von Zuständen zu berechnen. Für den Computerprogrammierer bietet die zweite Quantisierung also viele Vorteile. Daher wurde im Rahmen dieser Arbeit für das numerische Lösen des Vielteilchenproblems ausschließlich dieser Formalismus verwendet.

2.2 Teilchenzahlerhaltung und die $U(n)$ -Symmetrie

Die numerischen Probleme sind damit jedoch keinesfalls gelöst. Selbst wenn die Anzahl der Einteilchenzustände des verwendeten Modells begrenzt ist, so ist die Dimension des durch die Zustände der Form (2.18) aufgespannten Raumes im allgemeinen immer noch zu groß. Für ein reines Fermionensystem ist sie zwar endlich, für ein Bosonensystem aber immer noch unendlich. Da aber der Hamiltonian die Teilchenzahl N konserviert, kann die zu diagonalisierende Matrix für jedes N separat aufgestellt werden. Die Matrix besteht also bei der Wahl einer Basis mit

guter N -Quantenzahl aus Blöcken, die zu der entsprechenden Teilchenzahl gehören. Anders ausgedrückt bedeutet dies, dass der Teilchenzahloperator \hat{N} und der Hamiltonoperator \hat{H} gemeinsam diagonalisiert werden können. Wie bei der zweiten Quantisierung wird also auch hier durch die Ausnutzung einer Symmetrie das Problem vereinfacht:

$$[\hat{H}, \hat{N}] = 0 \quad (2.21)$$

Die entsprechende Symmetrie ist die $U(n)$, wobei n die Anzahl der elementaren Erzeugeroperatoren ist. Die Anzahl der Terme in (2.18) kann jedoch immer noch sehr groß werden. Handelt es sich z.B. um ein Modell mit s-, d-, und g-Bosonen (dies entspricht $1 + 5 + 9 = 15$ Einteilchenzuständen, siehe Abschnitt 2.3), so ist die Anzahl der Terme für einen 20-Teilchenzustand etwa gleich 10^9 . Eine Matrix dieser Größe lässt sich auch mit heutigen Computern nur schwer handhaben. Eine Möglichkeit besteht darin, weitere Symmetrien auszunutzen. \hat{H} zerfällt jedoch nur dann weiter in Blöcke, wenn die zugehörigen Basisvektoren die entsprechenden Symmetrien aufweisen. Im Falle der Austauschsymmetrie wird dies durch die zweite Quantisierung erreicht. Im Fall der N -Quantenzahl erreicht man dies sehr einfach, indem die Anzahl der Erzeugeroperatoren jedes Terms in Gleichung (2.18) genau gleich N ist. Möchte man jedoch Basiszustände mit z.B. guter Drehimpulsquantenzahl J benutzen, so kann man dies nicht so einfach erreichen. Hinzu kommt das Problem, sämtliche Entwicklungskoeffizienten speichern zu müssen. Geht es nur um eine gute Teilchenzahl, so ist dies leicht, denn es kann immer genau ein Koeffizient gleich eins sein und die anderen gleich Null. Bei gutem J jedoch werden im allgemeinen die meisten Koeffizienten ungleich Null sein. Man müsste dann $10^9 \cdot 10^9 = 10^{18}$ Zahlen speichern. Wenn wir davon ausgehen, dass eine Zahl im Speicher des Computers 8 Byte benötigt, entspricht dies $8 \cdot 10^9$ Gigabyte. Einfacher ist es anstatt von Basisvektoren mit gutem J lediglich eine Basis mit guter magnetischer Quantenzahl M zu verwenden. Man steht hier vor der Wahl:

Wenn man eine Basis mit guter magnetischer Quantenzahl M aber gebrochenen J benutzt (dies wird im Folgenden M -Schema genannt), dann ist die Basis sehr einfach zu erzeugen und auch Matrixelemente lassen sich sehr schnell berechnen. Die Dimension der Matrix ist jedoch sehr groß.

Verwendet man hingegen eine Basis mit gutem J , so reduziert sich die Größe der Matrix enorm, allerdings ist es schwierig, die Basis aufzustellen und Matrixelemente zu berechnen. Dies wird im Folgenden J -Schema genannt.

2.3 Das M -Schema und die $SO(2)$ -Symmetrie

Die Bezeichnung „ M -Schema“ bezieht sich auf den gebräuchlichen Buchstaben für die magnetische Quantenzahl. Die Einteilchenzustände, bezüglich denen quantisiert wird, haben für gewöhnlich einen guten Drehimpuls. Dies ist eine Folge der Isotropie des Raumes. Diese Drehimpulse seien j_1, j_2, \dots mit den magnetischen Quantenzahlen $-j_1, -j_1 + 1, \dots, j_1, -j_2, -j_2 + 1, \dots, j_2, -j_3, \dots$. $M_j := \{j_1, j_2, \dots\}$ sei der Satz dieser Drehimpulse. Die Anzahl der Drehimpuls ist $\#M_j$. Ein bestimmter Drehimpuls kann in M_j auch mehrfach vorkommen. Da für jeden Einteilchenzustand im Formalismus der zweiten Quantisierung ein Erzeugeroperator existiert, entspricht dies $\sum_i (2j_i + 1)$ Operatoren c_{j_i, m_i}^\dagger . Diese sind:

$$\begin{array}{cccc} c_{j_1, -j_1}^\dagger & c_{j_1, -j_1+1}^\dagger & \cdots & c_{j_1, j_1}^\dagger \\ c_{j_2, -j_2}^\dagger & c_{j_2, -j_2+1}^\dagger & \cdots & c_{j_2, j_2}^\dagger \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{array}$$

Kommen Drehimpulse mehrfach vor, so benötigt man einen weiteren Index zur Unterscheidung. Dieser wird hier der Übersichtlichkeit halber weggelassen. Hinzu kommen die entsprechenden Vernichtoperatoren $c_{j,m}$, also:

$$\begin{array}{cccc} c_{j_1, -j_1} & c_{j_1, -j_1+1} & \cdots & c_{j_1, j_1} \\ c_{j_2, -j_2} & c_{j_2, -j_2+1} & \cdots & c_{j_2, j_2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{array}$$

Jeder beliebige Zustand der Form

$$|\Phi\rangle = \prod_{i=1}^{\#M_j} \prod_{m_i=-j_i}^{j_i} \frac{1}{\sqrt{n_{j_i,m_i}!}} (c_{j_i,m_i}^\dagger)^{n_{j_i,m_i}} |0\rangle = |n_{j_1,-j_1}, n_{j_1,-j_1+1}, \dots, n_{j_2,-j_2}, \dots\rangle \quad (2.22)$$

hat dann eine gute magnetische Quantenzahl. Diese ist gegeben durch den Eigenwert des Casimiroperators der Gruppe $SO(2)$.

$$\hat{C}_1[SO(2)]|n_{j_1,-j_1}, n_{j_1,-j_1+1}, \dots, n_{j_2,-j_2}, \dots\rangle = M|n_{j_1,-j_1}, n_{j_1,-j_1+1}, \dots, n_{j_2,-j_2}, \dots\rangle \quad (2.23)$$

mit

$$M = \sum_{i=1}^{\#M_j} \sum_{m_i=-j_i}^{j_i} m_i \cdot n_{j_i,m_i} \quad (2.24)$$

und

$$\hat{C}_1[SO(2)] = \sum_{i=1}^{\#M_j} \sum_{m=-j_i}^{j_i} m c_{j_i,m_i}^\dagger c_{j_i,m_i} \quad (2.25)$$

$c_{j,m}^\dagger c_{j,m}$ verhält sich wie ein Anzahloperator, was aus (2.15) und (2.16) ersichtlich ist. Es ist also verhältnismäßig einfach, eine Basis mit gutem M zu generieren. Um eine vollständige Basis zu erhalten, muss man lediglich alle Kombinationen der $n_{j,m}$ durchgehen. Der Hamiltonoperator ist bei den hier betrachteten Fällen ein Drehimpulsskalar. Daher gilt

$$[\hat{H}, \hat{C}_1[SO(2)]] = 0 \quad (2.26)$$

Der Hamiltonian zerfällt in Blöcke entsprechend den M -Quantenzahlen. Da die Zustände eines Systems mit gutem J entweder alle ganzzahlig oder alle halbzahlig sind, genügt es, eine Basis mit $M = 0$ bzw. $M = \frac{1}{2}$ zu betrachten, denn alle Zustände mit ganzzahligem (halbzahligem) J existieren mit $M = 0$ ($M = \frac{1}{2}$).

Die Hamiltonmatrix für das weiter oben erwähnte Beispiel des Modells mit s-, d- und g-Bosonen und $N = 20$ Teilchen hat insgesamt etwa 10^9 Zustände. Die Anzahl der Zustände mit $M = 0$ beträgt jedoch nur etwa 10^8 .

Angenommen jeder Basiszustand hat die Form (2.22), dann können Matrixelemente durch die Anwendung von (2.15), (2.16) und (2.17) extrem einfach und schnell berechnet werden. Die Anzahl der zu berechnenden Matrixelemente ist jedoch immer noch sehr groß ebenso wie die Dimension der zu diagonalisierenden Matrix.

2.4 Das J -Schema und die $SU(2)$ -Symmetrie

Der Name „ J -Schema“ bezieht sich auf den gebräuchlichen Buchstaben für die Drehimpulsquantenzahl. Die entsprechende Symmetriegruppe wird in der Literatur mit $SO(3)$, $Spin(3)$ und $SU(2)$ bezeichnet. Diese Notationen unterscheiden sich nicht in der entsprechenden Algebra sondern in den mit ihnen assoziierten Darstellungen. Die $SO(3)$ bezieht sich auf ganzzahlige und die $Spin(3)$ auf halbzahlige Drehimpulse. Die Darstellungen der $SU(2)$ hingegen enthalten sowohl ganz- als auch halbzahlige Drehimpulsquantenzahlen [5]. In Rahmen dieser Arbeit wird daher für ein reines Bosonen-System die Bezeichnung $SO(3)$ oder je nach Kontext auch $SU(2)$ verwendet. Wann immer das System entweder nur Fermionen oder beide Teilchenarten enthält, kann der Drehimpuls je nach der Anzahl der Fermionen ganz- oder halbzahlig sein und daher wird nur die Notation $SU(2)$ verwendet. \hat{H} kommutiert also mit $\hat{C}_2[SO(3)]$ bzw. $\hat{C}_2[SU(2)]$.

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{C}_2[SO(3)]] &= 0 \quad \text{für Bosonen} \\ [\hat{H}, \hat{C}_2[SU(2)]] &= 0 \quad \text{immer} \end{aligned} \quad (2.27)$$

Die Dimension der Hamiltonmatrix verringert sich durch das Ausnutzen dieser Symmetrie enorm. Für das weiter oben angeführte Beispiel des s-, d- und g-Bosonen Systems mit $N = 20$ Teilchen ergibt sich für $M = 0$ und $J = 0$ eine Zustandsanzahl von 10^5 . Die folgende Tabelle fasst den Gewinn durch das Ausnutzen der M - und J -Quantenzahl noch einmal zusammen.

Ausgenutzten Symmetrien	paarweise vertauschende Operatoren	Dimension von \hat{H}
keine	\hat{H}	∞
$U(15)$	\hat{H}, \hat{N}	10^{23}
$\mathcal{S}_n, U(15)$	$\hat{H}, \hat{N}, \hat{P}_{ij}$	10^9
$\mathcal{S}_n, U(15), SO(2)$	$\hat{H}, \hat{N}, \hat{P}_{ij}, \hat{C}_1[SO(2)]$	10^8
$\mathcal{S}_n, U(15), SO(2), SU(2)$	$\hat{H}, \hat{N}, \hat{P}_{ij}, \hat{C}_1[SO(2)], \hat{C}_2[SU(2)]$	10^5

Wird keine Symmetrie ausgenutzt, so gibt es unendlich viele Zustände, da bei einem bosonischen Modell die Teilchenanzahl unbeschränkt ist. Um also überhaupt einen endlich dimensionalen Hamiltonian zu erhalten, muss zunächst die Teilchenzahlerhaltung betrachtet werden. Ohne korrekte Symmetrisierung ist in dem hier vorgestellten Beispiel die Anzahl der Zustände mit der Avogadro-Konstante vergleichbar. Ein numerisches Behandeln des Problems ist ohne das Ausnutzen der Austauschsymmetrie also undenkbar. Durch Benutzen der zweiten Quantisierung ist die korrekte Symmetrisierung implizit in allen Operatoren und Wellenfunktionen enthalten. Die $SU(2)$ -Symmetrie bietet ebenfalls eine Möglichkeit, die Dimension des Hamiltonians drastisch zu verkleinern. Der nötige Aufwand ist jedoch wesentlich höher. Damit die $SU(2)$ -Symmetrie beim Berechnen der Matrixelemente von \hat{H} ausgenutzt werden kann, müssen die Operatoren unter den mit der $SU(2)$ assoziierten Transformationen ein definiertes Verhalten aufweisen. Dies erreicht man, indem die elementaren Erzeuger- und Vernichtoperatoren zu gutem Drehimpuls gekoppelt werden. \hat{T}^{j_1} und \hat{T}^{j_2} seien sphärische Tensoren bezüglich der Drehimpulse j_1 und j_2 . Dann können diese Operatoren zu einem weiteren spärlichen Tensor \hat{T}_M^J gekoppelt werden:

$$\hat{T}_M^J = [\hat{T}^{j_1} \times \hat{T}^{j_2}]_M^J := \sum_{m_1, m_2} \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | J, M \rangle \hat{T}_{m_1}^{j_1} \hat{T}_{m_2}^{j_2} \quad (2.28)$$

Hierfür ist die Einführung eines neuen Vernichtoperators notwendig, der sich nur durch eine Phase vom gewöhnlichen Vernichter unterscheidet.

$$\tilde{c}_{j,m} := (-1)^{j+m} c_{j,-m} \quad (2.29)$$

Das Vorzeichen der magnetischen Quantenzahl im Exponenten der Phase ist reine Konvention. Die gleiche Konvention wird auch in [1, 10] benutzt, jedoch nicht in [11]. Durch die Wahl dieser Phase ändern sich selbstverständlich nicht die Eigenwerte und Eigenvektoren des Hamiltonians. In der expliziten Darstellung einiger Operatoren können jedoch unterschiedliche Phasen auftreten. Dies ist jedoch nur für fermionische Operatoren (also für halbzahliges j) der Fall. Des Weiteren werden per Konvention für Fermionen die Operatoren $a_{j,m}^\dagger, a_{j,m}, \tilde{a}_{j,m}$ und für Bosonen die Operatoren $b_{j,m}^\dagger, b_{j,m}$ und $\tilde{b}_{j,m}$ verwendet. Wird stattdessen $c_{j,m}^\dagger, c_{j,m}$ und $\tilde{c}_{j,m}$ benutzt, so gilt der entsprechende Ausdruck sowohl für Bosonen als auch für Fermionen oder es ist aus dem Kontext heraus klar, um welche Teilchensorte es sich handelt. Da das Modell auch aus mehreren Teilchen mit gleichem Spin bestehen kann, wird ein zusätzlicher Index eingeführt. Die Kommutator- bzw. Antikommutatorrelationen lauten damit

$$[\tilde{b}_{n_1, l_1, m_1}, b_{n_2, l_2, m_2}^\dagger] = (-1)^{l_1+m_1} \delta_{n_1, n_2} \delta_{l_1, l_2} \delta_{-m_1, m_2} \quad (2.30)$$

und

$$\{\tilde{a}_{n_1, j_1, m_1}, a_{n_2, j_2, m_2}^\dagger\} = (-1)^{j_1+m_1} \delta_{n_1, n_2} \delta_{j_1, j_2} \delta_{-m_1, m_2} \quad (2.31)$$

Mit der Konvention $q = 0$ für Bosonen und $q = 1$ für Fermionen gilt also

$$\tilde{c}_{n_1, j_1, m_1} c_{n_2, j_2, m_2}^\dagger = (-1)^q c_{n_2, j_2, m_2}^\dagger \tilde{c}_{n_1, j_1, m_1} + (-1)^{j_1+m_1} \delta_{n_1, n_2} \delta_{j_1, j_2} \delta_{-m_1, m_2} \quad (2.32)$$

Die Operatoren c^\dagger und \tilde{c} können in beliebiger Kombination zu gutem J gekoppelt werden. $\langle j_1, m_1, j_2, m_2 | J, M \rangle$ bezeichnet hierbei den Clebsch-Gordan Koeffizienten. Damit dieser ungleich Null ist, muss gelten:

$$m_1 + m_2 = M \quad \wedge \quad |j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2 \quad (2.33)$$

Ein Einteilchenoperator nimmt im J -Schema also folgende Form an:

$$\hat{O}_1 = [c_{n_1, j_1}^\dagger \times \tilde{c}_{n_2, j_2}]_M^J \quad (2.34)$$

Zweiteilchenoperatoren können auf verschiedene Weise gekoppelt werden. Die beiden gebräuchlichen Formen sind:

$$\hat{O}_2 = [[c_{n_1, j_1}^\dagger \times \tilde{c}_{n_2, j_2}]^{J_{12}} \times [c_{n_3, j_3}^\dagger \times \tilde{c}_{n_4, j_4}]^{J_{34}}]_M^J \quad (2.35)$$

und

$$\hat{O}_2 = [[c_{n_1, j_1}^\dagger \times c_{n_2, j_2}^\dagger]^{J_{12}} \times [\tilde{c}_{n_3, j_3} \times \tilde{c}_{n_4, j_4}]^{J_{34}}]_M^J \quad (2.36)$$

Diese beiden Formen können durch Entkoppeln, Benutzen der Kommutatorrelationen und erneutes Koppeln ineinander umgerechnet werden. Da der Hamiltonian ein Drehimpulsskalar ist, ist dies für $J = 0$ besonders interessant (siehe hierzu Kapitel C.2). Durch das Koppeln von Operatoren ist es auch möglich, Zustände einer bestimmten Teilchenzahl mit gutem Drehimpuls sowie magnetischer Quantenzahl zu erzeugen. Für einen Zweiteilchenzustand gilt:

$$|2, \alpha, J, M\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} [c_{n_1, j_1}^\dagger \times c_{n_2, j_2}^\dagger]_M^J |0\rangle \quad (2.37)$$

α steht hierbei für alle weiteren evtl. vorhandenen Quantenzahlen, die nötig sind, um den Zustand eindeutig zu bezeichnen (z.B. die Teilchensorten n_1 und n_2) und $\frac{1}{\mathcal{N}}$ ist lediglich ein Normierungsfaktor. Durch sukzessives Koppeln kann so ein N -Teilchenzustand erzeugt werden.

$$|N, \alpha, J, M\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} [\dots [c_{n_1, j_1}^\dagger \times c_{n_2, j_2}^\dagger]^{J_{12}} \times \dots \times c_{n_N, j_N}^\dagger]_M^J |0\rangle \quad (2.38)$$

α bezieht sich hierbei im allgemeinen nicht nur auf die Teilchensorten, sondern ebenfalls auf die zwischen liegenden Drehimpulse wie z.B. J_{12} . Je nachdem ob es sich um identische Teilchen handelt oder nicht, kann eine andere Wahl dieser Drehimpulse zu einem anderen Zustand führen (siehe Kap. 2.5).

2.5 Quantenzahlen der Vielteilchenbasis

Um die Matricelemente von \hat{H} berechnen zu können, muss zunächst die entsprechende Basis bekannt sein. Angenommen das Modell besteht aus a unterscheidbaren Teilchensorten, welche mit den Indizes $1, 2, \dots, a$ bezeichnet werden und die Spins j_1, j_2, \dots, j_a besitzen, dann ist

$$|N, \alpha, J, M\rangle = |N, n_1, n_2, J_2, n_3, J_3, \dots, n_N, J, M\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} [\dots [c_{n_1, j_{n_1}}^\dagger \times c_{n_2, j_{n_2}}^\dagger]^{J_2} \times c_{n_3, j_{n_3}}^\dagger]^{J_3} \times \dots \times c_{n_N, j_{n_N}}^\dagger]_M^J |0\rangle \quad (2.39)$$

für alle möglichen Kombinationen der Teilchentypen $n_1, n_2, \dots, n_N \in \{1, 2, \dots, a\}$ sowie der Drehimpulse J_2, J_3, \dots, J_{N-1} eine vollständige Basis für die Teilchenzahl N , den Spin J und der magnetischen Quantenzahl M . Diese Basis ist jedoch im Allgemeinen übervollständig und nicht orthogonal. Solche Probleme können genau dann auftreten, wenn die n_i nicht paarweise verschieden sind also wann immer es sich um identische Teilchen handelt. Die Reihenfolge in welcher die Teilchen in (2.39) gekoppelt werden, darf frei gewählt werden. Die Anzahl der möglichen Zustände ändert sich dadurch nicht. Man erhält lediglich eine andere Basis für den gleichen

Zustandsraum. Daher bietet sich an, die n_i derart zu sortieren, dass identische Teilchen gruppiert werden. Der Übersichtlichkeit halber wird im Folgenden nur noch der Index der Teilchen am Erzeugeroperator aufgeführt und der Spin weggelassen. N_i sei die Anzahl der Teilchen vom Typ i .

$$|N, \alpha, J, M\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} [\dots [[[c_1^\dagger \times c_1^\dagger]^{J_2} \times c_1^\dagger]^{J_3} \times \dots \times c_1^\dagger]^{J_{N_1}} \times c_2^\dagger]^{J_{N_1+1}} \times \dots]_M^J |0\rangle \quad (2.40)$$

Die Kopplungsreihenfolge wird nun noch einmal geändert. Es werden immer erst alle identischen Teilchen zusammengekoppelt und im Anschluss werden alle identischen Vielteilchenzustände zu J und M gekoppelt. J_i bezeichne nun den Drehimpuls zu dem alle identischen Teilchen des Typs i gekoppelt werden und J'_i steht für den Zwischendrehimpuls nach dem Zusammenkoppeln mit den identischen Teilchen vom Typ i .

$$|N, \alpha, J, M\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} [\dots [[c_1^\dagger \times c_1^\dagger \times \dots]^{J_1} \times [c_2^\dagger \times c_2^\dagger \times \dots]^{J_2}]^{J'_2} \times \dots]_M^J |0\rangle \quad (2.41)$$

Schematisch lässt sich diese Gleichung übersichtlicher darstellen.

$$|N, \alpha, J, M\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} [\dots [(c_1^\dagger)^{N_1} \times (c_2^\dagger)^{N_2}]^{J'_2} \times \dots \times (c_a^\dagger)^{N_a}]_M^J |0\rangle \quad (2.42)$$

Hiermit sind alle Möglichkeiten gemeint, die Erzeugeroperatoren zu J und M zu koppeln, wobei $\sum_i N_i = N$ gilt. Das Problem ist somit auf zwei Teilprobleme aufgeteilt. Das erste besteht darin, eine orthogonale Basis für ein System mit einer beliebigen Anzahl von identischen Teilchen mit Spin j (Bosonen oder Fermionen) zu finden. Die zweite Teilaufgabe ist das Finden aller Möglichkeiten diese Teilsysteme zu J zu koppeln. Jede neue Möglichkeit der Kopplung der Teilsysteme erzeugt einen zu allen anderen Zuständen orthogonalen neuen Zustand. Daher bietet sich an, die Drehimpulse des Kopplungsschemas als Quantenzahlen zu benutzen.

$$|N, \alpha, J, M\rangle = |N, \alpha_1, \alpha_2, J'_2, \alpha_3, J'_3, \dots, J, M\rangle \quad (2.43)$$

α_i bezeichnet hierbei alle Quantenzahlen des Systems mit dem Teilchentyp i . Ein entsprechendes Computerprogramm müsste also zuerst alle Quantenzahlen $\alpha_1, \alpha_2, \dots$ und anschließend möglichen Wege der Kopplung zu J (und damit alle J'_2, J'_3, \dots) finden, um alle Quantenzahlen für die Vielteilchenbasis zu erhalten. Ein entsprechender Algorithmus, der diese Aufgabe für den allgemeinen Fall löst, wird in den folgenden Abschnitten vorgestellt.

2.5.1 Symmetrien und Quantenzahlen identischer Teilchen

In diesem Abschnitt wird gezeigt, welche Quantenzahlen für ein System aus identischen Teilchen mit Spin j existieren. Es sei

$$G_{J,M} := [c^\dagger \times \tilde{c}]_M^{(J)} \quad (2.44)$$

Diese Operatoren schließen unter der Kommutatorrelation und generieren eine Lie-Algebra, was nun gezeigt wird.

$$\begin{aligned} [G_{J_1, M_1}, G_{J_2, M_2}] &= [c^\dagger \times \tilde{c}]_{M_1}^{(J_1)} [c^\dagger \times \tilde{c}]_{M_2}^{(J_2)} - [c^\dagger \times \tilde{c}]_{M_2}^{(J_2)} [c^\dagger \times \tilde{c}]_{M_1}^{(J_1)} \\ &= \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_3, m_4}} \langle jm_1 jm_2 | J_1 M_1 \rangle \langle jm_3 jm_4 | J_2 M_2 \rangle [c_{m_1}^\dagger \tilde{c}_{m_2} c_{m_3}^\dagger \tilde{c}_{m_4} - c_{m_3}^\dagger \tilde{c}_{m_4} c_{m_1}^\dagger \tilde{c}_{m_2}] \end{aligned} \quad (2.45)$$

Durch Anwendung der elementaren Kommutator- bzw. Antikommutatorrelationen erhält man:

$$\begin{aligned} & c_{m_1}^\dagger \tilde{c}_{m_2} c_{m_3}^\dagger \tilde{c}_{m_4} - c_{m_3}^\dagger \tilde{c}_{m_4} c_{m_1}^\dagger \tilde{c}_{m_2} \\ &= (-)^q \underbrace{(c_{m_1}^\dagger c_{m_3}^\dagger \tilde{c}_{m_2} \tilde{c}_{m_4} - c_{m_3}^\dagger c_{m_1}^\dagger \tilde{c}_{m_4} \tilde{c}_{m_2})}_{=0} + \\ & (-)^{j+m_2} \delta_{-m_2, m_3} c_{m_1}^\dagger \tilde{c}_{m_4} - (-)^{j+m_4} \delta_{-m_4, m_1} c_{m_3}^\dagger \tilde{c}_{m_2} \end{aligned} \quad (2.46)$$

Eingesetzt folgt daraus:

$$[G_{J_1, M_1}, G_{J_2, M_2}] = \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_3, m_4}} \langle jm_1 jm_2 | J_1 M_1 \rangle \langle jm_3 jm_4 | J_2 M_2 \rangle \times \\ [(-)^{j+m_2} \delta_{-m_2, m_3} c_{m_1}^\dagger \tilde{c}_{m_4} - (-)^{j+m_4} \delta_{-m_4, m_1} c_{m_3}^\dagger \tilde{c}_{m_2}] \quad (2.47)$$

Der Kommutator besteht also aus zwei Einkörpertermen. Der erste Term erhält die Bezeichnung T_1 und der zweite Term T_2 . Das Ziel ist es, den Kommutator der Generatoren durch die Generatoren selbst auszudrücken. Zunächst wird T_1 behandelt.

$$T_1 := \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_3, m_4}} \langle jm_1 jm_2 | J_1 M_1 \rangle \langle jm_3 jm_4 | J_2 M_2 \rangle (-)^{j+m_2} \delta_{-m_2, m_3} c_{m_1}^\dagger \tilde{c}_{m_4} \\ = \sum_{m_1, m_2, m_4} \langle jm_1 jm_2 | J_1 M_1 \rangle \langle j - m_2 jm_4 | J_2 M_2 \rangle (-)^{j+m_2} c_{m_1}^\dagger \tilde{c}_{m_4} \quad (2.48)$$

Durch die Ersetzung der Clebsch-Gordan-Koeffizienten durch Wigner-3j-Symbole und Ausnutzen von $m_2 = m_1 - M_1$ (alle anderen Term der Summe sind gleich Null) ergibt sich

$$T_1 = \sum_{m_1, m_2, m_4} \sqrt{2J_1 + 1} \sqrt{2J_2 + 1} (-)^{j+m_1+M_2} \times \\ \begin{pmatrix} J_1 & j & j \\ -M_1 & m_1 & m_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & J_2 & j \\ m_4 & -M_2 & -m_2 \end{pmatrix} c_{m_1}^\dagger \tilde{c}_{m_4} \quad (2.49)$$

Anwendung von Gleichung (D.34) ergibt.

$$T_1 = \sqrt{2J_1 + 1} \sqrt{2J_2 + 1} (-)^{j+m_1+M_2} c_{m_1}^\dagger \tilde{c}_{m_4} \times \\ \left[\sum_{J, M} (-)^{j+J-M_1+m_4} (2J+1) \begin{Bmatrix} J_1 & j & j \\ j & J_2 & J \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} j & j & J \\ m_4 & m_1 & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J \\ -M_1 & -M_2 & -M \end{pmatrix} \right] \quad (2.50)$$

Für die Phase gilt:

$$(-)^{2j+J+M_2-M_1+m_1+m_4} = (-)^{2j+J+M_2-M_1+M} = (-)^{2j+J+M_2-M_1+M_1+M_2} = (-)^{2j+J}$$

Außerdem wird die erste und die zweite Spalte im ersten 3j-Symbol vertauscht. Dies gibt ebenfalls eine Phase von $(-)^{2j+J}$, so dass sich die Phase insgesamt weghebt. Die anschließende Ersetzung des ersten 3j-Symbol durch den entsprechenden Clebsch-Gordan-Koeffizient liefert:

$$T_1 = \sum_{J, M} \sqrt{2J_1 + 1} \sqrt{2J_2 + 1} (2J+1) \begin{Bmatrix} J_1 & j & j \\ j & J_2 & J \end{Bmatrix} \times \\ \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J \\ -M_1 & -M_2 & -M \end{pmatrix} \underbrace{\left[\sum_{m_1, m_4} \frac{(-)^M}{\sqrt{2J+1}} \langle jm_1 jm_4 | JM \rangle c_{m_1}^\dagger \tilde{c}_{m_4} \right]}_{=(c^\dagger \times \tilde{c})_M^{(J)}} \quad (2.51)$$

Nun können die Symmetrieeigenschaften des 6j-Symbols (D.26) genutzt und danach das 3j-Symbol wieder als Clebsch-Gordan-Koeffizient geschrieben werden.

$$T_1 = \sum_{J, M} (-)^J \sqrt{2J_1 + 1} \sqrt{2J_2 + 1} \langle J_1 M_1 J_2 M_2 | JM \rangle \begin{Bmatrix} J_1 & J_2 & J \\ j & j & j \end{Bmatrix} (c^\dagger \times \tilde{c})_M^{(J)} \quad (2.52)$$

Die Berechnung des zweiten Terms T_2 läuft analog ab. Es existiert lediglich eine andere Phase, da bei der Ableitung dieses Terms einmal mehr zwei Spalten eines 3j-Symbols vertauscht werden müssen.

$$T_2 = \sum_{J,M} (-)^{J_1-J_2} \sqrt{2J_1+1} \sqrt{2J_2+1} \langle J_1 M_1 J_2 M_2 | J M \rangle \left\{ \begin{matrix} J_1 & J_2 & J \\ j & j & j \end{matrix} \right\} (c^\dagger \times \tilde{c})_M^{(J)} \quad (2.53)$$

Somit lautet das Endergebnis für den Kommutator der Generatoren:

$$[G_{J_1, M_1}, G_{J_2, M_2}] = \sum_{J,M} \sqrt{2J_1+1} \sqrt{2J_2+1} \langle J_1 M_1 J_2 M_2 | J M \rangle \times \left\{ \begin{matrix} J_1 & J_2 & J \\ j & j & j \end{matrix} \right\} G_{J,M} [(-)^J - (-)^{J_1-J_2}] \quad (2.54)$$

Die Generatoren schließen also unter der Kommutatorrelation. Für die Anzahl A der Generatoren gilt mit $n := 2j + 1$:

$$A = \sum_{J=0}^{2j} (2J+1) = 2 \cdot \sum_{J=0}^{2j} J + 2j + 1 = 2 \cdot \frac{2j(2j+1)}{2} + 2j + 1 = (2j+1)^2 = n^2 \quad (2.55)$$

Sie generieren also eine $U(n)$ -Algebra. Aus (2.54) ist direkt ersichtlich, dass $G_{0,0}$ mit allen Generatoren vertauscht, denn:

$$[G_{0,0}, G_{J_2, M_2}] = \sqrt{2J_2+1} \left\{ \begin{matrix} 0 & J_2 & J_2 \\ j & j & j \end{matrix} \right\} G_{J_2, M_2} \underbrace{[(-)^{J_2} - (-)^{-J_2}]}_{=0} = 0 \quad (2.56)$$

Aufgrund des Phasenfaktors besteht der Kommutator zweier Generatoren mit ungeraden Drehimpulsen J_1 und J_2 wiederum nur aus Generatoren mit ungeradem Drehimpuls. Die Anzahl dieser Generatoren sei für Bosonen B_b und für Fermionen B_f . Dann gilt:

$$B_b = \sum_{J=0}^{j-1} (2(2J+1)+1) = 4 \cdot \sum_{J=0}^{j-1} J + 3 \cdot \sum_{J=0}^{j-1} 1 = 2j^2 + j = \frac{n(n-1)}{2} \quad (2.57)$$

$$B_f = \sum_{J=0}^{j-1/2} (2(2J+1)+1) = 4 \cdot \sum_{J=0}^{j-1/2} J + 3 \cdot \sum_{J=0}^{j-1/2} 1 = 2j^2 + 3j + 1 = \frac{n(n+1)}{2} \quad (2.58)$$

Für ein Bosonensystem generieren die Operatoren die Gruppe $SO(n)$ und für eine Fermionensystem die Gruppe $USp(n)$. Außerdem schließen die drei Generatoren $G_{1,M}$ unter sich selbst.

$$[G_{1, M_1}, G_{1, M_2}] = \sum_M \sqrt{3} \sqrt{3} \langle 1 M_1 1 M_2 | 1 M \rangle \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 1 \\ j & j & j \end{matrix} \right\} G_{1, M} \underbrace{[(-)^1 - (-)^0]}_{=-2} \quad (2.59)$$

Diese drei Generatoren generieren im Fall der Bosonen die $SO(3)$ und im Fall der Fermionen die $SU(2)$. Somit erhalten wir für alle n :

$$\begin{aligned} U(n) \supset SO(n) \supset SO(3) & \quad , \quad \text{für Bosonen} \\ U(n) \supset USp(n) \supset SU(2) & \quad , \quad \text{für Fermionen} \end{aligned} \quad (2.60)$$

Die entsprechenden Quantenzahlen sind die Teilchenzahl N , die sog. Seniorität ν [12] sowie der Drehimpuls J . Die Senioritätsquantenzahl spielt in der Kernphysik eine große Rolle [13, 14]. Sie wird mit der Anzahl der Teilchen assoziiert, welche sich nicht einem zum Spin 0 gekoppelten Paar befinden. Evtl. befinden sich weitere Algebren innerhalb dieser Kette. Ein Beispiel hierfür

sind f-Bosonen (siehe Kapitel 3.3.1.4). Möglicherweise existieren außer $j = 3$ noch andere Teilchenspins, für die die Gruppenkette (2.60) nicht vollständig ist. Dies wird hier jedoch nicht weiter untersucht. Die Existenz obiger Gruppenkette (2.60) wird bei der Berechnung der sog. *Coefficients of Fractional Parentage* (CFPs) ausgenutzt (siehe Kapitel 2.7). Selbstverständlich existiert diese nicht für s-Bosonen ($j = 0, n = 1$). Für p-Bosonen ($j = 1, n = 3$) haben wir nur $U(3) \supset SO(3)$. Hier ist die Senioritätsquantenzahl mit der Spinquantenzahl identisch. Ein weiterer Sonderfall sind Fermionen mit $j = 1/2, n = 2$. Zu den Gruppen gehören die entsprechenden Quantenzahlen.

Gruppe	Quantenzahl	Name
$U(n)$	N	Teilchenzahl
$SO(n)$	ν	Seniorität (Bosonen)
$USp(n)$	ν	Seniorität (Fermionen)
$SO(3)$	J	Drehimpuls (Bosonen)
$SU(2)$	J	Drehimpuls (Fermionen)

Damit ist jedoch noch nicht geklärt, welche Zustände bzw. Sätze von Quantenzahlen existieren. Ein Algorithmus hierfür wird im folgenden Abschnitt diskutiert. Die Symmetrien von Systemen identischer Teilchen werden im Kapitel 3 genauer untersucht.

2.5.2 Das Finden der Quantenzahlen für identische Teilchen

Es sei ein beliebiger Zustand identischer Teilchen gegeben. Die Teilchenzahl sei N , der Spin J und die magnetische Quantenzahl sei M . Der Spin der Teilchen sei j . Die Erzeugeroperatoren seien $c_{-j}^\dagger, c_{-j+1}^\dagger, \dots, c_j^\dagger$. Dann existiert ein Polynom \mathcal{P} über die entsprechenden Erzeugeroperatoren, welches angewendet auf das Teilchenvakuum genau gleich diesem Zustand ist.

$$|N, \alpha, J, M\rangle = \mathcal{P}|0\rangle \quad (2.61)$$

α steht hierbei für alle weiteren evtl. vorhandenen Quantenzahlen. Diesem Zustand kann man zwei zu Null gekoppelte Teilchen hinzufügen, ohne die anderen Quantenzahlen zu verändern.

$$|N + 2, \alpha, J, M\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}}[c^\dagger \times c^\dagger]_0^0 |N, \alpha, J, M\rangle \quad (2.62)$$

Für Fermionen ist dies auf Grund des Pauliprinzipis nicht immer möglich. Es können sich höchstens $M_{max} = 2j + 1$ identische Fermionen mit Spin j in einem Zustand befinden. Es bietet sich also an, die Anzahl der Teilchen, welche nicht zu einem zu Null gekoppelten Paar gehören, als Quantenzahl zu benutzen. Dies ist die sogenannte Senioritäts-Quantenzahl, welche im Folgenden mit ν bezeichnet wird. Die entsprechende Symmetrie ist die $SO(n)$ für Bosonen und die $USp(n)$ für Fermionen mit $n = 2j + 1$. Im Rahmen dieser Arbeit werden für die Bezeichnung eines Zustandes identischer Teilchen immer fünf Quantenzahlen verwendet, diese sind die Teilchenzahl N , die Seniorität ν , die evtl. weiteren Quantenzahlen Δ , der Spin J und die magnetische Quantenzahl M . Diese Konvention wird aus Gründen der Konsistenz unabhängig vom Teilchenspin aufrecht erhalten. Für einige Teilchenspins sind nicht alle Quantenzahlen notwendig. Für $j = 0$ -Teilchen (s-Bosonen) z.B. ist nur die Teilchenzahl N nötig, um den Zustand anzugeben. Es gilt immer $J = 0$ und $M = 0$. Die Seniorität ist für gerade N gleich 0 und für ungerade N gleich 1. Weitere Quantenzahlen existieren nicht, daher gilt immer $\Delta = 0$. Das Notieren aller fünf Quantenzahlen ist also eine reine Konventionssache. Andererseits ist es denkbar, dass es Teilchenspins gibt, für die weitere Quantenzahlen existieren. Dies wurde im Rahmen dieser Arbeit nicht untersucht. Wann immer es mehr als einen Zustand mit gegebenem N, ν, J, M gibt, werden diese einfach mit $\Delta = 0, 1, 2, \dots$ durchgezählt. Die Aufgabe lautet nun herauszufinden, welche Zustände $|N, \nu, \Delta, J, M\rangle$ existieren. Mit Hilfe des M-Schemas (siehe Kap. 2.3) kann man berechnen, wie viele Zustände zu gegebenem N und M existieren. Ist die Anzahl der Zustände zu jedem N und M bekannt, so ist es möglich, unter Zuhilfenahme der möglichen magnetischen Quantenzahlen zu gegeben Drehimpuls J

$$-J \leq M \leq J \quad \wedge \quad |M_1 - M_2| \in \mathbb{N} \quad (2.63)$$

sowie der Kenntnis von

$$|N + 2, \nu, \Delta, J, M\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} [c^\dagger \times c^\dagger]_0^0 |N, \nu, \Delta, J, M\rangle \quad (2.64)$$

Rückschlüsse auf die übrigen Quantenzahlen zu ziehen. Im Falle von Fermionen ist ein Ankoppeln eines Teilchenpaares aufgrund des Pauliprinzipis nicht immer möglich. Implizit werden hierbei die sogenannten Verzweigungsregeln der entsprechenden Gruppen benutzt. Wie das Abzählen der Zustände für gegebene N, M mittels des M-Schemas in effizienter Weise möglich ist und wie die übrigen Quantenzahlen ν, Δ und J ermittelt werden können, wird im Folgenden erklärt. Hierzu wird das Problem auf ein rein kombinatorisches zurückgeführt. Der Teilchenspin sei j (ganz- oder halbzahlig). Die Anzahl aller möglichen Zustände mit der Teilchenzahl N ist gegeben durch die Anzahl aller möglichen Kombinationen N identische Kugeln auf $n = 2j + 1$ Körbe zu verteilen. Die erlaubte Anzahl der Kugeln pro Korb ist hierbei $0, 1, 2, \dots, N$ für Bosonen und $0, 1$ für Fermionen. Für Fermionen ist die maximal mögliche Teilchenzahl also $N_{max} = n$. Jedem Korb wird eine magnetische Quantenzahl zugewiesen. Der erste Korb erhält $-j$, der zweite $-j + 1$ usw., dem letzten wird j zugewiesen. Die Anzahl der Kugeln in den Körben sei n_{-j}, n_{-j+1} usw. Eine gegebene Verteilung auf die Körbe entspricht dem Zustand

$$|N, \alpha, M\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \prod_{m=-j}^j (c_m^\dagger)^{n_m} |0\rangle \quad (2.65)$$

, wobei $N = \sum_m n_m$ und $M = \sum_m m \cdot n_m$ gilt. Durch das Abzählen aller möglichen Partitionen der Zahl N in n ganze Zahlen $n_m \in \{0, 1, \dots, N\}$ bzw. $n_m \in \{0, 1\}$ können die Zustände also abgezählt werden. Die Anzahl der Kugel-Konfigurationen für festes N, M sei nun $K_1(N, M)$. Dann existiert eine maximale magnetische Quantenzahl $M_{max} \leq N \cdot j$ für die gilt:

$$K_1(N, M_{max}) \neq 0 \quad \wedge \quad K_1(N, M) = 0 \quad \text{für } M > M_{max} \quad (2.66)$$

Diese höchste magnetische Quantenzahl muss zu einem Zustand mit $J = M_{max}$ gehören. Zu diesem Drehimpuls gehören ebenfalls jeweils ein Zustand mit $M = M_{max} - 1, M_{max} - 2, \dots, -M_{max}$. Die Anzahl der Zustände mit Teilchenzahl N und Spin J sei $K_2(N, J)$. Diese sind gegeben durch:

$$\begin{aligned} K_2(N, J) &= K_1(N, M_{max}) \quad \text{für } J = M_{max} \\ K_2(N, J) &= K_1(N, J + 1) - K_1(N, J) \quad \text{für } 0 \leq J \leq M_{max} - 1 \end{aligned} \quad (2.67)$$

Die Quantenzahlen der Zustände mit einer Seniorität $\nu < N$ erhält man rekursiv aus den Quantenzahlen der Zustände der Teilchenzahl $N - 2$, da man ein zum Drehimpuls Null gekoppeltes Teilchenpaar diesen Zuständen hinzufügen kann, ohne die anderen Quantenzahlen zu beeinflussen. Die restliche Anzahl der Zustände muss dann eine Seniorität von $\nu = N$ besitzen. Diese haben $\Delta = 0, 1, 2, \dots$. Dieses Verfahren ist rekursiv und baut auf den Zuständen $|0\rangle = |0, 0, 0, 0\rangle$ und $c^\dagger|0\rangle = |1, 1, 0, j\rangle$ auf (die magnetische Quantenzahl wird der Einfachheit halber weggelassen). Die folgende Tabelle zeigt als Beispiel den Fall von drei g-Bosonen ($N = 3, j = 4$).

M	$K_1(N, M)$	$K_2(N, M)$
0	13	1
1	12	0
2	12	1
3	11	1
4	10	2
5	8	1
6	7	2
7	5	1
8	4	1
9	3	1
10	2	1
11	1	0
12	1	1

Es gibt genau einen Zustand mit $N = 1$, nämlich $|1, 1, 0, 4\rangle$. Daher muss der Zustand $|3, 1, 0, 4\rangle$ existieren. Alle anderen Zustände haben maximal Seniorität $\nu = 3$. Es gibt also zwei Zustände mit $\nu = 3$ und $J = 6$, die sich durch $\Delta = 0, 1$ unterscheiden. Folgende Liste zeigt die Quantenzahlen aller Zustände:

$$\begin{array}{lll} |3, 3, 0, 0\rangle & ; & |3, 3, 0, 2\rangle & ; & |3, 3, 0, 3\rangle & ; \\ |3, 1, 0, 4\rangle & ; & |3, 3, 0, 4\rangle & ; & |3, 3, 0, 5\rangle & ; \\ |3, 3, 0, 6\rangle & ; & |3, 3, 1, 6\rangle & ; & |3, 3, 0, 7\rangle & ; \\ |3, 3, 0, 8\rangle & ; & |3, 3, 0, 9\rangle & ; & |3, 3, 0, 10\rangle & ; \\ |3, 3, 0, 12\rangle & & & & & \end{array}$$

Im Fall von Fermionen ist zu beachten, dass die maximale Teilchenzahl $N_{max} = 2j + 1$ beträgt. Außerdem muss $N + \nu \leq 2j + 1$ immer erfüllt sein. Dies bedeutet, dass die Quantenzahlen sozusagen an der halb gefüllten Schale ($N = (2j + 1)/2$) gespiegelt sind.

Der höchst mögliche Drehimpuls für ein Bosonen-System ist $J_{max} = N \cdot j$. Für eine Fermionensystem ergibt sich aus dem M-Schema:

$$\begin{aligned} J_{max} &= j + (j - 1) + (j - 2) + \dots + j - (N - 1) \\ &= \sum_{i=0}^{N-1} (j - i) = N \cdot j - \frac{(N - 1)N}{2} \\ &= N \cdot j - \frac{N^2 - N}{2} \end{aligned} \tag{2.68}$$

und für die halb gefüllte Schale ($N = (2j + 1)/2$), welche den höchsten Gesamtdrehimpuls zulässt, erhält man:

$$J_{max} = \frac{1}{2}j^2 + \frac{1}{2}j + \frac{1}{8} \tag{2.69}$$

Die Anzahl aller Zustände inklusive aller magnetischen Unterzustände ist durch einen Binomialkoeffizienten gegeben (hierbei gilt: $n = 2j + 1$):

$$\begin{array}{c|c} \text{Fermionen} & \text{Bosonen} \\ \hline \binom{n}{N} & \binom{n + N - 1}{N} \end{array}$$

Aufgrund dieser Formeln ist klar, dass es unmöglich ist, alle Verteilungen der N Kugeln auf die n Körbe abzuspeichern oder auch nur mit einem Computerprogramm der Reihe nach zu generieren. Folgende Matrix zeigt die Anzahl der Verteilungen für verschiedene bosonische Systeme:

n	N	1	2	3	4	10	20	50	100
1		1	1	1	1	1	1	1	1
3		3	6	10	15	66	213	1326	5151
5		5	15	35	70	1001	$1 \cdot 10^4$	$3 \cdot 10^5$	$5 \cdot 10^6$
7		7	28	84	210	$8 \cdot 10^3$	$2 \cdot 10^5$	$3 \cdot 10^7$	$2 \cdot 10^9$
9		9	45	165	495	$4 \cdot 10^4$	$3 \cdot 10^6$	$2 \cdot 10^9$	$4 \cdot 10^{11}$
11		11	66	286	1001	$2 \cdot 10^5$	$3 \cdot 10^7$	$8 \cdot 10^{10}$	$5 \cdot 10^{13}$
13		13	91	455	1820	$6 \cdot 10^5$	$2 \cdot 10^8$	$2 \cdot 10^{12}$	$4 \cdot 10^{15}$
15		15	120	680	3060	$2 \cdot 10^6$	$1 \cdot 10^9$	$5 \cdot 10^{13}$	$3 \cdot 10^{17}$

Dieses Problem ist aufgrund des Pauliprinzipis für Fermionen stark reduziert. Es ist möglich, das Speicherplatzproblem zu umgehen, indem man die Verteilungen nacheinander generiert und jedes mal wieder überschreibt, sobald man das entsprechende M ermittelt und in einem Array mitgezählt hat. Dies löst aber nicht das Problem, zu viele Konfigurationen anschauen zu müssen. Angenommen der Computer schafft es, 10^{10} Verteilungen pro Sekunde zu untersuchen, dann braucht er immer noch 12 Tage für den Fall $n = 15$ und $N = 100$. Man kann einen Vorteil

daraus ziehen, dass man lediglich die Anzahl der Zustände $K_1(N, M)$ und nicht jede mögliche Verteilung der Kugeln auf die Körbe explizit benötigt. Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein entsprechendes Verfahren entwickelt. Für das obige Beispiel würde der Computer mit dem im Folgenden erklärten Algorithmus nur 0.1 Sekunde benötigen. Wie dies funktioniert, sieht man am einfachsten an einem Beispiel. Man betrachte den Fall $n = 5$ (d-Bosonen) und $N = 1$. In der folgenden Tabelle befindet sich links der Korb mit magnetischer Quantenzahl $m = -j$. Nach rechts wird m pro Korb um 1 heraufgezählt.

Konfiguration	M
• □ □ □ □	-2
□ • □ □ □	-1
□ □ • □ □	0
□ □ □ • □	1
□ □ □ □ •	2

Man kann nun alle Konfigurationen für $N = 2$ finden, indem man zu jeder Verteilung für $N = 1$ jeweils alle Möglichkeiten betrachtet, eine Kugel hinzuzufügen. Für die neue Kugel gibt es immer fünf Möglichkeiten. Es würden sich also 25 neue Verteilungen ergeben. Hierbei muss man aber die Austauschsymmetrie der Bosonen beachten. Das Zufügen einer Kugel zum Korb zwei (von links nach rechts gezählt) der ersten Zeile z.B. würde den gleichen Zustand ergeben wie ein Hinzufügen einer Kugel zum Korb eins der Zeile zwei. Diese beiden Zustände sind aufgrund der Austauschsymmetrie identisch. Eine korrekte Beachtung der Bose-Einstein-Statistik wird sichergestellt, wenn man eine zweite Kugel in der ersten Zeile in den Körben eins, zwei, drei, vier und fünf hinzufügt, in der zweiten Zeile jedoch nur in den Körben zwei, drei, vier und fünf. In Zeile drei erhalten nur die Körbe mit der Nummer drei, vier und fünf eine Kugel, in der letzten Zeile nur der fünfte Korb. Auf diese Weise erhält man 15 neue Zweiteilchen-Zustände. Der Übersichtlichkeit halber sind in der folgenden Tabelle mehrere neue Verteilungen in einer Zeile dargestellt. Die Kreise symbolisieren alle Möglichkeiten, das zweite Teilchen hinzuzufügen.

Konfiguration	M
•◦ □ □ □ □	-4, -3, -2, -1, 0
□ •◦ □ □ □	-2, -1, 0, 1
□ □ •◦ □ □	0, 1, 2
□ □ □ •◦ □	2, 3
□ □ □ □ •◦	4

Man erhält also in der ersten Zeile fünf neue Konfigurationen, in der zweiten Zeile vier neue usw. Würde man nun ein drittes Teilchen in der gleichen Weise hinzufügen wie das Zweite, so bekäme man zu viele Zustände, da die Austauschsymmetrie verletzt wäre. Um dieses Problem zu lösen, verschiebt man die i -te neue Konfiguration jeder Zeile $i - 1$ Zeilen nach unten. Im Detail bedeutet dies, dass man aus der ersten Zeile die '-3' in die zweite Zeile verschiebt, die '-2' in dritte Zeile usw. Aus der zweiten Zeile verschiebt man die '-1' zur dritten Zeile, die '0' zur vierten usw. Aus der letzten Zeile wird nichts verschoben. Nach dieser Prozedur erhält man eine neue Ordnung von magnetischen Quantenzahlen in den entsprechenden Zeilen.

Zeile	M
1	-4
2	-2, -3
3	0, -1
4	2, 1, 0, -1
5	4, 3, 2, 1, 0

Jetzt kann man ein drittes Teilchen in der gleichen Weise hinzufügen wie schon das zweite. Es ist sinnvoll, sich nur zu merken wie oft eine bestimmte M -Quantenzahl vorkommt. In der folgenden Tabelle geschieht dies durch einen Index. Für drei Teilchen erhält man:

Zeile	M
1	-6_1
2	$-5_1, -4_1, -3_1$
3	$-4_1, -3_1, -2_2, -1_1, 0_1$
4	$-3_1, -2_1, -1_2, 0_2, 1_2, 2_1, 3_1$
5	$-2_1, -1_1, 0_2, 1_2, 2_3, 3_2, 4_2, 5_1, 6_1$

Der benötigte Speicherplatz für diese Methode wächst linear mit der Teilchenzahl N und die Laufzeit ist $O(N^2)$. Der Rest des Algorithmus arbeitet wie bereits weiter oben diskutiert. Um das Problem des evtl. zu großen Speicherbedarfs für alle Quantenzahlen aller Zustände zu umgehen, werden bei mehreren Zuständen mit gleichem N , ν und J lediglich die Anzahl derer gespeichert. Diese Methode ist für Bosonen mit beliebigem Spin anwendbar und mit einer kleinen Modifikation auch für Fermionen. Will man die Quantenzahlen für fermionische Zustände finden, so ist lediglich darauf zu achten, nicht mehr als ein Teilchen in den gleichen Korb zu legen. Dies bedeutet, immer die erste neuen Konfiguration jeder Zeile wegzulassen.

Mit dem oben beschriebenen Algorithmus ist es also möglich, auf effiziente Weise Quantenzahlen für identische Teilchenzustände zu finden ohne weitere Kenntnis der zugrundeliegenden algebraischen Struktur des Problems zu benötigen. Insbesondere wird nicht die Verzweigungsregel der Reduktion $SO(n) \supset SO(3)$ bzw. $USp(n) \supset SU(2)$ benötigt, welche schwierig herzuleiten ist. Ganz allgemein zählt die Herleitung von Verzweigungsregeln zu den schwierigsten Problemen der Algebra.

2.5.3 Koppeln der Teilsysteme

Im Kapitel 2.5.2 wurde beschrieben, wie eine Basis für ein System aus nur einer Teilchensorte in Form von Quantenzahlen generiert werden kann. Hiermit sind im Sinne der Quantenmechanik ununterscheidbare Teilchen gemeint. Besteht das verwendete Modell aus mehr als einer Teilchensorte, so müssen die entsprechenden Teilsysteme aus identischen Teilchen zusammengekoppelt werden. Da jede neue Möglichkeit diese Teilsysteme zum gewünschten Drehimpuls J zu koppeln, einen neuen zu den anderen Zuständen orthogonalen Zustand erzeugt, ergibt sich die Anzahl der insgesamt möglichen Zustände aus der Anzahl der möglichen Kopplungen. Besteht das Modell z.B. aus s-, d-, und f-Bosonen, so muss man zunächst alle erlaubten Teilchenzahlen der drei Bosonensorten ermitteln. Für $N = 2$ existieren 6 mögliche Kombinationen von Teilchenzahlen für die drei Bosonenarten.

n_s	n_d	n_f
2	0	0
1	1	0
1	0	1
0	2	0
0	1	1
0	0	2

Es sind also alle Quantenzahlen für die identischen Teilchenzustände aus s-, d- und f-Bosonen jeweils für die Teilchenzahlen 0, 1 und 2 zu ermitteln. Diese Zustände sind in der folgenden Tabelle aufgeführt.

s-Bosonen	d-Bosonen	f-Bosonen
$ 0, 0, 0, 0\rangle$	$ 0, 0, 0, 0\rangle$	$ 0, 0, 0, 0\rangle$
$ 1, 1, 0, 0\rangle$	$ 1, 1, 0, 2\rangle$	$ 1, 1, 0, 3\rangle$
$ 2, 0, 0, 0\rangle$	$ 2, 0, 0, 0\rangle$	$ 2, 0, 0, 0\rangle$
	$ 2, 2, 0, 2\rangle$	$ 2, 2, 0, 2\rangle$
	$ 2, 2, 0, 4\rangle$	$ 2, 2, 0, 4\rangle$
		$ 2, 2, 0, 6\rangle$

Angenommen wir sind an Basiszuständen mit allen möglichen Drehimpulsen interessiert, dann sind die Quantenzahlen der Basiszustände wie folgt:

Konfiguration	Quantenzahlen
$(2, 0, 0)$	$ 1\rangle = [[2, 0, 0, 0\rangle \times 0, 0, 0, 0\rangle]^0 \times 0, 0, 0, 0\rangle]^0$
$(1, 1, 0)$	$ 2\rangle = [[1, 1, 0, 0\rangle \times 1, 1, 0, 2\rangle]^2 \times 0, 0, 0, 0\rangle]^2$
$(1, 0, 1)$	$ 3\rangle = [[1, 1, 0, 0\rangle \times 0, 0, 0, 0\rangle]^0 \times 1, 1, 0, 3\rangle]^3$
$(0, 2, 0)$	$ 4\rangle = [[0, 0, 0, 0\rangle \times 2, 0, 0, 0\rangle]^0 \times 0, 0, 0, 0\rangle]^0$
$(0, 2, 0)$	$ 5\rangle = [[0, 0, 0, 0\rangle \times 2, 2, 0, 2\rangle]^2 \times 0, 0, 0, 0\rangle]^2$
$(0, 2, 0)$	$ 6\rangle = [[0, 0, 0, 0\rangle \times 2, 2, 0, 4\rangle]^4 \times 0, 0, 0, 0\rangle]^4$
$(0, 1, 1)$	$ 7\rangle = [[0, 0, 0, 0\rangle \times 1, 1, 0, 2\rangle]^2 \times 1, 1, 0, 3\rangle]^1$
$(0, 1, 1)$	$ 8\rangle = [[0, 0, 0, 0\rangle \times 1, 1, 0, 2\rangle]^2 \times 1, 1, 0, 3\rangle]^2$
$(0, 1, 1)$	$ 9\rangle = [[0, 0, 0, 0\rangle \times 1, 1, 0, 2\rangle]^2 \times 1, 1, 0, 3\rangle]^3$
$(0, 1, 1)$	$ 10\rangle = [[0, 0, 0, 0\rangle \times 1, 1, 0, 2\rangle]^2 \times 1, 1, 0, 3\rangle]^4$
$(0, 1, 1)$	$ 11\rangle = [[0, 0, 0, 0\rangle \times 1, 1, 0, 2\rangle]^2 \times 1, 1, 0, 3\rangle]^5$
$(0, 0, 2)$	$ 12\rangle = [[0, 0, 0, 0\rangle \times 0, 0, 0, 0\rangle]^0 \times 2, 0, 0, 0\rangle]^0$
$(0, 0, 2)$	$ 13\rangle = [[0, 0, 0, 0\rangle \times 0, 0, 0, 0\rangle]^0 \times 2, 2, 0, 2\rangle]^2$
$(0, 0, 2)$	$ 14\rangle = [[0, 0, 0, 0\rangle \times 0, 0, 0, 0\rangle]^0 \times 2, 2, 0, 4\rangle]^4$
$(0, 0, 2)$	$ 15\rangle = [[0, 0, 0, 0\rangle \times 0, 0, 0, 0\rangle]^0 \times 2, 2, 0, 6\rangle]^6$

Die möglichen Drehimpulse ergeben sich hierbei aus der bekannten Verzweigungsregel der Reduktion $SU(2) \times SU(2) \supset SU(2)$, welche bekanntlich $|J_1 - J_2| \leq J \leq J_1 + J_2$ lautet. Selbstverständlich ist diese Wahl der Kopplungsreihenfolge willkürlich. Je nach verwendetem Modell kann ein anderes Kopplungsschema sinnvoll sein. Verwendet man beispielsweise zwei verschiedene Arten von Einteilchenzustände (z.B. einen Satz von Einteilchenzuständen für Protonen und einen anderen für Neutronen), so ist es angenehm, den Hamiltonian bezüglich einer Basis zu berechnen, welche erst alles zu jeweils einer der beiden Arten gehörendes zusammen koppelt und am Schluss die beiden Teilsysteme. Dies wird für gewöhnlich bei der Verwendung des sd-IBM2 gemacht. Dieses Modell besteht aus Proton-s- und Proton-d-Bosonen (s_p und d_p) sowie Neutron-s- und Neutron-d-Bosonen (s_n und d_n). Die Anzahl der Proton- und Neutron-Bosonen ist separat erhalten. Daher bietet sich hier an, zuerst das s_p -System mit dem d_p -System zu koppeln. Dann wird das s_n - mit d_n -System und letztlich das Protonen- mit dem Neutronensystem zu dem gewünschten J gekoppelt. Folgende Gleichung zeigt dies schematisch:

$$|\Psi\rangle = [|[s_p\rangle \times |d_p\rangle]^{J_p} \times |[s_n\rangle \times |d_n\rangle]^{J_n}]^J \quad (2.70)$$

Die Basiszustände, welche durch das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Programm benutzt werden, sind jedoch aus Konsistenzgründen unabhängig vom verwendeten Modell immer in der weiter oben beschriebenen Weise gekoppelt.

$$|\Psi\rangle = [|[s_p\rangle \times d_p]^{J_1} \times |s_n\rangle]^{J_2} \times |d_n\rangle]^J \quad (2.71)$$

Eine sinnvolle Erweiterung wäre die Programmierung einer entsprechenden Option, die es erlaubt, die Reihenfolge der Kopplung frei zu wählen. Beinhaltet das verwendete Modell n unterscheidbare Teilchen, so nehmen die verwendeten Basisvektoren folgende Form an:

$$|\Psi\rangle = [..|[N_1, \nu_1, \Delta_1, j_1\rangle \times |N_2, \nu_2, \Delta_2, j_2\rangle]^{J_2} \times .. \times |N_n, \nu_n, \Delta_n, j_n\rangle]^{J_n} \quad (2.72)$$

2.6 Die Berechnung von Matrixelementen

Im Kapitel 2.5 wurde beschrieben, wie eine Vielteilchenbasis in Form von Quantenzahlen für ein beliebiges Modell generiert werden kann. Dieser Abschnitt beschreibt, wie Matrixelemente beliebiger Operatoren bezüglich dieser Basis auf sogenannte *Coeffitients of Fractional Parentage* (CFP) zurückgeführt werden können. Alle Operatoren werden im Formalismus der zweiten Quantisierung durch eine Summe von Produkten aus Erzeuger- und Vernichteroperatoren ausgedrückt. Da alle Terme des Hamiltonians zu gutem Drehimpuls gekoppelt sind, verwendet man für gewöhnlich folgende Form:

$$\hat{O} = \sum_{a,b,J} C_{a,b,J} \cdot [c_{n_a,j_a}^\dagger \times \tilde{c}_{n_a,j_a}]^{(J)} + \sum_{a,b,J_{ab},c,d,J_{cd},J} C_{a,b,J_{ab},c,d,J_{cd},J} \cdot [[c_{n_a,j_a}^\dagger \times c_{n_b,j_b}^\dagger]^{(J_{ab})} \times [\tilde{c}_{n_c,j_c} \times \tilde{c}_{j_d,n_d}]^{(J_{cd})}]^{(J)} \quad (2.73)$$

Hierbei wurden nur Ein- und Zweikörperterme berücksichtigt. Grundsätzlich kann ein Operator auch Terme höherer Ordnung enthalten. Zum Beschreiben von z.B. Transferreaktionen verwendet man Operatoren, welche die Teilchenzahl nicht erhalten. Diese werden hier nicht betrachtet. Für die Zweikörperterme kann auch eine andere Reihenfolge der Kopplung benutzt werden. Anstatt zwei Erzeuger und zwei Vernichter paarweise zu koppeln, könnte man auch immer einen Erzeuger mit einem Vernichter koppeln. Operatoren dieser Form können jedoch durch Operatoren der Form (2.73) ausgedrückt werden. Folgende Gleichung zeigt dies schematisch.

$$[[c_1^\dagger \times \tilde{c}_2]^{(J_1)} \times [c_3^\dagger \times \tilde{c}_4]^{(J_2)}]^{(J_3)} = \sum [[c_1^\dagger \times c_3^\dagger]^{(J_a)} \times [\tilde{c}_2 \times \tilde{c}_4]^{(J_b)}]^{(J_c)} + \sum [c_1^\dagger \times \tilde{c}_4]^{(J_a)} \quad (2.74)$$

Wie diese Rechnung im Detail aussieht, ist in Kapitel C.2 dargelegt. Die Verwendung der Form $F_2 = [[c^\dagger c^\dagger] \times [\tilde{c}\tilde{c}]]$ hat gegenüber der Form $F_1 = [[c^\dagger \tilde{c}] \times [c^\dagger \tilde{c}]]$ einen großen Vorteil: Alle Operatoren der Form F_2 sind linear unabhängig, d.h. kein Operator dieser Form kann durch eine Linearkombination der anderen ausgedrückt werden. Dies ist für Operatoren der Form F_1 im Allgemeinen nicht der Fall.

Sei nun $|\Psi_i\rangle$ eine Basis wie in Kapitel 2.5.3 beschrieben. Bevor ein Operator wie der Hamiltonian diagonalisiert werden kann, müssen seine Matrixelemente $H_{ij} = \langle \Psi_i | \hat{H} | \Psi_j \rangle$ berechnet werden. Um dies zu erreichen, drückt man die Matrixelemente durch reduzierte Matrixelemente der elementaren Erzeuger und Vernichteroperatoren aus. Diese elementaren Matrixelemente zu berechnen ist aufwendig, jedoch ist die Anzahl gering genug, um sie in einer Datei ablegen zu können. Diese Datei muss also nur einmalig erstellt werden. Details hierzu werden in Kapitel 2.7 erklärt. Die Aufgabe lautet also zunächst die H_{ij} durch Matrixelemente der Erzeuger c^\dagger und Vernichter \tilde{c} auszudrücken. Hierfür bedient man sich zunächst des reduzierten Matrixelements [10].

$$\langle \alpha_1, j_1, m_1 | \hat{O}_m^{(j)} | \alpha_2, j_2, m_2 \rangle =: (-)^{j_1-m_1} \begin{pmatrix} j_1 & j & j_2 \\ -m_1 & m & m_2 \end{pmatrix} \langle \alpha_1, j_1 | | \hat{O}^{(j)} | | \alpha_2, j_2 \rangle_T \quad (2.75)$$

Diese Definition des reduzierten Matrixelements ist reine Konvention. Mit dem Index T wird angedeutet, dass es sich hier um die gleiche Konvention handelt, die in [10] verwendet wird. Eine andere gebräuchliche Konvention ist:

$$\langle \alpha_1, j_1, m_1 | \hat{O}_m^{(j)} | \alpha_2, j_2, m_2 \rangle =: \langle j_2, m_2, j, m | j_1, m_1 \rangle \langle \alpha_1, j_1 | | \hat{O}^{(j)} | | \alpha_2, j_2 \rangle \quad (2.76)$$

In [10] sind folgende Rechenregeln angegeben, mittels derer sich alle Matrixelemente auf reduzierte Matrixelemente der c^\dagger und \tilde{c} bezüglich einer Basis aus identischen Teilchen zurückführen lassen.

Das Matrixelement eines Operators, welcher aus zwei Operatoren besteht, die auf unterschiedliche Teilsysteme wirken, kann durch das Produkt der Matrixelemente der Teilsysteme

ausgedrückt werden.

$$\begin{aligned} \langle \alpha_1, J_1, \alpha_2, J_2, J || [T^{(k_1)}(1) \times T^{(k_2)}(2)]^{(k)} || \alpha'_1, J'_1, \alpha'_2, J'_2, J' \rangle_T = \\ \sqrt{(2J+1)(2k+1)(2J'+1)} \begin{Bmatrix} J_1 & J_2 & J \\ J'_1 & J'_2 & J' \\ k_1 & k_2 & k \end{Bmatrix} \times \\ \langle \alpha_1, J_1 || T^{(k_1)} || \alpha'_1, J'_1 \rangle_T \langle \alpha_2, J_2 || T^{(k_2)} || \alpha'_2, J'_2 \rangle_T \end{aligned} \quad (2.77)$$

Beziehen sich die beiden Komponenten des Operators auf das gleiche System, so kann das Matrixelement durch eine Summe von Matrixelementen der Komponenten ausgedrückt werden.

$$\begin{aligned} \langle \alpha_1, J_1 || [T^{(k_1)} \times T^{(k_2)}]^{(k)} || \alpha_2, J_2 \rangle_T = (-)^{J_1+J_2+k} \sqrt{2k+1} \times \\ \sum_{\alpha', J'} \begin{Bmatrix} k_1 & k_2 & k \\ J_2 & J_1 & J' \end{Bmatrix} \langle \alpha_1, J_1 || T^{(k_1)} || \alpha', J' \rangle_T \langle \alpha', J' || T^{(k_2)} || \alpha_2, J_2 \rangle_T \end{aligned} \quad (2.78)$$

Bestehen die Zustände aus mehreren Teilsystemen, der Operator bezieht sich jedoch nur auf eines dieser Teilsysteme, so kann das Matrixelement durch das Matrixelement des Operators bezüglich des Teilsystems ausgedrückt werden, auf das er sich bezieht.

$$\begin{aligned} \langle \alpha_1, J_1, \alpha_2, J_2, J || T^{(k)}(2) || \alpha'_1, J'_1, \alpha'_2, J'_2, J' \rangle_T = \\ (-)^{J_1+J'_2+J+k} \sqrt{(2J+1)(2J'+1)} \langle \alpha_2, J_2 || T^{(k)} || \alpha'_2, J'_2 \rangle_T \times \\ \begin{Bmatrix} J_2 & J & J_1 \\ J' & J'_2 & k \end{Bmatrix} \delta_{\alpha_1, \alpha'_1} \delta_{J_1, J'_1} \end{aligned} \quad (2.79)$$

$$\begin{aligned} \langle \alpha_1, J_1, \alpha_2, J_2, J || T^{(k)}(1) || \alpha'_1, J'_1, \alpha'_2, J'_2, J' \rangle_T = \\ (-)^{J_1+J_2+J'+k} \sqrt{(2J+1)(2J'+1)} \langle \alpha_1, J_1 || T^{(k)} || \alpha'_1, J'_1 \rangle_T \times \\ \begin{Bmatrix} J_1 & J & J_2 \\ J' & J'_1 & k \end{Bmatrix} \delta_{\alpha_2, \alpha'_2} \delta_{J_2, J'_2} \end{aligned} \quad (2.80)$$

Durch evtl. mehrfaches Anwenden einer oder mehrerer dieser Gleichungen, können also beliebige Matrixelemente durch die $\langle N, \nu_1, \Delta_1, J_1 | c^\dagger | N-1, \nu_2, \Delta_2, J_2 \rangle$ und $\langle N, \nu_1, \Delta_1, J_1 | \tilde{c} | N+1, \nu_2, \Delta_2, J_2 \rangle$ ausgedrückt werden. Die Schwierigkeit besteht jetzt lediglich noch darin, diese elementaren Matrixelemente zu berechnen.

2.7 Das CFP-Problem

Ein CFP ist im Formalismus der zweiten Quantisierung bis auf einen einfachen Vorfaktor nichts anderes als ein reduziertes Matrixelement eines elementaren Erzeuger- bzw. Vernichter-Operators.

$$\langle N-1, \Delta_2, \nu_2, J_2, j, J_1 | \} j^N \nu_1, \Delta_1, J_1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \langle N, \nu_1, \Delta_1, J_1 | c^\dagger | N-1, \nu_2, \Delta_2, J_2 \rangle \quad (2.81)$$

In der ersten Quantisierung kommt dem CFP eine etwas kompliziertere Bedeutung zu, die mit dem Symmetrisieren bzw. Antisymmetrisieren von Zuständen identischer Teilchen zusammenhängt. In der zweiten Quantisierung entfällt dies. Wie die Formeln aus Kapitel 2.6 erkennen lassen, kommt der Berechnung dieser Koeffizienten eine große Bedeutung zu, da sich die Matrixelemente aller Operatoren durch sie ausdrücken lassen. Unglücklicherweise existieren keine geschlossenen Ausdrücke, durch die sich die CFPs einfach berechnen lassen. Stattdessen sind mehrere bezüglich der Teilchenzahl iterative Methoden entwickelt worden.

Eine Möglichkeit besteht darin, die Redmond-Rekursions-Formel [15] zu benutzen. Diese Relation wurde von de-Shalit und Talmi verallgemeinert [16]. Mit Hilfe dieser Formel werden CFPs zur Teilchenzahl N durch solche zur Teilchenzahl $N - 1$ ausgedrückt. Allerdings ist die hierbei verwendete Basis übervollständig und nicht orthogonal.

Eine weitere Möglichkeit besteht darin, einen entsprechenden Operator zu diagonalisieren [17]. Die Matrixelemente des zu diagonalisierenden Operators für CFPs zur Teilchenzahl N werden hierbei durch die CFPs zur Teilchenzahl $N - 1$ ausgedrückt. Die Methode ist also ebenfalls rekursiv und beinhaltet das Diagonalisieren einer Matrix. Die Dimension dieser Matrix entspricht der Anzahl der CFPs für die Teilchenzahl N und nimmt daher mit steigender Teilchenzahl rasch zu. Außerdem ist die numerische Stabilität fragwürdig, da sich die Eigenwerte selbst durch kleine Änderungen der Matrixelemente stark unterscheiden können.

Es existieren viele Verbesserungen und Implementierungen dieser iterativen Verfahren [18, 19, 20, 21, 22]. Besonders erwähnenswert ist auch ein Verfahren von H. Sun [23, 24] und die entsprechende Implementierung [25, 26, 27]. Hierbei wird der CFP faktorisiert und die einzelnen Faktoren berechnet. Nur einer dieser Faktoren kann nicht auf einfache Weise berechnet werden. Für diesen ist ein rekursives Verfahren angegeben. Die Methode von H. Sun zeichnet sich durch Geschwindigkeit und hohe numerische Stabilität aus.

Ein prinzipieller Nachteil von iterativen Algorithmen ist die Fortpflanzung numerischer Fehler. Angenommen eine gegebene Implementierung eines Algorithmus zur CFP-Berechnung liefert eine hohe numerische Präzision für alle Koeffizienten der Teilchenzahl N , dann ist noch nicht klar, ob das gleiche Programm auch für eine Teilchenzahl $2N$ korrekte Ergebnisse liefert. Die numerische Stabilität wird im Allgemeinen in komplizierter Weise von der Teilchenzahl abhängen. Da alle Matrixelemente des Hamiltonians durch die CFPs ausgedrückt werden, ist eine Berechnung mit hoher Genauigkeit jedoch unbedingt notwendig. Des Weiteren können kleine Fehler in den Matrixelementen zu großen Fehlern bei den Koeffizienten der Wellenfunktion führen, was die Notwendigkeit einer sehr genauen Berechnung nochmals unterstreicht. Da ein CFP aber immer als Wurzel über eine rationale Zahl ausgedrückt werden kann (CFP = $\pm\sqrt{n_1/n_2}$ mit $n_1, n_2 \in \mathbb{N}$), ist eine Berechnung ohne numerische Fehler denkbar. Des Weiteren ist es auch denkbar, dass man für spezielle Anwendungen einige aber bei weitem nicht alle CFPs der Teilchenzahl N braucht. Da die bisher bekannten Verfahren aber rekursiv arbeiten, müssten mehr oder weniger alle CFPs mit niedrigeren Teilchenzahlen berechnet werden. Dies kann ein Problem werden, wenn die Anzahl der Koeffizienten so groß wird, dass man Schwierigkeiten mit der Speicherung bekommt. Diese Probleme können sowohl bei der letztendlichen Speicherung in einer Datei als auch im Speicher des Computers während der Berechnung auftreten, da bei der Berechnung jedes CFPs auf sehr viele CFPs geringerer Teilchenzahl zugegriffen werden muss. Wünschenswert ist daher ein Algorithmus mit den folgenden Eigenschaften:

- Die CFP-Koeffizienten sollen ohne numerischen Fehler in der Darstellung $\pm\sqrt{n_1/n_2}$ mit $n_1, n_2 \in \mathbb{N}$ berechnet werden.
- Das Verfahren soll nicht rekursiv sein. Es soll möglich sein, einzelne CFP zu berechnen.
- Der benötigte Arbeitsspeicher muss auch für hohes N gering sein.
- Der Algorithmus soll CFPs sowohl für Bosonen als auch für Fermionen mit beliebigem Spin berechnen können.
- Das Verfahren soll die reduzierten Matrixelemente der Erzeugeroperatoren bezüglich einer beliebigem Basis generieren können.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Algorithmus entwickelt und implementiert, der alle oben beschriebenen Anforderungen erfüllt. Wie dieser Algorithmus arbeitet, wird im Folgenden erklärt.

Das reduzierte Matrixelement jedes sphärischen Tensoroperators lässt sich (im Formalismus der zweiten Quantisierung) durch die reduzierten Matrixelemente der Erzeuger und Vernichter

ausdrücken. Da gilt

$$\begin{aligned} \langle N, \nu_1, \Delta_1, J_1, M_1 | c_{j,m}^\dagger | N-1, \nu_2, \Delta_2, J_2, M_2 \rangle &= \\ (-)^{j-m} \langle N-1, \nu_2, \Delta_2, J_2, M_2 | \tilde{c}_{j,-m} | N, \nu_1, \Delta_1, J_1, M_1 \rangle & \quad (2.82) \end{aligned}$$

braucht man nur z.B. die Matrixelemente der Erzeuger zu berechnen. Das Matrixelement faktorisiert in die isoskalaren Faktoren der Gruppenkette zu den entsprechenden Quantenzahlen sowie ein leicht anzugebendes 3-fach reduziertes Matrixelement [23, 24].

$$\begin{aligned} \langle N_1, \nu_1, \Delta_1, J_1, M_1 | c_{j,m}^\dagger | N_1-1, \nu_2, \Delta_2, J_2, M_2 \rangle &= \underbrace{\langle N_1 | | | | c^\dagger | | | | N_1-1 \rangle}_{=\sqrt{N_1}} \times \\ \left[\begin{array}{c|c} [1] & [N_1-1] \\ \hline (1) & (\nu_2) \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|c} [N_1] & \\ \hline (\nu_1) & \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|c} (1) & (\nu_2) \\ \hline j & \Delta_2 J_2 \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|c} (\nu_1) & \\ \hline \Delta_1 J_1 \end{array} \right] & \langle J_2, M_2, j, m | J_1, M_1 \rangle \quad (2.83) \end{aligned}$$

Die Berechnung des Clebsch-Gordan-Koeffizienten ist kein Problem und für den isoskalaren Faktor bezüglich Teilchenzahl und Seniorität existiert ein geschlossener Ausdruck. In der total symmetrischen bzw. antisymmetrische Darstellung (da es sich um identische Teilchen handelt, sind hier nur diese beiden Fälle interessant) ist er gegeben durch

$$\left[\begin{array}{c|c} [1] & [N_1-1] \\ \hline (1) & (\nu_2) \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|c} [N_1] & \\ \hline (\nu_1) & \end{array} \right] = \begin{cases} \sqrt{\frac{\nu_1(N_1+\nu_1+n-2)}{N_1(2\nu_1+n-2)}} & \text{Bosonen, } \nu_1 - \nu_2 = 1 \\ \sqrt{\frac{(N_1-\nu_1)(\nu_1+n-2)}{N_1(2\nu_1+n-2)}} & \text{Bosonen, } \nu_1 - \nu_2 = -1 \\ \sqrt{\frac{\nu_1(n-N_1-\nu_1+2)}{N_1(n-2\nu_1+2)}} & \text{Fermionen, } \nu_1 - \nu_2 = 1 \\ -\sqrt{\frac{(N_1-\nu_1)(n-\nu_1+2)}{N_1(n-2\nu_1+2)}} & \text{Fermionen, } \nu_1 - \nu_2 = -1 \end{cases} \quad (2.84)$$

Es bleibt also noch der isoskalare Faktor der Gruppen, welche zur Senioritäts- und Drehimpulsquantenzahl gehören, übrig. Die Berechnung dieses Faktors ist deshalb nicht einfach, weil bei der Reduktion der entsprechenden Gruppen eine Multiplizität größer eins auftritt. Bezüglich der Quantenzahlen bedeutet dies, dass ein sog. „missing label“ auftritt. Ganz allgemein ist die Berechnung von isoskalaren Faktoren eines der schwierigsten Probleme der Algebra [28]. Da gilt

$$\left[\begin{array}{c|c} (1) & (\nu_1) \\ \hline j & \Delta_1 J_1 \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|c} (\nu_1-1) & \\ \hline \Delta_2 J_2 \end{array} \right] = F(j, J_1, J_2, \nu_1, n) \cdot \left[\begin{array}{c|c} (1) & (\nu_1-1) \\ \hline j & \Delta_2 J_2 \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|c} (\nu_1) & \\ \hline \Delta_1 J_1 \end{array} \right] \quad (2.85)$$

mit

$$F(j, J_1, J_2, \nu_1, n) = \begin{cases} (-)^{j+J_1+J_2} \sqrt{\frac{\nu_1(2\nu_1+n-4)(2J_1+1)}{(\nu_1+n-3)(2\nu_1+n-2)(2J_2+1)}} & \text{für Bosonen} \\ (-)^{J_2-j-J_1} \sqrt{\frac{\nu_1(n-2\nu_1+4)(2J_1+1)}{(n-\nu_1+3)(n-2\nu_1+2)(2J_2+1)}} & \text{für Fermionen} \end{cases} \quad (2.86)$$

genügt es, nur diejenigen isoskalaren Faktoren zu berechnen, die zu $\nu_1 - \nu_2 = 1$ gehören. Setzt man $N_1 = \nu_1$, so ist der entsprechende isoskalare Faktor in Gleichung (2.84) gleich 1. Für ν_2 ist dann nur noch der Wert $\nu_2 = \nu_1 - 1$ zugelassen und man erhält aus (2.83) die Beziehung:

$$\frac{\langle \nu_1, \nu_1, \Delta_1, J_1, M_1 | c_{j,m}^\dagger | \nu_1-1, \nu_1-1, \Delta_2, J_2, M_2 \rangle}{\sqrt{\nu_1} \langle J_2, M_2, j, m | J_1, M_1 \rangle} = \left[\begin{array}{c|c} (1) & (\nu_1-1) \\ \hline j & \Delta_2 J_2 \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|c} (\nu_1) & \\ \hline \Delta_1 J_1 \end{array} \right] \quad (2.87)$$

Hat man also alle Zustände mit maximaler Seniorität und einer beliebigen magnetischen Quantenzahl (der isoskalare Faktor hängt nicht von M_1, M_2 und m ab, es muss lediglich $M_2 + m = M_1$ gelten) gegeben und kann die Wirkung von c^\dagger auf einen Zustand sowie Skalarprodukte zwischen Zuständen berechnen, so kennt man alle CFPs. Im Folgenden wird eine Methode beschrieben, mit der die Zustände explizit berechnet werden können.

Im Formalismus der zweiten Quantisierung können beliebige Zustände als Polynome in den Erzeugeroperatoren angewendet auf das Teilchenvakuum geschrieben werden.

$$|N, \nu, \Delta, J, M\rangle = \mathcal{P}(c_{j,-m}^\dagger, \dots, c_{j,m}^\dagger) |0\rangle \quad (2.88)$$

\mathcal{P} ist eine Summe über Produkte der Erzeugeroperatoren. Mit der Konvention

$$\begin{aligned} x_i &:= c_i^\dagger := c_{j,-j-1+i}^\dagger \\ \partial_{x_i} &:= c_i := c_{j,-j-1+i} \end{aligned} \quad (2.89)$$

und der Identifizierung des Polynoms mit dem Zustand (also $\mathcal{P} := \mathcal{P}|0\rangle$) erhält man eine handliche Schreibweise ($\underline{n} := (n_1, n_2, \dots, n_{2j+1})$).

$$|N, \nu, \Delta, J, M\rangle = \sum_{\underline{n}} a_{\underline{n}} \prod_{i=1}^{2j+1} x_i^{n_i} \quad (2.90)$$

Die Zustände bzw. Polynome sind charakterisiert durch die Forderung der Orthonormalität sowie

$$\begin{aligned} \hat{C}_1[U(n)]|N, \nu, \Delta, J, M\rangle &= N|N, \nu, \Delta, J, M\rangle \\ \hat{C}_2[SO(n)]|N, \nu, \Delta, J, M\rangle &= \nu(\nu + n - 2)|N, \nu, \Delta, J, M\rangle \\ \hat{C}_2[SO(3)]|N, \nu, \Delta, J, M\rangle &= J(J + 1)|N, \nu, \Delta, J, M\rangle \\ \hat{C}_1[SO(2)]|N, \nu, \Delta, J, M\rangle &= M|N, \nu, \Delta, J, M\rangle \end{aligned} \quad (2.91)$$

für Bosonen bzw.

$$\begin{aligned} \hat{C}_1[U(n)]|N, \nu, \Delta, J, M\rangle &= N|N, \nu, \Delta, J, M\rangle \\ \hat{C}_2[USp(n)]|N, \nu, \Delta, J, M\rangle &= \nu(n - \nu + 2)|N, \nu, \Delta, J, M\rangle \\ \hat{C}_2[SU(2)]|N, \nu, \Delta, J, M\rangle &= J(J + 1)|N, \nu, \Delta, J, M\rangle \\ \hat{C}_1[SO(2)]|N, \nu, \Delta, J, M\rangle &= M|N, \nu, \Delta, J, M\rangle \end{aligned} \quad (2.92)$$

für Fermionen. Um die Wirkung der Casimiroperatoren auf die Zustandspolynome berechnen zu können, müssen diese durch die elementaren Erzeuger- und Vernichteroperatoren ausgedrückt werden (siehe Kapitel 3). Danach können durch (2.89) leicht lineare Gleichungssysteme für die Koeffizienten $a_{\underline{n}}$ aufgestellt werden. Da es möglich ist, diese Polynome direkt mit guter Teilchenzahl und guter magnetischer Quantenzahl zu erzeugen, bleibt die Dimension der Gleichungssysteme in akzeptablen Grenzen. Wie Polynome mit gutem N und M direkt erzeugt werden können, ist in Kapitel 2.8 beschrieben. Die Polynome sind durch diese Gleichungssysteme jedoch nicht eindeutig festgelegt. Zum Einen besteht noch die Wahl der Phase und zum Anderen hat man in den Unterräumen mit gleichen Quantenzahlen N, ν, J, M (also die durch die Multiplizität von $SO(n) \supset SO(3)$ bzw. $USp(n) \supset SU(2)$ aufgespannten Räume) immer noch die Freiheit, sich eine beliebige orthonormale Basis zu wählen. Die Dimension des Lösungsraumes entspricht der Multiplizität. Für genauere Informationen zu den Casimiroperatoren und deren Eigenwerte siehe Kapitel 3.

Aus der ersten Gleichung von (2.91) bzw. (2.92) folgt

$$\sum_{i=1}^{2j+1} n_i = N \quad (2.93)$$

also Homogenität von \mathcal{P} . Aus den jeweils letzten Gleichungen folgt

$$\sum_{i=1}^{2j+1} (-j - 1 + i)n_i = M \quad (2.94)$$

Damit ist festgelegt aus welchen Termen das Polynom besteht. Die anderen beiden Gleichungen legen ein Gleichungssystem für die Koeffizienten des Polynoms fest. Damit ist das Problem prinzipiell gelöst. Da man jedoch nur die Zustände mit höchster Seniorität sowie höchster

magnetischer Quantenzahl braucht (siehe Gleichung (2.87)), kann man zum Bestimmen der Koeffizienten auch ein Gleichungssystem, welches durch den Paarvernichter \tilde{P} und den $SO(2)$ Aufsteigeroperator \hat{L}_+ bestimmt wird, verwenden:

$$\begin{aligned}\tilde{P}|N, N, \Delta, J, J\rangle &= 0 \\ \hat{L}_+|N, N, \Delta, J, J\rangle &= 0\end{aligned}\tag{2.95}$$

Die Anzahl der Terme jeder Gleichung wird grob durch die Anzahl der Terme der Operatoren bestimmt. Daher ist die Verwendung von \tilde{P} und \hat{L}_+ für den Computer günstiger als die Casimiroperatoren. Da die Anzahl der Terme jeder Gleichung für gegebenen Teilchenspin konstant ist, ist das Gleichungssystem dünn besetzt, was einige Vorteile mit sich bringt (siehe Kapitel 2.10). Die explizite Darstellung der Operatoren ist

$$\tilde{P} = \sqrt{2j+1}(\tilde{c} \times \tilde{c})^{(0)} = \sum_m (-)^{3j-m} c_{-m} c_m = \sum_{i=1}^n (-)^{1+i} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_{n+1-i}}\tag{2.96}$$

und

$$\begin{aligned}\hat{L}_+ &= \sqrt{\frac{j(j+1)(2j+1)}{3}} (c^\dagger \times \tilde{c})_1^{(1)} \\ &= - \sum_m \frac{1}{2} \sqrt{\frac{(n-1+2m)(n+1-2m)}{2}} c_m^\dagger c_{m-1} \\ &= - \sum_{i=2}^n \sqrt{\frac{(i-1)(n+1-i)}{2}} x_i \frac{\partial}{\partial x_{i-1}}\end{aligned}\tag{2.97}$$

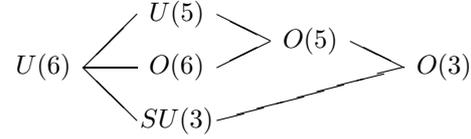
Alle im Gleichungssystem auftretenden Koeffizienten können in der Darstellung $\pm\sqrt{n_1/n_2}$ aufgestellt werden. Beim Lösen des Gleichungssystems wird nicht zu gewöhnlichen Fließkommazahlen gewechselt. Durch ein geeignetes Verfahren kann die dünne Besetzung des Systems ausgenutzt werden. Das Gauß'sche Eliminationsverfahren beispielsweise kann so angewendet werden, das bei jedem Schritt nur möglichst wenige Nullen zerstört werden. Der Rechenaufwand für jede Zeilenoperation wird auf diese Weise gering gehalten. Andererseits darf nicht zu viel Aufwand getrieben werden, um herauszufinden, welche Zeilenoperation die günstigste ist, denn sonst übersteigt die Suche danach evtl. den Nutzen. Eine einfache Möglichkeit besteht darin, eine Zeile mit möglichst vielen Nullen zu einer anderen zu addieren, ohne sich schon die darauf folgenden Schritte anzusehen. In der Praxis erwies sich dies als ausreichend. Im Allgemeinen erhält man durch die Anwendung von (2.95) ein Gleichungssystem mit mehr Gleichungen als Variablen, wobei die Gleichungen teilweise linear abhängig sind, so dass evtl. ein mehrdimensionaler Lösungsraum existiert. Dieser evtl. mehrdimensionale Lösungsraum gibt nach entsprechender Normierung die Koeffizienten des Polynoms in Gleichung (2.88). Da der Lösungsraum evtl. mehrdimensional ist, hat man hier die Freiheit, sich eine beliebige Basis des Lösungsraumes auszusuchen. Durch eine geschickte Wahl kann man evtl. dafür sorgen, dass die meisten Koeffizienten gleich Null sind. Diese Idee stellt eine mögliche Verbesserung bzw. Erweiterung des hier vorgestellten Algorithmus dar. Wie viele Koeffizienten auf diese Art bei der Speicherung gespart werden können, wurde nicht weiter untersucht. Die Phase der auf diese Weise berechneten Koeffizienten ist bis zu einem gewissen Grad beliebig, da die Basis des Lösungsraums frei gewählt werden darf.

Die Grundidee des oben erläuterten Verfahrens kann wie folgt zusammengefasst werden: Gegeben sei ein beliebiges Modell, mit den elementaren Erzeugern bzw. Vernichtern $c_1^\dagger, c_2^\dagger, \dots, c_d^\dagger$ und c_1, c_2, \dots, c_d . Man betrachte nun die Generatoren $G_{ij} := c_i^\dagger c_j$ und deren Kommutator

$$[G_{ij}, G_{kl}] = G_{il} \delta_{jk} - G_{kj} \delta_{il}\tag{2.98}$$

, welcher eine $\mathcal{G}_1 := U(d)$ Lie Algebra definiert. Je nach verwendetem Modell lassen sich evtl. mehrere Ketten von Unteralgebren finden. Für gewöhnlich interessiert man sich für diejenigen

Gruppenketten, welche eine physikalisch sinnvolle $SO(3)$ bzw. $SU(2)$ enthalten. Ein Beispiel hierfür ist das sogenannte sd-IBM1, welches aus s- und d-Bosonen besteht. In Falle des sd-IBM1 haben wir drei verschiedene Gruppenketten, die bei $U(6)$ beginnen und $SO(3)$ enthalten.



Diese drei Ketten sind also: $U(6) \subset U(5) \supset O(5) \supset O(3)$, $U(6) \subset O(6) \supset O(5) \supset O(3)$ und $U(6) \subset SU(3) \supset O(3)$. Sei nun eine beliebige Gruppenkette eines beliebigen Modells gegeben.

$$\mathcal{G}_1 \supset \mathcal{G}_2 \supset \dots \supset \mathcal{G}_a \quad (2.99)$$

Dann existieren entsprechende Casimiroperatoren $\hat{C}[\mathcal{G}_i]$ sowie Zustände mit den entsprechenden Quantenzahlen z_i für die gilt:

$$\begin{aligned}
 \hat{C}[\mathcal{G}_1]|z_1, z_2, \dots, z_a\rangle &= F_1(z_1)|z_1, z_2, \dots, z_a\rangle \\
 \hat{C}[\mathcal{G}_2]|z_1, z_2, \dots, z_a\rangle &= F_2(z_2)|z_1, z_2, \dots, z_a\rangle \\
 &\vdots \\
 \hat{C}[\mathcal{G}_a]|z_1, z_2, \dots, z_a\rangle &= F_a(z_a)|z_1, z_2, \dots, z_a\rangle
 \end{aligned} \quad (2.100)$$

Hierbei ist $F_i(z_i)$ eine Funktion der dem Casimiroperator $\hat{C}[\mathcal{G}_i]$ entsprechenden Quantenzahl und gibt den Eigenwert an. Kennt man die Casimiroperatoren explizit als Funktion der c_i^\dagger und c_i sowie ihre Eigenwerte, so kann man die Zustände wie in Gleichung (2.88) als Polynom über die Erzeuger auffassen und ein Gleichungssystem für die Koeffizienten aufstellen. Dies funktioniert prinzipiell mit jedem Modell und jeder dynamischen Symmetrie.

Mit dieser Methode können die CFPs ohne numerischen Fehler berechnet werden, da alle vorkommenden Zahlen in der Darstellung $\pm\sqrt{n_1/n_2}$ angegeben werden können (siehe Kapitel 2.9). Das Verfahren ist nicht rekursiv, da einzelne Zustände über die Forderung des entsprechenden Eigenwertes der Casimiroperatoren ohne Kenntnis anderer Zustände oder CFPs direkt berechnet werden. Der benötigte Arbeitsspeicher hält sich in Grenzen, denn das zu lösende Gleichungssystem ist dünn besetzt und durch die Verwendung einer geeigneten Datenstruktur müssen die vielen Nullen nicht gespeichert werden (siehe hierzu Kapitel 2.10). Der Algorithmus funktioniert für ein beliebiges Modell, für Bosonen und Fermionen beliebigen Spins und allen existierenden dynamischen Symmetrien gleichermaßen. Daher erfüllt er alle oben aufgeführten Anforderungen.

2.8 Zustände mit guten Quantenzahlen N und M

Das im Kapitel 2.7 beschriebene Verfahren berechnet Zustände identischer Teilchen mit guten Quantenzahlen N , ν , J , und M als Funktion der elementaren Erzeugeroperatoren explizit. Diese Funktionen sind Polynome über die Erzeuger. Diese Polynome können durch eine rekursiv definierte Erzeugendenfunktion so angegeben werden, dass sie direkt eine gute Teilchenzahl N sowie eine gute magnetische Quantenzahl M aufweisen. Dies wird in diesem Kapitel erklärt. Damit die Teilchenzahl eine gute Quantenzahl ist, muss jeder Term des Polynoms die gleiche Anzahl Erzeuger enthalten. Jeder Term hat hierbei die Form

$$c_{-m, -m+1, \dots, m-1, m} \cdot (c_{-m}^\dagger)^{n-m} \cdot (c_{-m+1}^\dagger)^{n-m+1} \cdot \dots \cdot (c_{m-1}^\dagger)^{n-m-1} (c_m^\dagger)^{n_m} \quad (2.101)$$

wobei gilt

$$\sum_{m=-j}^j n_m = N \quad (2.102)$$

Der Koeffizient $c_{-m, -m+1, \dots, m-1, m}$ hat $2j + 1 = n$ Indizes (einen für jeden Erzeuger). Dadurch ist die Bezeichnung der Koeffizienten eindeutig. Im Folgenden wird der Index als \underline{n} abgekürzt. Der Unterstrich symbolisiert hierbei, dass es sich um mehrere Zahlen handelt.

$$\underline{n} = \begin{pmatrix} n_{-m} \\ n_{-m+1} \\ \vdots \\ n_{m-1} \\ n_m \end{pmatrix} \quad (2.103)$$

Das gesuchte Polynom hat also folgende Form:

$$\mathcal{P}(N, M, j) = \sum_{\underline{n}} c_{\underline{n}} \prod_{m=-j}^j (c_m^\dagger)^{n_m} \quad (2.104)$$

wobei die Summe über all diejenigen Terme läuft, für die gilt:

$$\sum_{m=-j}^j n_m = N \wedge \sum_{m=-j}^j m \cdot n_m = M \quad (2.105)$$

Die Idee besteht nun darin, eine Art *divide and conquer* [29] anzuwenden. Wir teilen die Erzeuger in zwei Mengen \mathcal{M}_1 und \mathcal{M}_2 auf. Die Menge \mathcal{M}_1 enthält die beiden Erzeuger c_{-j}^\dagger und c_j^\dagger , die Menge \mathcal{M}_2 enthält $c_{-j+1}^\dagger, c_{-j+2}^\dagger, \dots, c_{j-1}^\dagger$. Wir separieren also die beiden Erzeuger mit dem betragslich höchsten m . Jetzt betrachten wir alle Möglichkeiten die N Teilchen auf die beiden Mengen zu verteilen, wobei wir im Fall von Fermionen das Pauliprinzip berücksichtigen müssen. Die möglichen Konfigurationen der sich jeweils in \mathcal{M}_1 befindlichen Teilchen sind leicht anzugeben. Mit \mathcal{M}_2 verfahren wir rekursiv, bis keine Elemente mehr enthalten sind. Bei jedem Schritt der Rekursion muss geprüft werden, ob überhaupt eine Möglichkeit besteht Gleichung (2.105) zu erfüllen und die Rekursion evtl. abgebrochen werden. Das Polynome \mathcal{P} erhält ein weiteres Argument \underline{n} . Dieser Vektor muss zur Initialisierung auf Null gesetzt werden. Die Basisvektoren des Raumes in dem \underline{n} definiert ist seien $e_{-j}, e_{-j+1}, \dots, e_j$.

2.8.1 Fermionen

Im Fall von Fermionen können 0, 1 oder 2 Teilchen der Menge \mathcal{M}_1 zugewiesen werden. Wird \mathcal{M}_1 ein Teilchen zugewiesen, kann dies entweder durch c_j^\dagger oder durch c_{-j}^\dagger dargestellt werden. Daher erhalten wir bei jeder Rekursion die vier Terme:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(N, M, j, \underline{n}) &= a_j^\dagger a_{-j}^\dagger \cdot \mathcal{P}(N-2, M, j-1, \underline{n} + e_j + e_{-j}) + a_j^\dagger \cdot \mathcal{P}(N-1, M-j, j-1, \underline{n} + e_j) + \\ & a_{-j}^\dagger \cdot \mathcal{P}(N-1, M+j, j-1, \underline{n} + e_{-j}) + \mathcal{P}(N, M, j-1, \underline{n}) \end{aligned} \quad (2.106)$$

Es gibt drei Abbruchbedingungen:

- $N = 0 \wedge M = 0$: Es ist kein Teilchen mehr übrig und es fehlt nur noch der Koeffizient $c_{\underline{n}}$.
- $\sum_{i=0}^{N-1} j - i < |M|$: Die geforderte magnetische Quantenzahl kann nicht erreicht werden.

- $2j + 1 < N$: Die geforderte Teilchenzahl kann aufgrund des Pauliprinzipts nicht erreicht werden.

Somit kann die Erzeugendenfunktion für \mathcal{P} also wie folgt definiert werden.

$$\mathcal{P}(N, M, j, \underline{n}) = \begin{cases} c_{\underline{n}} \text{ für } N = 0 \wedge M = 0 \\ 0 \text{ für } \sum_{i=0}^{N-1} j - i < |M| \\ 0 \text{ für } 2j + 1 < N \\ a_j^\dagger a_{-j}^\dagger \cdot \mathcal{P}(N - 2, M, j - 1, \underline{n} + e_j + e_{-j}) + \\ a_j^\dagger \cdot \mathcal{P}(N - 1, M - j, j - 1, \underline{n} + e_j) + \\ a_{-j}^\dagger \cdot \mathcal{P}(N - 1, M + j, j - 1, \underline{n} + e_{-j}) + \mathcal{P}(N, M, j - 1, \underline{n}) \end{cases} \quad (2.107)$$

2.8.2 Bosonen

Im Fall von Bosonen können $0, 1, \dots, N$ Teilchen \mathcal{M}_1 zugewiesen werden. Die Anzahl der der Menge \mathcal{M}_1 zugewiesenen Teilchen sei a . Dann existieren $a + 1$ Möglichkeiten diese a Teilchen durch die beiden Erzeuger c_{-j}^\dagger und c_j^\dagger darzustellen. Bei jeder Rekursion erhalten wir daher für Bosonen wesentlich mehr Terme als im Fall der Fermionen.

$$\mathcal{P}(N, M, j, \underline{n}) = \sum_{a=0}^N \sum_{b=0}^a (b_{-j}^\dagger)^b (b_j^\dagger)^{a-b} \cdot \mathcal{P}(N - a, M + bj - (a - b)j, j - 1, \underline{n} + be_j + (a - b)e_{-j}) \quad (2.108)$$

Ebenso wie im Fall der Fermionen existieren auch hier mehrere Abbruchbedingungen, welche in ihrer Funktion denen des Fermionenfalles teilweise entsprechen. Hinzu kommt der Sonderfall $j = 0$.

- $N = 0 \wedge M = 0$: Es ist kein Teilchen mehr übrig und es fehlt nur noch der Koeffizient $c_{\underline{n}}$.
- $N \cdot j < |M|$: Die geforderte magnetische Quantenzahl kann nicht erreicht werden.
- $M = 0 \wedge j = 0$: Es ist nur noch ein Erzeugeroperator übrig. Dieser Fall muss gesondert behandelt werden, das die Aufteilung auf zwei Mengen hier nicht möglich ist.

Somit kann die Erzeugendenfunktion für \mathcal{P} im Fall der Bosonen also wie folgt definiert werden.

$$\mathcal{P}(N, M, j, \underline{n}) = \begin{cases} (b_0^\dagger)^N \cdot c_{\underline{n}} \text{ für } M = 0 \wedge j = 0 \\ c_{\underline{n}} \text{ für } N = 0 \wedge M = 0 \\ 0 \text{ für } N \cdot j < |M| \\ \sum_{a=0}^N \sum_{b=0}^a (b_{-j}^\dagger)^b (b_j^\dagger)^{a-b} \times \\ \mathcal{P}(N - a, M + bj - (a - b)j, j - 1, \underline{n} + be_j + (a - b)e_{-j}) \end{cases} \quad (2.109)$$

2.9 Matrixelemente ohne numerische Fehler

Die Koeffizienten des Gleichungssystems (2.95) haben die Eigenschaft, durch ein Vorzeichen sowie einer Quadratwurzel einer rationalen Zahl $\pm\sqrt{n_1/n_2}$ mit geeignetem $n_1, n_2 \in \mathbb{N}$ dargestellt werden zu können. Diese Eigenschaft bleibt während des gesamten Gauß'schen Eliminationsprozesses ebenso wie bei der letztendlichen Berechnung des Skalarproduktes zwischen zwei Zuständen erhalten. Daher liefert das Verfahren die Matrixelemente der Erzeugeroperatoren ohne numerische Fehler in der Darstellung $\pm\sqrt{n_1/n_2}$.

Das Rechnen mit solchen Zahlen hat den Vorteil, dass im Computer keinerlei numerische Probleme durch Rundungsfehler entstehen. Zwei Zahlen in dieser Darstellung können ohne

Probleme multipliziert und dividiert werden. Die Addition bzw. Subtraktion ist jedoch nicht immer möglich.

$$\sqrt{2} + \sqrt{3} \neq \sqrt{\frac{n_1}{n_2}} \quad \text{für alle } n_1, n_2 \in \mathbb{N} \quad (2.110)$$

Unter welcher Voraussetzung die Addition oder Subtraktion möglich ist, zeigt folgende einfache Rechnung:

$$\begin{aligned} \pm \sqrt{\frac{n_1}{n_2}} \pm \sqrt{\frac{n_3}{n_4}} &= \pm \sqrt{\left(\pm \sqrt{\frac{n_1}{n_2}} \pm \sqrt{\frac{n_3}{n_4}}\right)^2} = \pm \sqrt{\frac{n_1}{n_2} + \frac{n_3}{n_4} \pm 2\sqrt{\frac{n_1 n_3}{n_2 n_4}}} = \\ &\pm \sqrt{\frac{n_1 n_4}{n_2 n_4} + \frac{n_3 n_2}{n_4 n_2} \pm 2\frac{\sqrt{n_1 n_2 n_3 n_4}}{n_2 n_4}} = \pm \sqrt{\frac{n_1 n_4 + n_2 n_3 \pm 2\sqrt{n_1 n_2 n_3 n_4}}{n_2 n_4}} \end{aligned} \quad (2.111)$$

Falls also $\sqrt{n_1 n_2 n_3 n_4} \in \mathbb{N}$ gilt, so kann die Summe bzw. Differenz wieder als Quadratwurzel einer rationalen Zahl dargestellt werden.

Es ist also keineswegs eine Selbstverständlichkeit, dass während des Lösens oder auch nur bei der Aufstellung des Gleichungssystems (2.95) nur solche Summen auftreten, für die $\sqrt{n_1 n_2 n_3 n_4} \in \mathbb{N}$ gilt. Dies ist also als empirische Tatsache anzusehen. Ein Beweis konnte im Rahmen dieser Arbeit leider nicht gefunden werden.

Ein weiteres nicht weiter untersuchtes Problem ist das der Anzahl der Ziffern. Während der Berechnung kann diese Zahl sehr groß werden. In der Praxis sind je nach Problem mehrere hundert Stellen keine Ausnahme. Dies schlägt sich natürlich sowohl auf den Speicherplatz als auch auf die Geschwindigkeit der Berechnung nieder.

2.10 Dünn besetzte Matrizen

Eine beliebige $d \times d$ -Matrix benötigt im Speicher des Computers mindestens d^2 mal den Speicherplatz des für die Matrixelemente verwendeten Datentyps. Die Komplexität des Speicherplatzes ist also $O(d^2)$. Die Komplexität vieler Operationen wie z.B. Addieren, Transponieren, Kopieren und Multiplizieren mit einer Konstanten ist ebenfalls $O(d^2)$. Die Multiplikation zweier solcher Matrizen benötigt hingegen $O(d^3)$. Die Matrixmultiplikation ist hierbei von besonderer Wichtigkeit, da sie in abgewandelter Form bei der Berechnung der Matrixelemente von zu gutem Drehimpuls gekoppelten Tensoroperatoren auftritt (siehe (2.78)). Angenommen man verwendet eine 8-Byte-Fließkommazahl für die Matrixelemente und möchte zwei Matrizen mit $d = 10^4$ multiplizieren sowie das Ergebnis speichern, so benötigt man 10^{12} Fließkommamultiplikationen und $3 \cdot 8 \cdot 10^8$ Byte ≈ 2.3 Gigabyte an Speicherplatz. Der Hauptspeicher eines modernen PCs Arbeitsplatzrechners wäre damit erschöpft. Gerettet wird man aber durch die Tatsache, dass man es für gewöhnlich mit sog. dünn besetzten Matrizen zu tun hat. Man bezeichnet eine Matrix als dünn besetzt, falls die Anzahl der Einträge, die ungleich Null sind nicht $O(d^2)$ sondern $O(d)$ oder auch $O(d \cdot \ln d)$ beträgt. Im ersten Fall bedeutet dies, dass die Anzahl der Einträge pro Zeile oder Spalte zumindest näherungsweise konstant ist. Dies ist z.B. bei den Gleichungssystemen der Fall, welche bei der Berechnung der CFPs mit dem in Kapitel 2.7 erläuterten Verfahren auftreten.

Eine denkbare Lösung wäre alle Einträge, die nicht Null sind sowie deren Zeilen- und Spaltenindex zu speichern. Das Speicherproblem wäre damit gelöst, aber die Implementierung der Algorithmen zum Multiplizieren beispielsweise würde sich als zumindest schwierig herausstellen. Es ist das Ziel, bei den Matrixoperationen nur die Nicht-Null-Einträge anzufassen, um so effizient wie möglich zu sein. Gelöst wird dieses Problem z.B. vom sog. (*old*) *Yale Sparse Matrix Format*. Es benutzt drei Arrays (A, IA, JA). A enthält zeilenweise alle Einträge, seine Größe ist also gleich der Anzahl der Nicht-Nullen (diese sei NZ). $IA[i]$ enthält den Index des Arrays A , bei dem die Zeile i beginnt. $IA[0]$ ist also immer gleich 0 und die Anzahl der Einträge in Zeile i ist gleich $IA[i+1] - IA[i]$. Aus Gründen der Bequemlichkeit hat IA nicht d Elemente sondern $d+1$, so dass auch die Anzahl für die letzte Zeile abgefragt werden kann. Das Array

JA hat gleich viele Elemente wie A und speichert für jedes Element aus A die entsprechende Spalte.

Eine gute Referenz zum Umgang mit diesem Format sowie für den Umgang mit dünn besetzten Matrizen im Allgemeinen mit vielen Algorithmen ist [30].

2.11 Das Programm „ArbModel“

Alle in den vorangegangenen Abschnitten diskutierten Ideen wurden im Rahmen dieser Arbeit in einem Computerprogramm realisiert. Dieser Code erhielt als Namen „ArbModel“. Er zeichnet sich durch extrem hohe Flexibilität aus. Es kann eine beliebige Anzahl von Teilchensorten definiert werden, welche sowohl Bosonen als auch Fermionen sein können. Je nach Modell ist es wünschenswert, die erlaubten Teilchenzahlen einzelner Teilchensorten zu beschränken oder festzusetzen. Evtl. möchte der Benutzer auch, dass die Summe der Teilchenzahlen mehrerer Teilchensorten nur bestimmte Werte annehmen kann. Daher wurden für solcherlei Beschränkungen der Basis ebenfalls Möglichkeiten vorgesehen. Evtl. werden auch Hamiltonians diagonalisiert, welche die Senioritätsquantenzahl einzelner Teilchensorten erhalten. Daher kann diese bei der Festlegung der Basis ebenfalls auf Wunsch festgesetzt werden.

Die Angabe des zu diagonalisierenden Hamiltonians geschieht durch eine Summe beliebiger Ein- und Zweiteilchenterme. Da diese Terme immer als zum gutem Drehimpuls Null gekoppelte Operatoren angegeben werden (der Hamiltonian ist also immer ein Drehimpulsskalar), erfolgt die Diagonalisierung immer bezüglich einer Basis mit gegebenem Drehimpuls. Der Benutzer kann beliebig viele dieser Drehimpuls als Liste angeben.

Um Übergangsstärken zu berechnen, können beliebige Einteilchenoperatoren angegeben werden. Reduzierte Matrixelemente dieser Operatoren werden bezüglich einer anzugebenden Liste von Zustandspaaren nach dem Diagonalisieren berechnet.

Die numerische Genauigkeit hängt von vielen Faktoren ab. Da jedoch letztendlich alle Matrixelemente durch CFPs ausgedrückt werden, welche, wie oben beschrieben, eine sehr hohe Genauigkeit besitzen, ist die numerische Genauigkeit und Stabilität der Diagonalisierung ein entscheidender Punkt.

Eine detaillierte Anleitung zu diesem Programm ist in englischer Sprache im Anhang A zu finden. Sie enthält neben einer Referenz aller Parameter des Inputfiles auch konkrete Beispiele.

In den folgenden Kapiteln 3 und 4 werden viele Anwendungen für den numerischen Code gezeigt. Kapitel 3 behandelt Modelle bestehend aus nur einer Teilchensorte mit beliebigem Spin j . Es werden die dynamischen Symmetrien solchen Modelle untersucht sowie die Bedingungen, die nötig sind, damit lediglich die Senioritätsquantenzahl erhalten ist. Noch schwächer ist Forderung nach partieller Erhaltung der Seniorität, was im Anschluss behandelt wird. Systeme mit mehr als einer Teilchensorte (also im Sinne der Quantenmechanik unterscheidbarer Teilchen) werden im Kapitel 3 untersucht. Dort wird die Konvergenz zum klassischen Limit ($N \rightarrow \infty$) am Phasenübergang zweiter Ordnung einer Klasse von bosonischen Modellen behandelt sowie ArbModel auf eine Bose-Fermi-Symmetrie eines Boson-Fermion-Modells angewandt.

Es soll betont werden, dass alle in den folgenden Kapiteln aufgeführten Gleichungen (wann immer dies möglich ist) mit ArbModel überprüft wurden. Somit kann dies als Beleg für Korrektheit unter den unterschiedlichsten Anforderungen angesehen werden.

Kapitel 3

Systeme identischer Teilchen

In diesem Kapitel werden Systeme behandelt, die aus nur einer Teilchensorte bestehen. Diese Teilchen sind im Sinne der Quantenmechanik ununterscheidbar. Es wird unter anderem untersucht, unter welchen Bedingungen das im allgemeinen nicht analytisch lösbare System in einer dynamischen Symmetrie vorliegt. Im Fall einer dynamischen Symmetrie kann der Hamiltonian durch Casimiroperatoren einer Kette von verschachtelten Algebren ausgedrückt werden, die Eigenzustände sind vollständig durch die entsprechenden Quantenzahlen charakterisiert und das Eigenspektrum kann direkt durch die Eigenwerte der Casimiroperatoren angegeben werden. Im Fall von einem System identischer Teilchen sind diese Quantenzahlen die Teilchenzahl N , die Seniorität ν , ein sogenanntes *missing label* Δ , der Drehimpuls J und seine Projektion M (siehe die Kapitel 2.5.2 und 2.5.1). Es existieren jedoch noch mehrere Abstufungen zwischen der totalen Nicht-Lösbarkeit und der dynamischen Symmetrie, welche als partielle dynamische Symmetrien bezeichnet werden:

- *Alle Zustände behalten alle Quantenzahlen und der Hamiltonian kann durch Casimiroperatoren einer Kette von verschachtelten Algebren ausgedrückt werden.* In diesem Fall liegt eine dynamische Symmetrie vor. Das System ist komplett analytisch lösbar und für die Eigenwerte existieren geschlossene Ausdrücke. Unter welchen Bedingungen eine dynamische Symmetrie vorliegt, wird im Kapitel 3.3 untersucht.
- *Alle Zustände behalten alle Quantenzahlen aber der Hamiltonian kann nicht durch Casimiroperatoren einer Kette von verschachtelten Algebren ausgedrückt werden.* Das System ist analytisch lösbar, aber es liegt keine dynamische Symmetrie vor (siehe Kapitel 3.4)
- *Einige aber nicht alle Zustände behalten alle Quantenzahlen.* Die entsprechenden Zustände sind exakt lösbar und haben eine von der Symmetrie diktierte Struktur [31, 32] (siehe Kapitel 3.4.2).
- *Alle Zustände behalten einige aber nicht alle Quantenzahlen.* In diesem Fall ist keiner der Zustände lösbar, aber die Quantenzahlen der konservierten Symmetrien sind gut. Dieser Fall tritt auf, wenn der Hamiltonian einige Quantenzahlen einer dynamischen Symmetrie konserviert, andere aber bricht [33]. Um diesen Typ einer partiellen dynamischen Symmetrie zu erhalten, können Wechselwirkungen höherer Ordnung nötig sein [34].
- *Einige aber nicht alle Zustände behalten einige aber nicht alle Quantenzahlen.* Dies ist eine Mischung der beiden vorherigen Fälle und bildet die schwächste Form der partiellen dynamischen Symmetrie. In [35] wird ein Beispiel anhand des Interacting-Boson-Modells diskutiert.
- *Kein einziger Zustand behält auch nur eine seiner Quantenzahlen.* Es liegt keinerlei Symmetrie vor.

Selbstverständlich sind auch Kombinationen der einzelnen Punkte denkbar. Der Hamiltonian ist ein Drehimpulsskalar (die Eigenzustände haben gutes J und M) und konserviert auch die Teilchenzahl N . Zu der Quantenzahl Δ existiert keine Algebra, sie dient lediglich zum Abzählen der Zustände mit gleichem ν und J . Daher ist die einzige Quantenzahl, die durch entsprechende Wahl der Parameter des Hamiltonians gebrochen werden kann, die Seniorität ν . Die Eigenzustände der hier untersuchten Systeme haben also immer gutes N , J und M . Die zentrale Frage lautet also: Unter welchen Bedingungen ist die Seniorität für alle bzw. einige Zustände erhalten bzw. gebrochen? Doch auch wenn die Seniorität gebrochen ist, so können weitere Fälle unterschieden werden. Die Mischung kann mit Zuständen aller anderen vorhandenen Senioritäten oder aber nur mit Zuständen ganz bestimmter Senioritäten ν_1, ν_2, \dots erfolgen. Beispiele hierfür wurden numerisch gefunden (siehe Kapitel 3.4.2). Die Seniorität kann also nach einem bestimmten Muster gebrochen werden. Wie sich herausstellen wird, ist für dieses Muster eine andere Symmetrie verantwortlich. Der Vollständigkeit halber wird dieser Fall hier jedoch mit aufgeführt. Es werden daher folgende Fälle unterschieden:

- *Die Seniorität ist für alle Zustände erhalten und der Hamiltonian kann durch Casimiroperatoren einer Kette von verschachtelten Algebren ausgedrückt werden.* Es liegt eine dynamische Symmetrie vor (siehe Kapitel 3.3).
- *Die Seniorität ist für alle Zustände erhalten aber der Hamiltonian kann nicht durch Casimiroperatoren einer Kette von verschachtelten Algebren ausgedrückt werden.* Das System ist vollständig lösbar, aber es liegt keine dynamische Symmetrie vor (siehe Kapitel 3.4).
- *Die Seniorität ist für einige aber nicht alle Zustände erhalten.* Die Wellenfunktionen und Energien der Zustände mit guter Seniorität können angegeben werden (siehe Kapitel 3.4.2).
- *Es existieren Zustände, für die die Seniorität nach einem Muster gebrochen ist.* Einige Beispiele dieses Falles sind in Kapitel 3.4.3 aufgeführt.
- *Die Seniorität ist für alle Zustände gebrochen.* Kein einziger Zustand ist lösbar.

Wie bereits oben erwähnt, handelt es sich bei der Brechung der Seniorität nach einem Muster um die Auswirkungen einer anderen Symmetrie. Daher kann dieser Fall hier gedanklich ausgeklammert werden. Zwischen allen verbleibenden Fällen sind keine Mischungen möglich. Die hier vorgestellte Klassifizierung von Symmetrien ist für die hier untersuchten Systeme also vollständig.

3.1 Die Multiplizität der Reduktionen $USp(n) \supset SU(2)$ und $SO(n) \supset SO(3)$

Wie sich im Abschnitt über Senioritätserhaltende Wechselwirkungen (Kapitel 3.4) noch herausstellen wird, spielt die Multiplizität der Zustände $|3, 3, \Delta, j, j\rangle$ eine wichtige Rolle. Es geht also um die Multiplizität von $USp(n) \supset SU(2)$ bzw. $SO(n) \supset SO(3)$, die bei Systemen drei identischer Fermionen bzw. Bosonen auftritt. In Kapitel 2.5.2 wurde ein Algorithmus vorgestellt, mit dem diese numerisch berechnet werden kann. In diesem Kapitel wird ein Verfahren diskutiert, das es ermöglicht, geschlossene Ausdrücke für einzelne Multiplizitäten von $USp(n) \supset SU(2)$ bzw. $SO(n) \supset SO(3)$ zu erhalten. Die Rechnungen erstrecken sich über mehrere Seiten, daher werden sie in einem eigenen Abschnitt mit Unterabschnitten dargelegt.

Wie bereits in Kapitel 2.5.2 gezeigt, kann die Multiplizität aus der Anzahl der Zustände zu fester Teilchenzahl N und fester magnetischer Quantenzahl M berechnet werden. Der Teilchenspin sei j und $n = 2j + 1$. Es sei $A(N, M, j)$ die Anzahl aller möglichen Zustände eines Systems identischer Teilchen mit Spin j zu festem N und M . Diese Anzahl ist gleich der Anzahl aller Möglichkeiten, N Teilchen (Fermionen oder Bosonen, je nach Spin) auf $2j + 1$ Zustände zu verteilen. Dies ist genau die Anzahl der Terme von $\mathcal{P}(N, M, j)$ (siehe Kapitel 2.8). Wir suchen

also eine Möglichkeit, diese Terme zu zählen. Dies kann mit der gleichen Idee erreicht werden, welche uns zur Definition der $\mathcal{P}(N, M, j)$ geführt hat. Wir müssen lediglich alle Erzeuger sowie die $c_{\underline{n}}$ durch eine Eins ersetzen. Somit erhalten wir

$$A(N, M, j) = \begin{cases} 1 & \text{für } N = 0 \wedge M = 0 \\ 0 & \text{für } \sum_{i=0}^{N-1} j - i < |M| \\ 0 & \text{für } 2j + 1 < N \\ A(N-2, M, j-1) + A(N-1, M-j, j-1) + \\ & A(N-1, M+j, j-1) + A(N, M, j-1) & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.1)$$

für Fermionen und

$$A(N, M, j) = \begin{cases} 1 & \text{für } M = 0 \wedge j = 0 \\ 1 & \text{für } N = 0 \wedge M = 0 \\ 0 & \text{für } N \cdot j < |M| \\ \sum_{a=0}^N \sum_{b=0}^a A(N-a, M+bj - (a-b)j, j-1) & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.2)$$

für Bosonen. Die Anzahl der Zustände $B(N, J, j)$ zu fester Teilchenzahl N und Drehimpuls J ist gegeben durch

$$B(N, J, j) = A(N, J, j) - A(N, J+1, j) \quad (3.3)$$

Die Anzahl der Zustände $C(\nu, J, j)$ mit maximaler Seniorität $\nu = N$ ist durch

$$C(\nu, J, j) = B(\nu, J, j) - B(\nu-2, J, j) \quad (3.4)$$

gegeben. Diese ist gleich der Multiplizität zu gegebenem ν und J . Durch die rekursive Definition der $A(N, M, j)$ werden die Anzahl der Zustände sowie die Multiplizitäten durch diejenigen eines Systems identischer Teilchen mit Spin $j-1$ ausgedrückt. Mit Hilfe dieser Beziehungen können Ausdrücke für die Anzahl von Zuständen bzw. für Multiplizitäten hergeleitet werden. Hierauf wird in den Kapiteln C.4.2 und C.4.3 näher eingegangen und es wird ein geschlossener Ausdruck für $C(3, j, j)$ abgeleitet, da diese Multiplizität für die Herleitung von Bedingungen zum Erhalten der Seniorität in Kapitel 3.4 gebraucht wird. Da die Herleitung recht lang und für Fermionen und Bosonen sehr ähnlich ist, wird sie in den entsprechenden Abschnitten nur für Fermionen vollständig angegeben (im Falle der Bosonen wird die Rechnung nur skizziert).

3.2 Die Casimiroperatoren der Gruppenkette

Es sei j der Teilchenspin und $n = 2j+1$. Wie in Kapitel 2.5.1 gezeigt wurde, existiert unabhängig vom Spin des Teilchens die Gruppenkette

$$\begin{aligned} U(n) \supset SO(n) \supset SO(3) \supset SO(2) & \quad \text{für Bosonen} \\ U(n) \supset USp(n) \supset SU(2) \supset SO(2) & \quad \text{für Fermionen} \end{aligned} \quad (3.5)$$

und die entsprechenden Quantenzahlen sind die Teilchenzahl N , die Seniorität ν , der Spin J und die magnetische Quantenzahl M . Alle Casimiroperatoren werden in diesem Abschnitt gesammelt angegeben, da sie im Kapitel 3.3 explizit als Funktion der Erzeuger- und Vernichtoperatoren gebraucht werden. Um etwas handlichere Ausdrücke zu erhalten, werden folgende Abkürzungen eingeführt:

$$\hat{V}^{(J)} := [(c^\dagger \times c^\dagger)^{(J)} \times (\tilde{c} \times \tilde{c})^{(J)}]^{(0)} \quad (3.6)$$

$$\hat{n}_0 := (c^\dagger \times \tilde{c})^{(0)} \quad (3.7)$$

Die Casimiroperatoren zu den Gruppen bzw. Quantenzahlen sind dann:

$$\hat{C}_1[U(n)] = \hat{N} = \sum_m c_m^\dagger c_m = \sqrt{n} \hat{n}_0 \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned}
\hat{C}_2[U(n)] &= \hat{N}(\hat{N} + n - 1) \quad , \quad \text{für Bosonen} \\
\hat{C}_2[U(n)] &= \hat{N}(n + 1 - \hat{N}) \quad , \quad \text{für Fermionen} \\
\hat{C}_2[U(n)] &= \sum_J \sqrt{2J+1} \hat{V}^{(J)} + n\sqrt{n} \hat{n}_0 \quad , \quad \text{für Bosonen und Fermionen}
\end{aligned} \tag{3.9}$$

$$\begin{aligned}
\hat{C}_2[SO(n)] &= -n\hat{V}^{(0)} + (n-2)\hat{C}_1[U(n)] + (\hat{C}_1[U(n)])^2 \\
&= -n\hat{V}^{(0)} + \sum_J \sqrt{2J+1} \hat{V}^{(J)} + (n-1)\sqrt{n} \hat{n}_0
\end{aligned} \tag{3.10}$$

$$\begin{aligned}
\hat{C}_2[USp(n)] &= n\hat{V}^{(0)} + (n+2)\hat{C}_1[U(n)] - (\hat{C}_1[U(n)])^2 \\
&= n\hat{V}^{(0)} + \sum_J \sqrt{2J+1} \hat{V}^{(J)} + (n+1)\sqrt{n} \hat{n}_0
\end{aligned} \tag{3.11}$$

$$\begin{aligned}
\hat{C}_2[SO(3)] &= -\frac{j(j+1)(2j+1)}{\sqrt{3}} \cdot [(b^+ \times \tilde{b})^{(1)} \times (b^+ \times \tilde{b})^{(1)}]^{(0)} \\
&= -\frac{1}{2} \sum_J \sqrt{2J+1} \left(\frac{1}{2}(n^2-1) - J(J+1) \right) \hat{V}^{(J)} + \frac{1}{4}(n^2-1)\sqrt{n} \hat{n}_0
\end{aligned} \tag{3.12}$$

$$\begin{aligned}
\hat{C}_2[SU(2)] &= -\frac{j(j+1)(2j+1)}{\sqrt{3}} \cdot [(a^+ \times \tilde{a})^{(1)} \times (a^+ \times \tilde{a})^{(1)}]^{(0)} \\
&= \frac{1}{2} \sum_J \sqrt{2J+1} \left(\frac{1}{2}(n^2-1) - J(J+1) \right) \hat{V}^{(J)} + \frac{1}{4}(n^2-1)\sqrt{n} \hat{n}_0
\end{aligned} \tag{3.13}$$

$$\hat{C}_2[SO(2)] = \sum_m m c_m^+ c_m \tag{3.14}$$

Die Zustände $|N, \nu, \Delta, J, M\rangle$ sind Eigenzustände der Casimiroperatoren. Die Wirkung der Casimiroperatoren auf einen Eigenzustand ist in folgenden Gleichungen zusammengefasst. Ein oben stehendes B bzw. F steht hierbei für ein Bosonen- bzw. Fermionensystem.

$$\begin{aligned}
\hat{C}_1[U(n)]|N, \nu, \Delta, J, M\rangle &= N|N, \nu, \Delta, J, M\rangle \\
\hat{C}_2^B[U(n)]|N, \nu, \Delta, J, M\rangle &= N(N+n-1)|N, \nu, \Delta, J, M\rangle \\
\hat{C}_2^F[U(n)]|N, \nu, \Delta, J, M\rangle &= N(n+1-N)|N, \nu, \Delta, J, M\rangle \\
\hat{C}_2[SO(n)]|N, \nu, \Delta, J, M\rangle &= \nu(\nu+n-2)|N, \nu, \Delta, J, M\rangle \\
\hat{C}_2[USp(n)]|N, \nu, \Delta, J, M\rangle &= \nu(n+2-\nu)|N, \nu, \Delta, J, M\rangle \\
\hat{C}_2[SO(3)]|N, \nu, \Delta, J, M\rangle &= J(J+1)|N, \nu, \Delta, J, M\rangle \\
\hat{C}_2[SU(2)]|N, \nu, \Delta, J, M\rangle &= J(J+1)|N, \nu, \Delta, J, M\rangle \\
\hat{C}_2[SO(2)]|N, \nu, \Delta, J, M\rangle &= M|N, \nu, \Delta, J, M\rangle
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Außerdem lässt sich aus obigen Gleichungen leicht der Eigenwert von $\hat{V}^{(0)}$ ablesen, denn dieser Operator kann durch Casimiroperatoren ausgedrückt werden.

$$\hat{V}^{(0)}|N, \nu, \Delta, J, M\rangle = \begin{cases} -\frac{1}{n} [\nu(\nu+n-2) - N(N+n-2)] |N, \nu, \Delta, J, M\rangle & \text{für Bosonen} \\ \frac{1}{n} [\nu(n+2-\nu) - N(n+2-N)] |N, \nu, \Delta, J, M\rangle & \text{für Fermionen} \end{cases} \tag{3.16}$$

Der allgemeine Hamiltonian eines Systems identischer Teilchen lässt sich (sofern er nur Ein- und Zweikörperkräfte enthält) wie folgt ausdrücken (a_J und A sind Parameter):

$$H = \sum_J a_J \hat{V}^{(J)} + A \hat{n}_0 \tag{3.17}$$

Aufgrund der Definition von $\hat{V}^{(J)}$ kann J nur gerade Werte annehmen und läuft von 0 bis $2j$ für Bosonen und von 0 bis $2j-1$ für Fermionen. Es stellt sich nun die Frage, unter welchen

Bedingungen dieser Hamiltonian durch die entsprechenden Casimiroperatoren ausgedrückt werden kann. Ist dies der Fall, so liegt eine dynamische Symmetrie vor und die Eigenwerte können direkt angegeben werden. Dies wird in den folgenden Kapiteln sowohl für Bosonen als auch für Fermionen allgemein untersucht.

3.3 Dynamische Symmetrien identischer Teilchen

3.3.1 Dynamische Symmetrien für Bosonen

Der allgemeinste Hamiltonian sei \hat{H}_g und der allgemeinste Hamiltonian, welcher durch Casimiroperatoren ausgedrückt werden kann erhält den Namen \hat{H}_C . Die Umrechnung von

$$\hat{H}_g = \sum_J a_J \hat{V}^{(J)} + A \hat{n}_0 \quad (3.18)$$

nach

$$\hat{H}_C = x_1 \hat{C}_1[U(n)] + x_2 \hat{C}_2[U(n)] + x_3 \hat{C}_2[SO(n)] + x_4 \hat{C}_2[SO(3)] \quad (3.19)$$

führt auf ein Gleichungssystem für die Koeffizienten. Dieses erhält man, indem man die Casimiroperatoren durch die $\hat{V}^{(J)}$ und \hat{n}_0 ausdrückt. Da die $\hat{V}^{(J)}$ alle linear unabhängig sind, können die Gleichungen leicht aufgestellt werden. Mit der Ersetzung

$$\begin{aligned} b_J &:= \frac{a_J}{\sqrt{2J+1}} \\ B &:= \frac{A}{\sqrt{n}} \end{aligned} \quad (3.20)$$

ergibt sich dieses Gleichungssystem zu

$$\begin{aligned} b_0 &= x_2 - (n-1)x_3 - \frac{1}{4}(n^2-1)x_4 \\ b_J &= x_2 + x_3 - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}(n^2-1) - J(J+1)\right)x_4 \\ B &= x_1 + nx_2 + (n-1)x_3 + \frac{1}{4}(n^2-1)x_4 \end{aligned} \quad (3.21)$$

wobei $J = 2, 4, 6, \dots, 2j$. Für s-Bosonen existieren also nur zwei Gleichungen. x_1 taucht nur in der Gleichung für B auf. Dies bedeutet, dass erst einmal nur die anderen Gleichungen betrachtet werden müssen. Die Gleichung für b_0 kann nach x_2 aufgelöst und in die Gleichungen für b_J eingesetzt werden. Dann wird die Gleichung für b_2 nach x_3 aufgelöst und diese wiederum in die Gleichung für die b_J (jetzt gilt $J = 4, 6, \dots, 2j$) eingesetzt. Nach x_4 aufgelöst ergibt dies

$$x_4 = \frac{b_J - b_2}{\frac{1}{2}J(J+1) - 3}, \quad J = 4, 6, \dots, 2j \quad (3.22)$$

Also gilt für $J = 4$

$$x_4 = \frac{b_4 - b_2}{7} \quad (3.23)$$

und die Bedingung für die Lösbarkeit des Systems

$$\frac{b_4 - b_2}{7} = \frac{b_J - b_2}{\frac{1}{2}J(J+1) - 3}, \quad J = 6, 8, \dots, 2j \quad (3.24)$$

lässt sich umformen zu

$$\frac{1}{7} \left[\left(\frac{1}{2}J(J+1) - 3\right)b_4 - \left(\frac{1}{2}J(J+1) - 10\right)b_2 \right] = b_J, \quad J = 6, 8, \dots, 2j \quad (3.25)$$

Gleichung (3.25) lässt erkennen, dass für ein s-, p- oder d-Bosonensystem ($j = 0, 1, 2$) keine Bedingung existiert. Diese Systeme liegen also immer als dynamische Symmetrie vor. Für ein f-Bosonensystem existiert genau eine Bedingung um von \hat{H}_g nach \hat{H}_C umparametrisieren zu können, für g-Bosonen existieren zwei Bedingungen usw. Ist (3.25) erfüllt, so kann die Umparametrisierung nach \hat{H}_C erfolgen:

$$\begin{aligned}
x_1 &= B - \frac{1}{n}b_0 + \frac{n^4 + n^3 - 41n^2 - n + 40}{28n}b_2 + \frac{-n^4 - n^3 + 13n^2 + n - 12}{28n}b_4 \\
x_2 &= \frac{1}{n} \left(b_0 + \frac{-n^3 + 41n - 40}{28}b_2 + \frac{n^3 - 13n + 12}{28}b_4 \right) \\
x_3 &= \frac{1}{n} \left(-b_0 + \frac{10}{7}b_2 - \frac{3}{7}b_4 \right) \\
x_4 &= \frac{b_4 - b_2}{7} = \frac{b_J - b_2}{\frac{1}{2}J(J+1) - 3}
\end{aligned} \tag{3.26}$$

Für ein s-Bosonensystem existieren in (3.19) nur die ersten beiden Casimiroperatoren mit den Koeffizienten x_1 und x_2 . Für p-Bosonen existiert auch der dritte Operator mit dem Koeffizienten x_3 und für alle Bosonen mit $j > 1$ existieren alle vier Casimiroperatoren. Die Gleichungen (3.26) können dennoch für alle Bosonenspins benutzt werden. Für s-Bosonen existieren die Terme $\hat{V}^{(2)}$ und $\hat{V}^{(4)}$ nicht. Setzt man daher $b_2 = b_4 = b_0$, so ergibt sich $x_3 = x_4 = 0$ in Übereinstimmung damit, dass die entsprechenden Casimiroperatoren nicht existieren (siehe Kapitel 3.3.1.1). Handelt es sich um ein p-Bosonen-System, so setzt man $b_4 = b_2$ und erhält $x_3 = \frac{1}{3}(-b_0 + b_2)$ und $x_4 = 0$ (siehe Kapitel 3.3.1.2). In der Gleichungen für x_1 und x_2 ist die Gleichsetzung von b_2 und b_4 mit b_0 bzw. von b_2 mit b_4 nicht nötig. Dazu betrachte man die Koeffizienten von b_2 und b_4 der ersten beiden Gleichungen.

$$\begin{aligned}
P_{1,2}^B(n) &:= \frac{n^4 + n^3 - 41n^2 - n + 40}{28n} \\
P_{1,4}^B(n) &:= \frac{-n^4 - n^3 + 13n^2 + n - 12}{28n} \\
P_{2,2}^B(n) &:= \frac{-n^3 + 41n - 40}{28n} \\
P_{2,4}^B(n) &:= \frac{n^3 - 13n + 12}{28n}
\end{aligned} \tag{3.27}$$

Diese Funktionen von n haben folgende Nullstellen:

Koeffizient	Nullstellen
$P_{1,2}^B(n)$	$-1, 1, -\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{161}, -\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{161}$
$P_{1,4}^B(n)$	$-1, 1, 3, -4$
$P_{2,2}^B(n)$	$1, -\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{161}, -\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{161}$
$P_{2,4}^B(n)$	$1, 3, -4$

Die zu b_2 gehörenden Koeffizienten $P_{1,2}^B(n)$ und $P_{2,2}^B(n)$ haben also eine Nullstelle bei $n = 1$ bzw. $j = 0$, was s-Bosonen entspricht. Die zu b_4 gehörenden Koeffizienten $P_{2,2}^B(n)$ und $P_{4,2}^B(n)$ sind Null für $n = 1, 3$ bzw. $j = 0, 1$ was s- und p-Bosonen entspricht.

Ist die Bedingung (3.25) erfüllt, so ist der Hamiltonian diagonal und die Eigenwerte können unter Verwendung von Gleichung (3.26) und (3.15) als Funktion von B und der b_J angegeben werden. Die folgenden Abschnitte enthalten eine kurze Ausarbeitung für alle verschiedenen Fälle. Da für s- und p-Bosonen nicht die vollständige Algebrakette existiert, werden diese wenig interessanten Systeme der Vollständigkeit halber mit angegeben. Für $j = 2$ existieren zum ersten mal alle Casimiroperatoren. Ein weiterer Spezialfall sind f-Bosonen, da hier eine zusätzliche Algebra existiert. Alle Fälle mit $j \geq 4$ werden gemeinsam behandelt.

3.3.1.1 s-Bosonen

Das s-Bosonensystem ist das einfachste denkbare System identischer Teilchen. Die Gruppenkette besteht nur aus einer einzigen Algebra (der $U(1)$ mit den Casimiroperatoren $\hat{C}_1[U(1)]$ und $\hat{C}_2[U(1)]$) und folglich genügt eine einzige Quantenzahl (die Teilchenzahl N), um die Zustände zu klassifizieren. Da lediglich eine Zweiteilchenwechselwirkung $\hat{V}^{(0)}$ existiert, besteht \hat{H}_g nur aus zwei Termen.

$$\hat{H}_C = x_1 \hat{C}_1[U(1)] + x_2 \hat{C}_2[U(1)] \quad (3.28)$$

$$\hat{H}_g = a_0 \hat{V}^{(0)} + A \hat{n}_0 \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned} \hat{C}_1[U(1)] &= \hat{n}_{(0)} \\ \hat{C}_2[U(1)] &= \hat{V}^{(0)} + \hat{n}_{(0)} \end{aligned} \quad (3.30)$$

Für die Umparametrisierung von \hat{H}_g nach \hat{H}_C ergibt sich folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 &= A \\ x_2 &= a_0 \end{aligned} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{aligned} x_1 &= A - a_0 \\ x_2 &= a_0 \end{aligned} \quad (3.31)$$

Die Eigenwerte des allgemeinen s-Bosonen Hamiltonians können also direkt angegeben werden.

$$\begin{aligned} \langle N | \hat{n}_0 | N \rangle &= N \\ \langle N | \hat{V}^{(0)} | N \rangle &= N(N - 1) \end{aligned} \quad (3.32)$$

3.3.1.2 p-Bosonen

Das p-Bosonensystem ist wie auch das s-Bosonensystem ein Sonderfall, der separat behandelt wird, da auch hier nicht die komplette Gruppenkette (3.5) auftritt. Da hier $n = 3$ ist, stimmt die Algebra der Seniorität mit der des Drehimpulses überein.

$$U(3) \supset SO(3) \quad (3.33)$$

Die Anzahl der Casimiroperatoren hat sich ebenso wie die Anzahl der möglichen Zweiteilchenwechselwirkungen im Vergleich zum s-Bosonensystem also um eins erhöht. Der allgemeinste Hamiltonian in Casimirform ist daher:

$$\hat{H}_C = x_1 \hat{C}_1[U(3)] + x_2 \hat{C}_2[U(3)] + x_3 \hat{C}_2[SO(3)] \quad (3.34)$$

Und der allgemeinste p-Bosonen-Hamiltonian als Funktion aller Ein- und Zweiteilchenwechselwirkungen lautet:

$$\hat{H}_g = a_0 \hat{V}^{(0)} + a_2 \hat{V}^{(2)} + A \hat{n}_0 \quad (3.35)$$

Die explizite Form der Casimiroperatoren ausgedrückt durch \hat{n} und die $\hat{V}^{(J)}$ kann aus Kapitel 3.2 abgelesen werden. Durch Koeffizientenvergleich gelangt man zu einem eindeutig lösbares Gleichungssystem. Für die Umparametrisierung von \hat{H}_g nach \hat{H}_C ergibt sich folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} \sqrt{3}x_1 + 3\sqrt{3}x_2 + 2\sqrt{3}x_3 &= A \\ x_2 - 2x_3 &= a_0 \\ \sqrt{5}x_2 + \sqrt{5}x_3 &= a_2 \end{aligned} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{aligned} x_1 &= \frac{A}{\sqrt{3}} - \frac{a_0}{3} - \frac{8}{3\sqrt{5}}a_2 \\ x_2 &= \frac{a_0}{3} + \frac{2}{3\sqrt{5}}a_2 \\ x_3 &= \frac{a_2 - \sqrt{5}a_0}{3\sqrt{5}} \end{aligned} \quad (3.36)$$

Die Eigenwerte des allgemeinen p-Bosonen Hamiltonians können also direkt angegeben werden.

$$\begin{aligned}\langle N, L, M | \hat{n}_0 | N, L, M \rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} N \\ \langle N, L, M | \hat{V}^{(0)} | N, L, M \rangle &= \frac{1}{3} (N(N+1) - L(L+1)) \\ \langle N, L, M | \hat{V}^{(2)} | N, L, M \rangle &= \frac{1}{3\sqrt{5}} (2N(N-2) + L(L+1))\end{aligned}\quad (3.37)$$

3.3.1.3 d-Bosonen

Die dynamische Symmetrie eines Systems aus Teilchen mit Spin $j = 2$ enthält zum ersten mal die gesamte Kette aus verschachtelten Algebren (3.5).

$$U(5) \supset SO(5) \supset SO(3) \quad (3.38)$$

Die beiden Hamiltonians \hat{H}_C und \hat{H}_g bestehen also jeweils aus vier Termen. Im Vergleich zum p-Bosonensystem existiert ein zusätzlicher Casimiroperator und eine zusätzliche Zweiteilchenwechselwirkung $\hat{V}^{(4)}$.

$$\hat{H}_C = x_1 \hat{C}_1[U(5)] + x_2 \hat{C}_2[U(5)] + x_3 \hat{C}_2[SO(5)] + x_4 \hat{C}_2[SO(3)] \quad (3.39)$$

$$\hat{H}_g = a_0 \hat{V}^{(0)} + a_2 \hat{V}^{(2)} + a_4 \hat{V}^{(4)} + A \hat{n}_0 \quad (3.40)$$

Für die Umparameterisierung von \hat{H}_g nach \hat{H}_C ergibt sich daher wie schon im Fall der s- und p-Bosonen ein eindeutig lösbares Gleichungssystem.

$$\begin{aligned}\sqrt{5}x_1 + 5\sqrt{5}x_2 + 4\sqrt{5}x_3 + 6\sqrt{5}x_4 &= A \\ x_2 - 4x_3 - 6x_4 &= a_0 \\ \sqrt{5}x_2 + \sqrt{5}x_3 - 3\sqrt{5}x_4 &= a_2 \\ \sqrt{9}x_2 + \sqrt{9}x_3 + 4\sqrt{9}x_4 &= a_4\end{aligned} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{aligned}x_1 &= \frac{1}{\sqrt{5}} \left(A - \frac{1}{\sqrt{5}} a_0 - \frac{12}{7} a_2 - \frac{36}{7\sqrt{5}} a_4 \right) \\ x_2 &= \frac{1}{5} a_0 + \frac{2}{7\sqrt{5}} a_2 + \frac{6}{35} a_4 \\ x_3 &= -\frac{1}{5} a_0 + \frac{2}{7\sqrt{5}} a_2 - \frac{1}{35} a_4 \\ x_4 &= -\frac{1}{7\sqrt{5}} a_2 + \frac{1}{21} a_4\end{aligned}\quad (3.41)$$

Die Eigenwerte des allgemeinen d-Bosonen Hamiltonians können also direkt angegeben werden.

$$\begin{aligned}\langle N, \nu, \Delta, L, M | \hat{n}_0 | N, \nu, \Delta, L, M \rangle &= \frac{1}{\sqrt{5}} N \\ \langle N, \nu, \Delta, L, M | \hat{V}^{(0)} | N, \nu, \Delta, L, M \rangle &= \frac{1}{5} (N(N+3) - \nu(\nu+3)) \\ \langle N, \nu, \Delta, L, M | \hat{V}^{(2)} | N, \nu, \Delta, L, M \rangle &= \frac{1}{7\sqrt{5}} (2N(N-2) + 2\nu(\nu+3) - L(L+1)) \\ \langle N, \nu, \Delta, L, M | \hat{V}^{(4)} | N, \nu, \Delta, L, M \rangle &= \frac{1}{7} \left(\frac{6}{5} N(N-2) - \frac{1}{5} \nu(\nu+3) + \frac{1}{3} L(L+1) \right)\end{aligned}\quad (3.42)$$

3.3.1.4 f-Bosonen

Das f-Bosonen-System verdient besondere Erwähnung, da in diesem Fall die Gruppenkette (3.5) nicht vollständig ist. Es sei

$$G_{J,M} := \left[f^\dagger \times \tilde{f} \right]_M^J \quad (3.43)$$

Wie im Kapitel 2.5.1 allgemein behandelt, generieren die $G_{J,M}$ für $J = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$ und $M = -J, \dots, J$ eine $U(7)$ Algebra. Die Generatoren zu ungeradem J schließen ebenfalls unter der Kommutatorrelation und generieren die $SO(7)$ Algebra. Der Spezialfall besteht nun darin,

dass auch die Generatoren zu $J = 1, 5$, also $G_{1,M}$ und $G_{5,M}$ eine Algebra bilden. Diese 14 Generatoren bilden die G_2 [36].

$$U(7) \supset SO(7) \supset G_2 \supset SO(3) \quad (3.44)$$

Der Kommutator zweier Generatoren aus der Menge mit den $G_{1,M}$ und den $G_{5,M}$ enthält also keinen Term mit $G_{3,M}$. Aus der Kommutatorrelation (2.54) für die Generatoren ist dies nicht direkt ersichtlich. Die entsprechenden Terme verschwinden, weil das entsprechende 6j-Symbol verschwindet. Dies liegt aber nicht an einer Verletzung der Dreiecksrelationen für Drehimpulskopplung. In diesem Sinne kann man von einer „Zufälligen“ Nullstelle des 6j-Symbols sprechen. Die G_2 -Lie-Algebra trägt den Namen „exceptional“, da sie nicht wie z.B. $U(n)$ in beliebiger Dimension existieren kann.

Da also für f-Bosonen eine weitere Algebra in der Kette auftaucht, existiert also auch ein weiterer Casimiroperator $\hat{C}_2[G_2]$. Man hat daher sowohl 5 Casimiroperatoren als auch 5 Ein- und -Zweikörperwechselwirkungen.

$$\hat{H}_C = x_1 \hat{C}_1[U(7)] + x_2 \hat{C}_2[U(7)] + x_3 \hat{C}_2[SO(7)] + x' \hat{C}_2[G_2] + x_4 \hat{C}_2[SO(3)] \quad (3.45)$$

$$\hat{H}_g = a_0 \hat{V}^{(0)} + a_2 \hat{V}^{(2)} + a_4 \hat{V}^{(4)} + a_6 \hat{V}^{(6)} + A \hat{n}_0 \quad (3.46)$$

Das f-Bosonensystem liegt dennoch im allgemeinen nicht in einer dynamischen Symmetrie vor, denn $\hat{C}_2[SO(7)]$ und $\hat{C}_2[G_2]$ sind linear abhängig. Der Parameter zu $\hat{C}_2[G_2]$ in Gleichung (3.45) kann daher auf Null gesetzt werden.

$$\begin{aligned} \hat{C}_1[U(7)] &= \sqrt{7} \hat{n}_0 \\ \hat{C}_2[U(7)] &= \hat{V}^{(0)} + \sqrt{5} \hat{V}^{(2)} + 3 \hat{V}^{(4)} + \sqrt{13} \hat{V}^{(6)} + 7 \sqrt{7} \hat{n}_0 \\ \hat{C}_2[SO(7)] &= -6 \hat{V}^{(0)} + \sqrt{5} \hat{V}^{(2)} + 3 \hat{V}^{(4)} + \sqrt{13} \hat{V}^{(6)} + 6 \sqrt{7} \hat{n}_0 \\ \hat{C}_2[G_2] &= \text{const.} \cdot \hat{C}_2[SO(7)] \\ \hat{C}_2[SO(3)] &= -12 \hat{V}^{(0)} - 9 \sqrt{5} \hat{V}^{(2)} - 6 \hat{V}^{(4)} + 9 \sqrt{13} \hat{V}^{(6)} + 12 \sqrt{7} \hat{n}_0 \end{aligned} \quad (3.47)$$

Für die Umparametrisierung von \hat{H}_g nach \hat{H}_C ergibt sich folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} a_0 &= x_2 - 6x_3 - 12x_4 \\ a_2 &= \sqrt{5}x_2 + \sqrt{5}x_3 - 9\sqrt{5}x_4 \\ a_4 &= 3x_2 + 3x_3 - 6x_4 \\ a_6 &= \sqrt{13}x_2 + \sqrt{13}x_3 + 9\sqrt{13}x_4 \\ A &= \sqrt{7}x_1 + 7\sqrt{7}x_2 + 6\sqrt{7}x_3 + 12\sqrt{7}x_4 \end{aligned} \quad (3.48)$$

Man hat es hier also mit 4 Variablen und 5 Gleichungen zu tun. Das Gleichungssystem ist also im allgemeinen nicht lösbar. Lediglich ein 4-dimensionaler Unterraum des 5-dimensionalen Parameterraums von \hat{H}_g kann nach \hat{H}_C umparametrisiert werden. Da nur die letzte Gleichung x_1 enthält, können zunächst nur die ersten vier Gleichungen betrachtet werden. Durch Eliminierung der Variablen x_2, x_3 und x_4 folgt eine Bedingung für die b_J , welche sich auch direkt aus (3.25) ablesen lässt.

$$-11b_2 + 18b_4 - 7b_6 = 0 \quad (3.49)$$

Die Bedingung muss erfüllt sein, um \hat{H}_g durch die Casimiroperatoren ausdrücken zu können. b_0 kommt in dieser Gleichung nicht vor, da die Wechselwirkung $\hat{V}^{(0)}$ durch Casimiroperatoren ausgedrückt werden kann (siehe (3.10)).

3.3.1.5 Bosonen mit Spin $j \geq 4$

Für Bosonen mit Spin $j \geq 4$ ist die Gruppenkette

$$U(n) \supset SO(n) \supset SO(3) \quad (3.50)$$

zumindest für alle dahingehend untersuchten Fälle wieder vollständig. Die Anzahl der Bedingungen für die Darstellung in Casimirform nimmt mit dem Bosonenspin jeweils um eins zu, da die Anzahl der Zweikörperterme jeweils um eins steigt. Die entsprechenden Gleichungen bis zum Spin $j = 6$ werden hier exemplarisch angegeben (siehe Gleichung (3.25)).

$$\begin{aligned}
-11b_2 + 18b_4 - 7b_6 &= 0 & \text{für } j = 3, 4, 5, 6, \dots \\
-26b_2 + 33b_4 - 7b_8 &= 0 & \text{für } j = 4, 5, 6, \dots \\
-45b_2 + 52b_4 - 7b_{10} &= 0 & \text{für } j = 5, 6, \dots \\
-68b_2 + 75b_4 - 7b_{12} &= 0 & \text{für } j = 6, \dots
\end{aligned} \tag{3.51}$$

3.3.2 Dynamische Symmetrien für Fermionen

Wie schon im Fall der Bosonen wird der allgemeine Hamiltonian, welcher Ein- und Zweikörperterme enthält mit \hat{H}_g bezeichnet. Der allgemeinste Hamiltonian in Casimirform sei wieder \hat{H}_C . Die Umrechnung von

$$\hat{H}_g = \sum_J a_J \hat{V}^{(J)} + A \hat{n}_0 \tag{3.52}$$

nach

$$\hat{H}_C = x_1 \hat{C}_1[U(n)] + x_2 \hat{C}_2[U(n)] + x_3 \hat{C}_2[USp(n)] + x_4 \hat{C}_2[SU(2)] \tag{3.53}$$

führt analog zum Bosonenfall auf ein Gleichungssystem für die Koeffizienten. Um handlichere Terme zu erhalten, werden wieder b_J und B definiert:

$$\begin{aligned}
b_J &:= \frac{a_J}{\sqrt{2J+1}} \\
B &:= \frac{A}{\sqrt{n}}
\end{aligned} \tag{3.54}$$

Damit lautet das zu lösende Gleichungssystem:

$$\begin{aligned}
b_0 &= x_2 + (n+1)x_3 + \frac{1}{4}(n^2-1)x_4 \\
b_J &= x_2 + x_3 + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}(n^2-1) - J(J+1)\right)x_4 \\
B &= x_1 + nx_2 + (n+1)x_3 + \frac{1}{4}(n^2-1)x_4
\end{aligned} \tag{3.55}$$

Wobei $J = 2, 4, 6, \dots, 2j-1$, je nachdem um welchen Fermionenspin es sich handelt. Diese Gleichungen stimmen bis auf wenige Vorzeichen mit denen aus Kapitel 3.3.1 überein. Ein analoger Lösungsweg für dieses Gleichungssystem liefert:

$$x_4 = \frac{b_2 - b_J}{\frac{1}{2}J(J+1) - 3}, \quad J = 4, 6, 8, \dots \tag{3.56}$$

Also gilt

$$x_4 = \frac{b_2 - b_4}{7} \tag{3.57}$$

und die Bedingung für die Lösbarkeit des Gleichungssystems ist

$$\frac{b_4 - b_2}{7} = \frac{b_J - b_2}{\frac{1}{2}J(J+1) - 3} \tag{3.58}$$

Dies lässt sich umformen zu

$$\frac{1}{7} \left[\left(\frac{1}{2}J(J+1) - 3\right)b_4 - \left(\frac{1}{2}J(J+1) - 10\right)b_2 \right] = b_J, \quad J = 6, 8, 10, \dots \tag{3.59}$$

Es ist höchst bemerkenswert, dass diese Gleichung mit der entsprechenden Bedingung für Bosonen (3.25) identisch ist. Ist diese Bedingung erfüllt, so kann die Umparameterisierung nach \hat{H}_c erfolgen:

$$\begin{aligned}
x_1 &= B - \frac{1}{n}b_0 + \frac{n^4 - n^3 - 41n^2 + n + 40}{28n}b_2 + \frac{-n^4 + n^3 + 13n^2 - n - 12}{28n}b_4 \\
x_2 &= \frac{1}{n} \left(-b_0 + \frac{-n^3 + 41n + 40}{28}b_2 + \frac{n^3 - 13n - 12}{28}b_4 \right) \\
x_3 &= \frac{1}{n} \left(b_0 - \frac{10}{7}b_2 + \frac{3}{7}b_4 \right) \\
x_4 &= \frac{b_2 - b_4}{7} = \frac{b_2 - b_J}{\frac{1}{2}J(J+1) - 3}
\end{aligned} \tag{3.60}$$

Bis auf wenige Vorzeichen sind diese Gleichungen wieder identisch mit denen des Bosonensystems (3.26). Für ein System bestehend aus Fermionen mit $j = 1/2$ existieren die Terme $\hat{V}^{(2)}$ und $\hat{V}^{(4)}$ nicht und für $j = 3/2$ existiert $\hat{V}^{(4)}$ nicht. Analog zum Fall eines Bosonensystems kann auch hier das Gleichungssystem (3.60) trotzdem verwendet werden. Für $j = 1/2$ setzt man $b_4 = b_2 = b_0$ und für $j = 3/2$ setzt man $b_4 = b_2$. Dies liefert dann die Ergebnisse wie in den Kapiteln 3.3.2.1 und 3.3.2.2 vorgestellt. Für $j = 1/2$ ergibt sich $x_3 = x_4 = 0$ und für $j = 3/2$ erhält man $x_4 = 0$ in Übereinstimmung damit, dass nur zwei bzw. drei Gleichungen nötig sind, um den allgemeinen Hamiltonian durch Casimiroperatoren auszudrücken. Man betrachte nun die Koeffizienten von b_2 und b_4 der ersten beiden Gleichungen als Funktion von n .

$$\begin{aligned}
P_{1,2}^F(n) &:= \frac{n^4 - n^3 - 41n^2 + n + 40}{28n} \\
P_{1,4}^F(n) &:= \frac{-n^4 + n^3 + 13n^2 - n - 12}{28n} \\
P_{2,2}^F(n) &:= \frac{-n^3 + 41n + 40}{28n} \\
P_{2,4}^F(n) &:= \frac{n^3 - 13n - 12}{28n}
\end{aligned} \tag{3.61}$$

Diese Funktionen von n haben folgende Nullstellen:

Koeffizient	Nullstellen
$P_{1,2}^F(n)$	$-1, 1, \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{161}, \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{161}$
$P_{1,4}^F(n)$	$-1, 1, -3, 4$
$P_{2,2}^F(n)$	$-1, \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{161}, \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{161}$
$P_{2,4}^F(n)$	$-1, -3, 4$

Die zu b_4 gehörenden Koeffizienten $P_{1,4}^F(n)$ und $P_{2,4}^F(n)$ haben also jeweils eine Nullstelle bei $n = 4$ bzw. $j = 3/2$ in Übereinstimmung damit, dass die entsprechenden Terme nicht existieren. Sie haben jedoch keine Nullstelle bei $n = 2$. Da $P_{1,2}^F(n)$ und $P_{2,2}^F(n)$ ebenfalls keine Nullstelle bei $n = 2$ besitzen ist auch hier Vorsicht geboten, wenn diese Gleichungen auf solche Systeme angewendet werden. Im Folgenden sind wie schon im Fall der Bosonen alle unterschiedlichen Fälle einzeln aufgeführt.

3.3.2.1 $j = \frac{1}{2}$ -Fermionen

Das einfachste fermionische System identischer Teilchen besteht aus $j = \frac{1}{2}$ -Fermionen. Aufgrund des Pauliprinzip existieren lediglich die Teilchenzahlen $N = 0, 1, 2$ und insgesamt nur 4 Zustände. Aus Konsistenzgründen werden diese Zustände wieder mit allen 5 Quantenzahlen bezeichnet.

$$|0, 0, 0, 0, 0\rangle \quad ; \quad |1, 1, 0, 1/2, 1/2\rangle \quad ; \quad |1, 1, 0, 1/2, -1/2\rangle \quad ; \quad |2, 0, 0, 0, 0\rangle$$

Es sei

$$G_{J,M} := \left[a_{1/2}^\dagger \times \tilde{a}_{1/2} \right]_M^J \quad (3.62)$$

Die 4 Generatoren $G_{0,0}$, $G_{1,-1}$, $G_{1,0}$ und $G_{1,1}$ generieren eine $U(2)$ -Algebra. Die Generatoren zu ungeradem Drehimpuls schließen unter Kommutatorrelation und bilden eine $USp(2)$ -Algebra. Da jedoch nur ein ungerader Drehimpuls $J = 1$ existiert, ist diese Algebra identisch mit der $SU(2)$ -Algebra. Es gilt also $USp(2) \equiv SU(2)$. Daher überrascht es nicht, dass die beiden Casimiroperatoren $\hat{C}_2[USp(2)]$ und $\hat{C}_2[SU(2)]$ linear abhängig sind.

$$\begin{aligned} \hat{C}_1[U(2)] &= \sqrt{2}\hat{n}_0 \\ \hat{C}_2[U(2)] &= \hat{V}^{(0)} + 2\sqrt{2}\hat{n}_0 \\ \hat{C}_2[USp(2)] &= 3\hat{V}^{(0)} + 3\sqrt{2}\hat{n}_0 \\ \hat{C}_2[SU(2)] &= \frac{3}{4}\hat{V}^{(0)} + \frac{3}{4}\sqrt{2}\hat{n}_0 \end{aligned} \quad (3.63)$$

Aufgrund der linearen Abhängigkeit enthält \hat{H}_C nur drei Terme.

$$\hat{H}_C = x_1\hat{C}_1[U(2)] + x_2\hat{C}_2[U(2)] + x_3\hat{C}_2[USp(2)] \quad (3.64)$$

Da für $j = \frac{1}{2}$ lediglich ein einziger Zweikörperterm $\hat{V}^{(0)}$ existiert, enthält \hat{H}_g nur zwei Terme.

$$\hat{H}_g = a_0\hat{V}^{(0)} + A\hat{n}_0 \quad (3.65)$$

Daher sind bei der Umparametrisierung auch nur zwei Casimiroperatoren nötig. Durch die Wahl $\hat{C}_1[U(2)]$ und $\hat{C}_2[U(2)]$ und folgt das Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} b_0 = x_2 & \quad \Leftrightarrow \quad x_1 = B - 2b_0 \\ B = x_1 + 2x_2 & \quad \Leftrightarrow \quad x_2 = b_0 \end{aligned} \quad (3.66)$$

Die Eigenwerte des allgemeinen Hamiltonians können also direkt angegeben werden.

$$\begin{aligned} \langle N, \nu, \Delta, L, M | \hat{n}_0 | N, \nu, \Delta, L, M \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}N \\ \langle N, \nu, \Delta, L, M | \hat{V}^{(0)} | N, \nu, \Delta, L, M \rangle &= N(1 - N) \end{aligned} \quad (3.67)$$

3.3.2.2 $j = \frac{3}{2}$ -Fermionen

Wie schon für $j = \frac{1}{2}$ sind auch für ein $j = \frac{3}{2}$ -System die Casimiroperatoren der symplektischen und der Drehimpulsgruppe linear abhängig. Dies liegt wieder daran, dass nur ein einziger ungerader Drehimpuls $J = 1$ existiert, zu dem die elementaren Erzeuger und Vernichter koppeln können. Somit ist der Satz der Generatoren, welche die $USp(4)$ -Algebra und die $SU(2)$ -Algebra bilden, gleich.

$$\begin{aligned} \hat{C}_1[U(4)] &= 2\hat{n}_0 \\ \hat{C}_2[U(4)] &= \hat{V}^{(0)} + \sqrt{5}\hat{V}^{(2)} + 8\hat{n}_0 \\ \hat{C}_2[USp(4)] &= 5\hat{V}^{(0)} + \sqrt{5}\hat{V}^{(2)} + 10\hat{n}_0 \\ \hat{C}_2[SU(2)] &= \frac{15}{4}\hat{V}^{(0)} + \frac{3}{4}\sqrt{5}\hat{V}^{(2)} + \frac{15}{2}\hat{n}_0 \end{aligned} \quad (3.68)$$

\hat{H}_C enthält also ebenso wie \hat{H}_g wieder drei Terme.

$$\hat{H}_C = x_1\hat{C}_1[U(4)] + x_2\hat{C}_2[U(4)] + x_3\hat{C}_2[USp(4)] \quad (3.69)$$

$$\hat{H}_g = a_0\hat{V}^{(0)} + a_2\hat{V}^{(2)} + A\hat{n}_0 \quad (3.70)$$

Für die Umparametrisierung von \hat{H}_g nach \hat{H}_C ergibt sich folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} B &= x_1 + 4x_2 + 5x_3 & x_1 &= B - \frac{1}{4}b_0 - \frac{15}{4}b_2 \\ b_0 &= x_2 + 5x_3 & \Leftrightarrow \quad x_2 &= \frac{1}{4}(5b_2 - b_0) \\ b_2 &= x_2 + x_3 & x_3 &= \frac{1}{4}(b_0 - b_2) \end{aligned} \quad (3.71)$$

Die Eigenwerte von \hat{H}_g können also direkt angegeben werden.

$$\begin{aligned} \langle N, \nu, \Delta, L, M | \hat{n}_0 | N, \nu, \Delta, L, M \rangle &= \frac{1}{2}N \\ \langle N, \nu, \Delta, L, M | \hat{V}^{(0)} | N, \nu, \Delta, L, M \rangle &= -\frac{2}{3}N + \frac{1}{4}N^2 + \frac{1}{4}\nu(6 - \nu) \\ \langle N, \nu, \Delta, L, M | \hat{V}^{(2)} | N, \nu, \Delta, L, M \rangle &= -\frac{3\sqrt{5}}{4}N + \frac{\sqrt{5}}{4}N(5 - N) - \frac{1}{4\sqrt{5}}\nu(6 - \nu) \end{aligned} \quad (3.72)$$

3.3.2.3 $j = \frac{5}{2}$ -Fermionen

Der niedrigste Spin, für den alle vier Casimiroperatoren linear unabhängig sind ist $j = \frac{5}{2}$. Der allgemeinste Hamiltonian in Casimirform lautet daher

$$\hat{H}_C = x_1 \hat{C}_1[U(6)] + x_2 \hat{C}_2[U(6)] + x_3 \hat{C}_2[USp(6)] + x_4 \hat{C}_2[SU(2)] \quad (3.73)$$

und der allgemeinste Hamiltonian überhaupt ist

$$\hat{H}_g = a_0 \hat{V}^{(0)} + a_2 \hat{V}^{(2)} + a_4 \hat{V}^{(4)} + A \hat{n}_0 \quad (3.74)$$

Für die Umparametrisierung von \hat{H}_g nach \hat{H}_C ergibt sich also ein Gleichungssystem bestehend aus vier Gleichungen mit vier Unbekannten. Dieses ist eindeutig lösbar.

$$\begin{aligned} B &= x_1 + 6x_2 + 7x_3 + \frac{35}{4}x_4 & x_1 &= B - \frac{1}{6}b_0 - \frac{25}{12}b_2 - \frac{15}{4}b_4 \\ b_0 &= x_2 + 7x_3 + \frac{35}{4}x_4 & \Leftrightarrow \quad x_2 &= -\frac{1}{6}b_0 + \frac{5}{12}b_2 + \frac{3}{4}b_4 \\ b_2 &= x_2 + x_3 + \frac{23}{4}x_4 & x_3 &= \frac{1}{6}b_0 - \frac{5}{21}b_2 + \frac{1}{14}b_4 \\ b_4 &= x_2 + x_3 - \frac{5}{4}x_4 & x_4 &= \frac{1}{7}(b_2 - b_4) \end{aligned} \quad (3.75)$$

Das $j = \frac{5}{2}$ -Fermionen-System liegt also wie die fermionischen System mit $j = \frac{1}{2}$ und $j = \frac{3}{2}$ immer als dynamische Symmetrie vor.

$$\begin{aligned} \langle N, \nu, \Delta, L, M | \hat{n}_0 | N, \nu, \Delta, L, M \rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}}N \\ \langle N, \nu, \Delta, L, M | \hat{V}^{(0)} | N, \nu, \Delta, L, M \rangle &= -\frac{1}{6}N(8 - N) + \frac{1}{6}\nu(8 - \nu) \\ \langle N, \nu, \Delta, L, M | \hat{V}^{(2)} | N, \nu, \Delta, L, M \rangle &= \frac{\sqrt{5}}{12}N(2 - N) - \frac{\sqrt{5}}{21}\nu(8 - \nu) + \frac{1}{7\sqrt{5}}J(J + 1) \\ \langle N, \nu, \Delta, L, M | \hat{V}^{(4)} | N, \nu, \Delta, L, M \rangle &= \frac{1}{4}N(2 - N) + \frac{1}{42}\nu(8 - \nu) - \frac{1}{21}J(J + 1) \end{aligned} \quad (3.76)$$

3.3.2.4 Fermionen mit Spin $j \geq \frac{7}{2}$

Für identische Teilchen mit Spin $j \geq \frac{7}{2}$ existieren vier linear unabhängige Casimiroperatoren. Die Anzahl der Ein- und Zweiteilchenwechselwirkungen des allgemeinen Hamiltonians \hat{H}_g ist

gleich fünf für $j = \frac{7}{2}$ und nimmt mit jedem nächsthöherem Spin jeweils um eins zu. Daher existiert für $j = \frac{7}{2}$ genau eine Gleichung für die Koeffizienten der Wechselwirkung, die erfüllt sein muss, damit das System als dynamische Symmetrie vorliegt. Die Anzahl dieser Bedingungen $N_{dyn}(j)$ steigt um eins mit jedem nächst grösseren halbzahligen Teilchenspin. Daher gilt $N_{dyn}(j) = \frac{2j+1}{2} - 3 = \frac{n}{2} - 3$. Die entsprechenden Gleichungen bis zu Spin $j = \frac{13}{2}$ lauten (siehe Gleichung (3.59)).

$$\begin{aligned}
-11b_2 + 18b_4 - 7b_6 &= 0 & \text{für } j = 7/2, 9/2, 11/2, 13/2, \dots \\
-26b_2 + 33b_4 - 7b_8 &= 0 & \text{für } j = 9/2, 11/2, 13/2, \dots \\
-45b_2 + 52b_4 - 7b_{10} &= 0 & \text{für } j = 11/2, 13/2, \dots \\
-68b_2 + 75b_4 - 7b_{12} &= 0 & \text{für } j = 13/2, \dots
\end{aligned} \tag{3.77}$$

Wie im Kapitel 3.4 gezeigt wird, ist für diese Teilchen die Senioritätsquantenzahl immer erhalten. Obwohl der allgemeine Hamiltonian also keine Quantenzahl bricht, kann er nicht als Summe von paarweise vertauschenden Casimiroperatoren geschrieben werden.

3.4 Seniorität erhaltende Wechselwirkungen

In diesem Kapitel wird die Frage untersucht, unter welchen Bedingungen die Zustände eines Systems identischer Teilchen eine gute Senioritätsquantenzahl besitzen. Die Forderung nach guter Seniorität ist schwächer als die Forderung nach dynamischer Symmetrie (siehe Kapitel 3.3). Lässt sich der Hamiltonian durch Casimiroperatoren einer Kette von Algebren ausdrücken, so ist \hat{H} diagonal. Ist lediglich die Seniorität nicht verletzt, so zerfällt \hat{H} in Blöcke, die zu gleichem N , ν und J gehören. Der Hamiltonian mischt also nur Basiszustände mit gleichen N , ν und J . Die Dimension dieser Blöcke entspricht daher der Multiplizität. Ist die Multiplizität gleich eins, so ist der entsprechende Zustand $|N, \nu, 0, J\rangle$ also ein Eigenzustand von \hat{H} . In diesem Fall ist zumindest dieser Zustand lösbar [37, 38].

3.4.1 Hamiltonians mit guter Seniorität

Der Hamiltonian eines Systems identischer Teilchen erhält die Seniorität genau dann, wenn er mit dem Casimiroperator der zur Senioritätsquantenzahl gehörenden Algebra vertauscht. Diese ist die $SO(n)$ -Algebra für Bosonen und die $USp(n)$ -Algebra für Fermionen. Der Casimiroperator wird im Folgenden unabhängig davon, ob es sich um Bosonen oder Fermionen handelt, mit \hat{C}_2 bezeichnet.

$$\hat{C}_2 = \begin{cases} \hat{C}_2[SO(n)] & \text{für Bosonen} \\ \hat{C}_2[USp(n)] & \text{für Fermionen} \end{cases} \tag{3.78}$$

Wir suchen nun alle Hamiltonians, welche mit diesem Operator vertauschen.

$$[\hat{H}, \hat{C}_2] = 0 \tag{3.79}$$

Aufgrund der Gleichungen (3.10) und (3.11) gilt für den Casimiroperator

$$\hat{C}_2 = -(-1)^q n \hat{V}^{(0)} + (n - (-1)^q 2) \hat{C}_1[U(n)] + (-1)^q (\hat{C}_1[U(n)])^2 \tag{3.80}$$

für Bosonen und Fermionen gleichermaßen ($q = 0$ für Bosonen und $q = 1$ für Fermionen). Dies setzen wir in Gleichung (3.79) ein und erhalten:

$$\left[\hat{H}, -(-1)^q n \hat{V}^{(0)} \right] + \underbrace{\left[\hat{H}, (n - (-1)^q 2) \hat{C}_1[U(n)] \right]}_{=0} + \left[\hat{H}, +(-1)^q (\hat{C}_1[U(n)])^2 \right] = 0 \tag{3.81}$$

Außerdem gilt wegen (D.49):

$$\begin{aligned} \left[\hat{H}, +(-1)^q (\hat{C}_1[U(n)])^2 \right] &= \underbrace{\left[\hat{H}, \hat{C}_1[U(n)] \right]}_{=0} (-1)^q \hat{C}_1[U(n)] + \\ &\hat{C}_1[U(n)] \underbrace{\left[\hat{H}, (-1)^q \hat{C}_1[U(n)] \right]}_{=0} = 0 \end{aligned} \quad (3.82)$$

Und daher ist die Forderung nach guter Seniorität äquivalent mit der Forderung nach dem Vertauschen mit $\hat{V}^{(0)}$.

$$\left[\hat{H}, \hat{C}_2 \right] = 0 \Leftrightarrow \left[\hat{H}, \hat{V}^{(0)} \right] = 0 \quad (3.83)$$

Der allgemeine Hamiltonian ist eine Linearkombination des Anzahloperators und der $\hat{V}^{(J)}$.

$$\hat{H} = A \cdot \hat{n}_0 + \sum_{J \text{ gerade}} a_J \hat{V}^{(J)} \quad (3.84)$$

Da $[\hat{n}_0, \hat{V}^{(0)}] = 0$ gilt, ergibt sich als Bedingung für gute Seniorität:

$$\sum_{J \text{ gerade}} a_J [\hat{V}^{(J)}, \hat{V}^{(0)}] = 0 \quad (3.85)$$

In Kapitel C.3 wurde ein Ausdruck für $[\hat{V}^{(J)}, \hat{V}^{(0)}]$ hergeleitet. Diesen setzen wir ein.

$$\begin{aligned} \sum_{J \text{ gerade}} a_J \frac{4}{\sqrt{2j+1}} & \left([(c^\dagger \times c^\dagger)^{(J)} \times c^\dagger]^{(j)} \times ((\tilde{c} \times \tilde{c})^{(0)} \times \tilde{c})^{(j)} \right)_0^{(0)} - \\ & \left([(c^\dagger \times c^\dagger)^{(0)} \times c^\dagger]^{(j)} \times ((\tilde{c} \times \tilde{c})^{(J)} \times \tilde{c})^{(j)} \right)_0^{(0)} = 0 \end{aligned} \quad (3.86)$$

Als nächstes wollen wir die Dreikörperterme jeweils durch einen gleichen fest gewählten vollständigen Satz von Dreikörpertermen ausdrücken. Dieser Schritt ist notwendig, da die Dreikörperoperatoren im allgemeinen nicht linear unabhängig sind. Wir müssen dafür einen Satz von Drehimpulsen J_1, J_2, \dots, J_d finden, so dass die Operatoren $[(c^\dagger \times c^\dagger)^{(J_a)} \times c^\dagger]_0^{(j)}$ einen minimalen und vollständigen Satz bilden. Danach ist es möglich ist, einen beliebigen Operator der Form $[(c^\dagger \times c^\dagger)^{(J)} \times c^\dagger]_0^{(j)}$ durch die $[(c^\dagger \times c^\dagger)^{(J_a)} \times c^\dagger]_0^{(j)}$ mit $a = 1, 2, \dots, d$ auszudrücken (c_a seien die Entwicklungskoeffizienten).

$$\left[(c^\dagger \times c^\dagger)^{(J)} \times c^\dagger \right]_m^{(j)} = \sum_{a=1}^d c_a \cdot \left[(c^\dagger \times c^\dagger)^{(J_a)} \times c^\dagger \right]_m^{(j)} \quad (3.87)$$

Dies ist nichts anderes, als das Drei-Teilchen-CFP-Problem. Sei nun $S(j) := J_1, J_2, \dots, J_d$ solch ein Satz von Drehimpulsen. Aufgrund der Gleichungen aus Kapitel D.5 gilt dann:

$$\left[(c^\dagger \times c^\dagger)^{(J)} \times c^\dagger \right]_m^{(j)} = \sum_{a=1}^d 2[j^2(J)jj] \{j^3[J_a]j\}_u \left[(c^\dagger \times c^\dagger)^{(J_a)} \times c^\dagger \right]_m^{(j)} \quad (3.88)$$

$$\left[(\tilde{c} \times \tilde{c})^{(J)} \times \tilde{c} \right]_m^{(j)} = \sum_{b=1}^d 2[j^2(J)jj] \{j^3[J_b]j\}_u \left[(\tilde{c} \times \tilde{c})^{(J_b)} \times \tilde{c} \right]_m^{(j)} \quad (3.89)$$

Der tief gestellte Index u deutet hierbei an, dass es sich um nicht normierte CFP's handelt. Wir setzen diese Gleichungen ein und erhalten

$$\begin{aligned} \sum_{J \text{ gerade}} a_J \sum_{a,b} & \left([(c^\dagger \times c^\dagger)^{(J_a)} \times c^\dagger]^{(j)} \times ((\tilde{c} \times \tilde{c})^{(J_b)} \times \tilde{c})^{(j)} \right)_0^{(0)} \times \\ & ([j^2(J)jj] \{j^3[J_a]j\}_u [j^2(0)jj] \{j^3[J_b]j\}_u - [j^2(0)jj] \{j^3[J_a]j\}_u [j^2(J)jj] \{j^3[J_b]j\}_u) = 0 \end{aligned} \quad (3.90)$$

Da die Dreiteilchenoperatoren nach Voraussetzung alle linear unabhängig sind, gilt diese Gleichung für jedes feste Paar von a und b .

$$\sum_{J \text{ gerade}} a_J [j^2(J)jj] \{j^3[J_a]j\}_u [j^2(0)jj] \{j^3[J_b]j\}_u = \sum_{J \text{ gerade}} a_J [j^2(0)jj] \{j^3[J_a]j\}_u [j^2(J)jj] \{j^3[J_b]j\}_u \quad (3.91)$$

Wir untersuchen nun die Frage, wie viele dieser Bedingungen für ein bestimmtes j existieren. Dies ergibt sich aus der Anzahl der linear unabhängigen Operatoren der Form $[(c^\dagger \times c^\dagger)^{(J)} \times c^\dagger]_0^{(j)}$ für festes j und variables J , ist also gleich der Anzahl d der Elemente der Menge $S(j)$. Diese Zahl d ist gleich der Dimension der durch die Zustände

$$|j^3, J, j\rangle_u := [(c^\dagger \times c^\dagger)^{(J)} \times c^\dagger]_0^{(j)} |0\rangle \quad (3.92)$$

aufgespannten Raumes. Es existiert unabhängig von j genau ein Zustand dieser Art mit Seniorität $\nu = 1$ (diesen erhalten wir für $J = 0$). Für die übrigen Zustände (falls existent) gilt $\nu = 3$. Wir suchen also die Multiplizität von $[3, 3, \Delta, j]$. Diese ist $\lfloor j/3 \rfloor$ für Bosonen und $\lfloor (2j-3)/6 \rfloor$ für Fermionen (siehe die Kapitel C.4.2 und C.4.3).

$$d = \dim(S(j)) = \begin{cases} \lfloor \frac{j}{3} \rfloor + 1 & \text{für Bosonen} \\ \lfloor \frac{2j-3}{3} \rfloor + 1 & \text{für Fermionen} \end{cases} \quad (3.93)$$

Existieren keine Zustände mit $\nu = 3$, so ist Gleichung (3.91) immer erfüllt, denn es gilt $J_a = J_b = 0$. Daher ist die Seniorität für identische Teilchen mit dem Spins $j = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, 5/2, 7/2$ immer erhalten [10]. Für $J = 0$ ist Gleichung (3.91) ebenfalls erfüllt, in Übereinstimmung mit $[\hat{V}^{(0)}, \hat{C}_2] = 0$. Da der Anzahloperator ebenfalls die Seniorität erhält ($[\hat{n}_0, \hat{C}_2] = 0$), enthält ein Seniorität erhaltender Hamiltonian der Form (3.84) immer mindestens zwei freie Parameter A und a_0 . Um die Bedingungen für die anderen a_J explizit zu erhalten, können wir also $J > 0$ setzen. Als weitere Vereinfachung bietet sich an $J_a = 0$ und $J_b > 0$ zu setzen. Die Wahl $J_a = 0$ ist möglich denn in $S(j)$ ist immer der Drehimpuls Null enthalten (dies entspricht dem Zustand mit $\nu = 1$, der immer existiert). Selbstverständlich ist es im Fall von $j = 0$ sowie $j = 1/2$ nicht möglich mit $J \geq 2$ bzw. $J_b \geq 2$ zu arbeiten. Die entsprechenden Gleichungen gelten also nur für $j \geq 1$. Jetzt setzen wir in (3.91) Gleichung (D.37) ein.

$$\sum_{J>0 \text{ gerade}} a_J [2\sqrt{2J+1} \begin{Bmatrix} j & j & 0 \\ j & j & J \end{Bmatrix} \cdot 2\sqrt{2J_b+1} \begin{Bmatrix} j & j & J_b \\ j & j & 0 \end{Bmatrix} - (1+2 \begin{Bmatrix} j & j & 0 \\ j & j & 0 \end{Bmatrix}) (\delta_{J,J_b} + 2\sqrt{(2J+1)(2J_b+1)} \begin{Bmatrix} j & j & J_b \\ j & j & J \end{Bmatrix})] = 0 \quad (3.94)$$

Drei der vier 6j-Symbole können durch den in Gleichung (D.27) angegebenen handlicheren Ausdruck ersetzt werden.

$$\sum_{J>0 \text{ gerade}} a_J \left[\frac{4\sqrt{(2J+1)(2J_b+1)}}{(2j+1)(2j+1+2\sigma)} - \left(\delta_{J,J_b} + 2\sqrt{(2J+1)(2J_b+1)} \begin{Bmatrix} j & j & J_b \\ j & j & J \end{Bmatrix} \right) \right] = 0 \quad (3.95)$$

wobei gilt: $\sigma = (-1)^{2j}$ und somit $\sigma = 1$ für Bosonen und $\sigma = -1$ für Fermionen. Eine einzelne Wechselwirkung $\hat{V}^{(J)}$ erhält also die Seniorität, wenn für *alle* $J_b \in S(j)$, $2 \leq J_b \leq 2j$ gilt:

$$\frac{4\sqrt{(2J+1)(2J_b+1)}}{(2j+1)(2j+1+2\sigma)} = \delta_{J,J_b} + 2\sqrt{(2J+1)(2J_b+1)} \begin{Bmatrix} j & j & J_b \\ j & j & J \end{Bmatrix} \quad (3.96)$$

Es ist immer möglich, den Satz $S(j)$ von Drehimpulsen für welche die Operatoren der Form $[(c^\dagger \times c^\dagger)^{(J_b)} \times c^\dagger]_0^{(j)}$ für festes j und variables J_b einen minimalen vollständigen Satz bilden,

so zu wählen, dass sowohl $J_b = 0$ als auch $J_b = 2$ enthalten ist. Existiert nur eine Bedingung für die a_J , damit der Hamiltonian die Seniorität erhält, genügt es also den Fall $J_b = 2$ zu betrachten. Auch für die anderen Fälle hat dies Relevanz, denn gilt $[\hat{V}^{(J)}, \hat{C}_2] = 0$ für ein bestimmtes J , so folgt daraus Gleichung (3.96). Lediglich der Umkehrschluss ist nicht immer zulässig. Angenommen es sind zwei Bedingungen notwendig. Dann ist denkbar, dass z.B. in der ersten Gleichung der Term a_4 auftaucht, in der zweiten Gleichung jedoch nicht. Dies würde sich evtl. nur dann zeigen, wenn man (3.96) für *alle* Drehimpulse der Menge $S(j)$ auswertet. Ist (3.96) jedoch verletzt, so muss die entsprechende Wechselwirkung die Seniorität brechen. Wir setzen also $J_b = 2$ und nach Anwendung von (D.29) erhalten wir:

$$\frac{4\sqrt{5(2J+1)}}{(2j+1)(2j+1+2\sigma)} - \delta_{J,J_b} - 2\sqrt{5(J+1)} \cdot (-)^{2j+J} \frac{3(2j(j+1) - J(J+1))(2j(j+1) - J(J+1) - 1) - 4j^2(j+1)^2}{2(2j+1)(2j-1)(2j+3)(j+1)j} = 0 \quad (3.97)$$

Zur weiteren Analyse unterscheiden wir die vier Fälle $\sigma = 1$ (Bosonen) mit $J = 2$, $\sigma = 1$ mit $J > 2$, $\sigma = -1$ (Fermionen) mit $J = 2$ und $\sigma = -1$ mit $J > 2$.

- $\sigma = 1$, $J = 2$: Durch Einsetzen in Gleichung (3.97) erhalten wir:

$$\frac{8j^5 + 60j^4 + 50j^3 - 375j^2 - 373j + 630}{j(2j+3)(j+1)(4j^2-1)} = 0 \quad (3.98)$$

Das Polynom im Nenner ist gleich Null für $j = -3/2, -1, -1/2, 0, 1/2$. Da die Bedingung aber unter der Voraussetzung $j \geq 1$ aufgestellt wurde, können wir die Gleichung mit diesem Polynom multiplizieren.

$$8j^5 + 60j^4 + 50j^3 - 375j^2 - 373j + 630 = 0 \quad (3.99)$$

Diese Gleichung ist erfüllt für $j = -9/2, -7/2, -5/2, 1, 2$. Da wir hier $\sigma = 1$ gesetzt haben, also ein Bosonensystem betrachten, sind wir nur an den ganzzahligen Lösungen interessiert. Dies bedeutet also, dass in einem System identischer Bosonen mit dem Spin $j = 1$ bzw. $j = 2$ die Wechselwirkung $\hat{V}_j^{(2)}$ die Seniorität erhält. Dies ist konsistent mit dem obigen Ergebnis, dass ein p- und d-Bosonensystem immer in einer dynamischen Symmetrie vorliegt und daher auch die Seniorität erhalten sein muss.

- $\sigma = 1$, $J > 2$: Durch Einsetzen und der gleichen Argumentation wie oben, gelangt man zu folgender Bedingung:

$$3J^4 + 6J^3 - 6[2j(j+1) - 1]J^2 - 3[4j(j+1) - 1]J + 2j(j+1)(2j-1)(2j+1) = 0 \quad (3.100)$$

Diese Gleichung ist erfüllt für $(j, J) = (2, 4)$. Dies bestätigt das schon bekannte Ergebnis, dass jede beliebige Wechselwirkung eines d-Bosonensystems (also auch $\hat{V}_2^{(4)}$) die Seniorität erhält. Überraschenderweise erfüllt auch die Hexadecapolwechselwirkung eines h-Bosonensystems $(j, J) = (5, 4)$ also $\hat{V}_5^{(4)}$ die Bedingung. Da diese Bedingung eine diophantische Gleichung ist, ist die Lösbarkeit nicht entscheidbar. Eine numerische Suche nach weiteren Lösungen ergab, dass für $j \leq 10^8$ nur die bisher aufgeführten Wechselwirkungen ν erhalten.

- $\sigma = -1$, $J = 2$

$$8j^5 - 20j^4 - 110j^3 + 245j^2 + 327j - 630 = 0 \quad (3.101)$$

Diese Gleichung ist erfüllt für $j = -3, -2, 3/2, 5/2, 7/2$. Da wir hier ein System identischer Fermionen betrachten, sind nur die halbzahligen Drehimpulse von Interesse. $\hat{V}_j^{(2)}$ erhält also die Seniorität für $j = 3/2, 5/2, 7/2$, was konsistent ist mit dem weiter oben angeführten Ergebnis, dass Fermionen mit $j \leq 7/2$ die Seniorität nicht brechen.

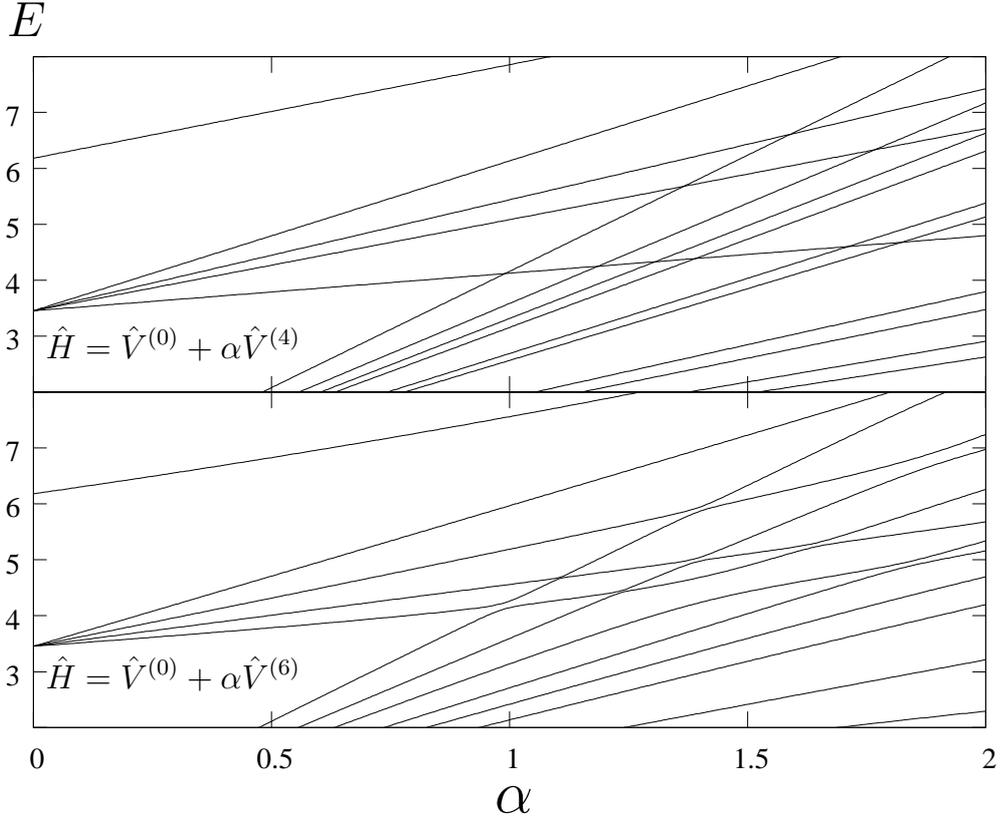


Abbildung 3.1:

Eine allgemeine Wechselwirkung $\hat{V}^{(J)}$ eines h-Bosonensystems bricht die Seniorität. Lediglich $\hat{V}^{(4)}$ erhält die Quantenzahl ν . Um eine Aufspaltung der unterschiedlichen ν -Multiplets zu erreichen wurde auch der Term $\hat{V}^{(0)}$ zu \hat{H} hinzugefügt. Deutlich zu erkennen sind Niveaufkreuzungen in der oberen Grafik und Niveaufabstoßungen in der unteren.

- $\sigma = -1, J > 2$

$$3J^4 + 6J^3 - 6[2j(j+1) - 1]J^2 - 3[4j(j+1) - 1]J + 2j(j+1)(2j+1)(2j+3) = 0 \quad (3.102)$$

Die Tupel $(j, J) = (5/2, 4), (7/2, 4), (7/2, 6)$ erfüllen diese Gleichung. Wie schon im Fall der Bosonen ergab auch hier eine numerische Suche, dass für $j \leq 10^8$ keine weiteren Lösungen existieren.

Da für Bosonen mit $j \leq 5$ und für Fermionen mit $j \leq 13/2$ entweder keine oder genau eine Bedingung existiert, erhalten nach oben ausgeführten Argumenten die für $j \leq 10^8$ gefundenen Wechselwirkungen die Seniorität. In der folgenden Zeile sind alle $\hat{V}_j^{(J)}$, für die $[\hat{V}_j^{(J)}, \hat{C}_2] = 0$ gilt, noch einmal zusammenfassend aufgeführt.

$$\hat{V}_j^{(0)}, \hat{V}_1^{(2)}, \hat{V}_2^{(2)}, \hat{V}_2^{(4)}, \hat{V}_5^{(4)}, \hat{V}_{3/2}^{(2)}, \hat{V}_{5/2}^{(2)}, \hat{V}_{5/2}^{(4)}, \hat{V}_{7/2}^{(2)}, \hat{V}_{7/2}^{(4)}, \hat{V}_{7/2}^{(6)}$$

Bisher nicht bekannt und äußerst überraschend ist, dass $\hat{V}_5^{(4)}$ die Seniorität nicht bricht. Der Hamiltonian eines h-Bosonen Systems bricht im allgemeinen die Quantenzahl ν . Es existiert jedoch genau eine Zweikörperwechselwirkung, die ν erhält. Abbildung 3.1 zeigt die numerische Verifizierung dieses Ergebnisses. Um die Entartung der verschiedenen ν -Multiplets aufzuheben wurde ein konstanter Term $\hat{V}^{(0)}$ zu Hamiltonian hinzugefügt. Der zweite Term ist im oberen Teil

der Abbildung $\hat{V}^{(4)}$ und im unteren Teil $\hat{V}^{(6)}$. Im Übereinstimmung mit den obigen Ergebnissen kreuzen sich Zustände zu unterschiedlicher Seniorität im ersten Fall, während wir in der unteren Abbildung Niveauabstoßungen beobachten.

Mit Gleichung (3.95) lassen sich leicht konkrete Bedingungen aufstellen, die erfüllt sein müssen, damit eine allgemeine Wechselwirkung mit \hat{C}_2 vertauscht und somit die Quantenzahl ν nicht bricht. Im Folgenden sind diese Gleichungen für jeweils die niedrigsten Spins der Bosonen und Fermionen aufgelistet.

$$\begin{aligned}
j = 3 : & 11b_2 - 18b_4 + 7b_6 = 0 \\
j = 4 : & 65b_2 - 30b_4 - 91b_6 + 56b_8 = 0 \\
j = 5 : & 3230b_2 - 2717b_6 - 3978b_8 + 3465b_{10} = 0 \\
j = 6 : & 22610b_2 + 4788b_4 - 8099b_6 - 24106b_8 - 23793b_{10} + 28600b_{12} = 0 \wedge \\
& 90440b_2 + 156807b_4 - 409136b_6 + \\
& 290666b_8 - 275352b_{10} + 146575b_{12} = 0 \\
j = 9/2 : & 65b_2 - 315b_4 + 403b_6 - 153b_8 = 0 \\
j = 11/2 : & 1020b_2 - 3519b_4 + 637b_6 + 4403b_8 - 2541b_{10} = 0 \\
j = 13/2 : & 1615b_2 - 4275b_4 - 1456b_6 + 3196b_8 + 5145b_{10} - 4225b_{12} = 0 \\
j = 15/2 : & 1330b_2 - 2835b_4 - 1807b_6 + 612b_8 + \\
& 3150b_{10} + 3175b_{12} - 3625b_{14} = 0 \wedge \\
& 77805b_2 - 169470b_4 - 85527b_6 - 4743b_8 + \\
& 222768b_{10} + 168025b_{12} - 208858b_{14} = 0
\end{aligned} \tag{3.103}$$

In diesen Gleichungen taucht b_0 nicht auf, da $\hat{V}^{(0)}$ mit \hat{C}_2 vertauscht. Ebenso enthält die Gleichung für $j = 5$ den Term b_4 nicht, was mit obigem Ergebnis übereinstimmt.

3.4.2 Partielle Erhaltung der Seniorität

Neben der Erhaltung der Seniorität für alle Zustände ist es auch denkbar, dass diese Quantenzahl nur für einzelne Zustände gut ist. Der Hamiltonian vertauscht in diesem Fall also nicht mit dem entsprechenden Casimiroperator. Man mag sich fragen, ob solche Fälle überhaupt existieren. Tatsächlich ist dies jedoch der Fall, wie die folgenden Abschnitte zeigen. Zunächst wird ein allgemeines Verfahren entwickelt, um diese Zustände zu finden und die Energie sowie die Wellenfunktion zu ermitteln. Anschließend folgt die konkrete Anwendung am Beispiel von Fermionen mit Spin $j = 9/2$.

Es sei ein Teilchenspin j und feste Teilchenzahl N sowie ein fester Drehimpuls J gegeben. Wir definieren nun Zustände zu diesen gegebenen Quantenzahlen, welche sich durch sukzessives koppeln der Erzeuger ergeben.

$$|j^N, [J_1, J_2, \dots, J_{N-2}], J, M\rangle_u := \left[\left[\left[c^\dagger \times c^\dagger \right]^{(J_1)} \times c^\dagger \right]^{(J_2)} \times \dots \times c^\dagger \right]^{(J_{N-2})} \times c^\dagger \Big]_M^{(J)} |0\rangle \tag{3.104}$$

Die Anzahl der möglichen Kopplungsschemata $[J_1, J_2, \dots, J_{N-2}]$ sei D_1 . Diese D_1 Basisvektoren haben eine definierte Teilchenzahl und einen guten Spin aber keine gute Seniorität. Der Index u deutet an, dass es sich um nicht normierte Zustände handelt. Außerdem ist diese Basis im allgemeinen übervollständig und nicht orthogonal. Die Dimension des Zustandsraumes sei D_2 . Wir wählen nun D_2 Kopplungsschemata derart aus, dass die entsprechenden Zustände linear unabhängig sind. Die so gewonnene Basis ist nicht mehr übervollständig. Ist eine weitere Basis mit Zuständen $|N, \nu, \Delta, J, M\rangle$ (also insbesondere mit guter Seniorität) bekannt (wie diese Zustände explizit berechnen werden können ist in Kapitel 2.7 erklärt), so können wir durch eine

entsprechende Projektion erreichen, dass die Zustände (3.104) eine gute Seniorität ν erhalten.

$$|j^N, [J_1, J_2, \dots, J_{N-2}], \nu, J, M\rangle_u = |j^N, [J_1, J_2, \dots, J_{N-2}], J, M\rangle_u - \sum_{\nu' \neq \nu, \Delta'} \langle N, \nu', \Delta', J, M | j^N, [J_1, J_2, \dots, J_{N-2}], J, M \rangle_u \cdot |N, \nu', \Delta', J, M\rangle \quad (3.105)$$

Wir erhalten auf diese Weise Zustände, die weiterhin nicht normiert und in den durch die Multiplizität aufgespannten Unterräumen (die Dimension dieser Räume sei D_3) nicht notwendigerweise orthogonal sind. Ein beliebiger Zustand mit Seniorität ν kann nach diesen Basisvektoren entwickelt werden. Um die Schreibweise abzukürzen bezeichnen wir das Kopplungsschema nicht mehr mit allen Drehimpulsen sondern benutzen die Abkürzung $\underline{J} := [J_1, J_2, \dots, J_{N-2}]$.

$$|j^N, \underline{\eta}, \nu, J, M\rangle = \sum_{\underline{J}} \eta_{\underline{J}} |j^N, \underline{J}, \nu, J, M\rangle_u \quad (3.106)$$

Dabei läuft die Summe über D_3 unterschiedliche Kombinationen \underline{J} , wobei D_3 genau der Multiplizität entspricht. $\underline{\eta}$ steht für die Entwicklungskoeffizienten $\eta_{\underline{J}}$. Damit dieser Zustand ein Eigenzustand von \hat{H} ist, muss er die Eigenwertgleichung erfüllen.

$$\hat{H} |j^N, \underline{\eta}, \nu, J, M\rangle = E |j^N, \underline{\eta}, \nu, J, M\rangle \quad (3.107)$$

Erhält der Hamiltonian die Seniorität, so kann er immer noch Zustände mit gleichen N , ν und J mischen, aber es lassen sich immer Koeffizienten $\eta_{\underline{J}}$ finden, so dass obige Gleichung gilt. Wir stellen nun ein Gleichungssystem für die Koeffizienten $\eta_{\underline{J}}$ sowie die Energie E auf, indem wir Gleichung (3.107) mit den D_2 Zuständen ${}_u \langle j^N, \underline{J}, \nu, J, M |$ aus Gleichung (3.105) multiplizieren und erhalten daher D_2 Gleichungen. Um die Notation eindeutig zu halten, bezeichnen wir im Folgenden die Seniorität des Eigenzustands mit ν_e .

$${}_u \langle j^N, \underline{J}, \nu, J, M | \hat{H} |j^N, \underline{\eta}, \nu_e, J, M\rangle = E \cdot {}_u \langle j^N, \underline{J}, \nu, J, M | j^N, \underline{\eta}, \nu_e, J, M\rangle \quad (3.108)$$

Jetzt benutzen wir Gleichung (3.106) und bezeichnen die entsprechenden Kopplungsschemata mit \underline{I} .

$$\sum_{\underline{I}} \eta_{\underline{I}} {}_u \langle j^N, \underline{J}, \nu, J, M | \hat{H} |j^N, \underline{I}, \nu_e, J, M\rangle_u = E \sum_{\underline{I}} \eta_{\underline{I}} {}_u \langle j^N, \underline{J}, \nu, J, M | j^N, \underline{I}, \nu_e, J, M\rangle_u \quad (3.109)$$

Für $\nu \neq \nu_e$ ist die rechte Seite der Gleichung Null. Zusätzlich zu obigen D_2 Gleichungen existiert aus Normierungsgründen folgende Bedingung:

$$\sum_{\underline{I}} \eta_{\underline{I}}^2 = \frac{1}{\sqrt{\sum_{\underline{J}} {}_u \langle j^N, \underline{J}, \nu, J, M | j^N, \underline{J}, \nu, J, M \rangle_u^2}} \quad (3.110)$$

Die Gleichungen (3.109) und (3.110) definieren somit ein Gleichungssystem bestehend aus $D_2 + 1$ Gleichungen und $D_3 + 1$ Variablen (die D_3 Koeffizienten $\eta_{\underline{I}}$ sowie die Energie E). Es gilt immer $D_2 \geq D_3$. Gleichheit tritt ein, falls zu gegebenem N und J lediglich eine Seniorität existiert. Da in diesem Fall die Seniorität aber immer erhalten sein muss, gilt für alle interessanten Fälle $D_2 > D_3$. Somit besteht das Gleichungssystem aus mehr Gleichungen als Variablen und ist im allgemeinen nicht lösbar. Die Lösbarkeit zu gegebenem j , N , ν_e und J entscheidet darüber, ob und wieviele Zustände mit guter Seniorität existieren. Da die Seniorität die letzte fehlende Quantenzahl für Systeme identischer Teilchen ist, sind diese Zustände dann auch lösbar. Obiges Gleichungssystem liefert dann die Wellenfunktion sowie die Energie.

Ein numerisches Lösen für einen gegebenen Satz von Quantenzahlen liefert wie schon das Verfahren zur Berechnung der CFP's aus Kapitel 2.7 Ergebnisse ohne numerischen Fehler in der Darstellung $\pm \sqrt{n_1/n_2}$. Eine allgemeine symbolische Lösung für allgemeines j , N , ν und J ist nicht mit vertretbarem Aufwand zu erhalten. Schon das Finden der D_2 Kopplungsschemata,

welche zu linear unabhängigen Zuständen führen, ist für den allgemeinen Fall sehr schwer. Für den Fall $N = 4$ ist es jedoch möglich obiges Verfahren konkret auszuarbeiten. Dies wird im folgenden Abschnitt diskutiert, im darauf folgenden werden einige weitere Fälle von partieller Erhaltung der Seniorität für $N > 4$ vorgestellt, welche allerdings rein numerisch gefunden wurden.

3.4.2.1 Der Vier-Teilchen-Fall

Der Vier-Teilchen-Fall ist besonders interessant, da für die Matrixelemente sowie Skalarprodukte aus Gleichung (3.109) geschlossene Ausdrücke bekannt sind. Es handelt sich hierbei um das Vier-Teilchen-CFP-Problem. Wir definieren die nicht normierten Vierteilchenzustände mittels eines Kopplungsschemas, bei dem erst Teilchen eins und zwei zu J_1 sowie Teilchen drei und vier zu J_2 gekoppelt werden. Danach wird J_1 mit J_2 zu J gekoppelt.

$$|j^4, [J_1, J_2], J, M\rangle_u = [[c^\dagger \times c^\dagger]^{(J_1)} \times [c^\dagger \times c^\dagger]^{(J_2)}]_M^{(J)} |0\rangle \quad (3.111)$$

Da es sich um identische Teilchen handelt, sind für J_1 und J_2 nur gerade Werte erlaubt. Benutzt man diese Zustände, so sind die Skalarprodukte und Matrixelemente durch die Vier-zu-zwei-Teilchen-CFP's gegeben. Wir definieren also einen nicht normierten CFP.

$$[j^2(J_1)j^2(J_2); J]j^4[J_3, J_4]J]_u := \left(\delta_{J_1, J_3} \delta_{J_2, J_4} + (-)^J \delta_{J_1, J_4} \delta_{J_2, J_3} + 4(-)^{2j} \begin{bmatrix} j & j & J_1 \\ j & j & J_2 \\ J_3 & J_4 & J \end{bmatrix} \right) \quad (3.112)$$

Dann gilt für die zu berechnenden Skalarprodukte eine einfache Gleichung.

$${}_u \langle j^4, [J_1, J_2], J, M | j^4, [J_3, J_4], J, M \rangle_u = 4 [j^2(J_1)j^2(J_2); J]j^4[J_3, J_4]J]_u \quad (3.113)$$

Die Matrixelemente einer Zweiteilchenwechselwirkung können ebenfalls durch die CFPs aus Gleichung (3.112) ausgedrückt werden, allerdings haben wir es hier mit einer Summe zu tun, die im Allgemeinen nicht weiter vereinfacht werden kann.

$${}_u \langle j^4, [J_1, J_2], J, M | \hat{V}^{(\lambda)} | j^4, [J_3, J_4], J, M \rangle_u = \frac{8}{\sqrt{2\lambda+1}} \sum_I [j^2(J_3)j^2(J_4); J]j^4[\lambda, I]J]_u \cdot [j^2(\lambda)j^2(I); J]j^4[J_1, J_2]J]_u \quad (3.114)$$

Obwohl wir diese geschlossenen Ausdrücke für den Vier-Teilchen-Fall zur Verfügung haben, ist eine symbolische allgemeine Lösung des Gleichungssystems (3.109) für allgemeines j und J schwer zu erhalten. Für gegebenes j und J hingegen ist es einfach, eine Lösung (falls existent) zu finden. Insbesondere existiert eine Lösung für $j = 9/2$ und $J = 4, 6$ [39, 40]. Diese Lösung ist identisch für jede beliebige Wechselwirkung $\hat{V}^{(J)}$ und damit für einen allgemeinen Hamiltonian \hat{H} . Wir verifizieren damit die Entdeckung von A. Escuderos und L. Zamick [41]. Sie stellten fest, dass zwei Zustände $|j^4, \nu = 4, J = 4\rangle$ und $|j^4, \nu = 4, J = 6\rangle$ existieren, für welche die Seniorität exakt erhalten ist und zwar für eine beliebige Wechselwirkung. Das Lösen von (3.109) erlaubt das explizite Angeben der Wellenfunktion dieser beiden Zustände.

$$|(9/2)^4, \nu = 4, J = 4\rangle = \sqrt{\frac{2363}{1570}} |(9/2)^4[2, 2], \nu = 4, J = 4\rangle - \sqrt{\frac{65}{5338}} |(9/2)^4[2, 4], \nu = 4, J = 4\rangle \quad (3.115)$$

$$|(9/2)^4, \nu = 4, J = 6\rangle = \sqrt{\frac{1620896}{635341}} |(9/2)^4[2, 4], \nu = 4, J = 6\rangle - \sqrt{\frac{5725}{635341}} |(9/2)^4[4, 4], \nu = 4, J = 6\rangle \quad (3.116)$$

Diese Zustände sind normiert aber entwickelt nach einer nicht normierten und nicht orthogonalen Basis. Indem wir das Gleichungssystem für jede Wechselwirkung $\hat{V}^{(J)}$ einzeln lösen, erhalten wir auch die entsprechenden Energien E_J . Damit können wir eine allgemeine Formel für die Energien von $\hat{H} = A\hat{n}_0 + \sum_J a_J \hat{V}^{(J)}$ ableiten.

$$E((9/2)^4, \nu = 4, J = 4) = \frac{4}{\sqrt{10}}A - \frac{136}{33\sqrt{5}}a_2 - \frac{2}{3}a_4 - \frac{26}{15\sqrt{13}}a_6 - \frac{228}{55\sqrt{17}}a_8 \quad (3.117)$$

$$E((9/2)^4, \nu = 4, J = 6) = \frac{4}{\sqrt{10}}A - \frac{38}{11\sqrt{5}}a_2 - \frac{24}{39}a_4 - \frac{2}{\sqrt{13}}a_6 - \frac{672}{143\sqrt{17}}a_8 \quad (3.118)$$

Obige Ausdrücke geben die absolute Energie an, da der Grundzustand nicht bekannt ist. Diese Formeln wurden mit dem in Kapitel 2 beschriebenen Computerprogramm numerisch überprüft, indem mehrere zufällig gewählte Hamiltonians diagonalisiert wurden. Einer dieser Hamiltonians ist

$$\hat{H} = 0.5\hat{n}_0 + 0.4\hat{V}^{(0)} + 0.3\hat{V}^{(2)} + 0.1\hat{V}^{(4)} + 0.7\hat{V}^{(6)} + 0.2\hat{V}^{(8)} \quad (3.119)$$

Das Programm liefert als Ergebnis folgende Ausgabe für $J = 4$:

```
Basis of calculation 1 :
|0> = |4,2,0,8/2>(8/2)
|1> = |4,4,0,8/2>(8/2)
|2> = |4,4,1,8/2>(8/2)
Eigenvalues for J = 8/2 ; P = 1 ; (3 of 3) :
-1.365115 -0.524732 -0.470124
Eigenvectors for J = 8/2 ; P = 1 ; (3 of 3) :
|0> = 8.738702e-01 -4.638480e-01 1.455883e-01
|1> = 1.659334e-14 2.994661e-01 9.541069e-01
|2> = 4.861594e-01 8.337656e-01 -2.616945e-01
```

Wie zu erkennen ist, mischt der zweite Eigenzustand nur mit den beiden $\nu = 4$ -Basiszuständen. Der Koeffizient bezüglich des anderen Basiszustandes ist aufgrund des numerischen Fehlers als Null anzusehen. Die Energie von -0.524732 ist exakt die vorhergesagte. Die Ausgabe für $J = 6$ stimmt ebenfalls innerhalb des numerischen Fehlers mit der Vorhersage überein.

```
Basis of calculation 1 :
|0> = |4,2,0,12/2>(12/2)
|1> = |4,4,0,12/2>(12/2)
|2> = |4,4,1,12/2>(12/2)
Eigenvalues for J = 12/2 ; P = 1 ; (3 of 3) :
-1.072660 -0.508799 -0.343679
Eigenvectors for J = 12/2 ; P = 1 ; (3 of 3) :
|0> = 7.621360e-01 -2.479829e-01 -5.980411e-01
|1> = 1.452344e-16 9.237341e-01 -3.830343e-01
|2> = 6.474169e-01 2.919242e-01 7.040111e-01
```

Es existieren mehrere Kernregionen, für welche die dominanten Proton- oder Neutronkonfigurationen $(9/2)^4$ entsprechen (die entsprechenden Schalen sind $1g_{9/2}$ und $1h_{9/2}$). Die Kerne ^{94}Ru ($Z = 44$) und ^{96}Pd ($Z = 46$) sind in diesem Zusammenhang von Interesse, denn sie weisen vier Protonen-Teilchen bzw. -Löcher in der $1g_{9/2}$ -Schale auf und die Neutronen bilden eine geschlossene Konfiguration mit $N = 50$. Für beide Isotope sind die Yrastzustände 2_1^+ , 4_1^+ , 6_1^+ und 8_1^+ bekannt. Die beiden lösaren Zustände mit $J = 4$ bzw. $J = 6$ liegen für alle physikalisch sinnvollen Wechselwirkungen einige hundert keV über den Zuständen der Yrastbande mit $J = 4$ bzw. $J = 6$ [40]. Es handelt sich bei diesen Zustände mit $\nu = 4$ also um die jeweils zweiten Zustände des entsprechenden Drehimpulses 4_2^+ und 6_2^+ . Abbildung 3.2 zeigt einen Vergleich zwischen Theorie und Experiment. Da für beide Kerne die entsprechenden Zustände nicht bekannt sind, liefert diese Abbildung einen Hinweis darauf, in welchem Energiebereich eine Suche

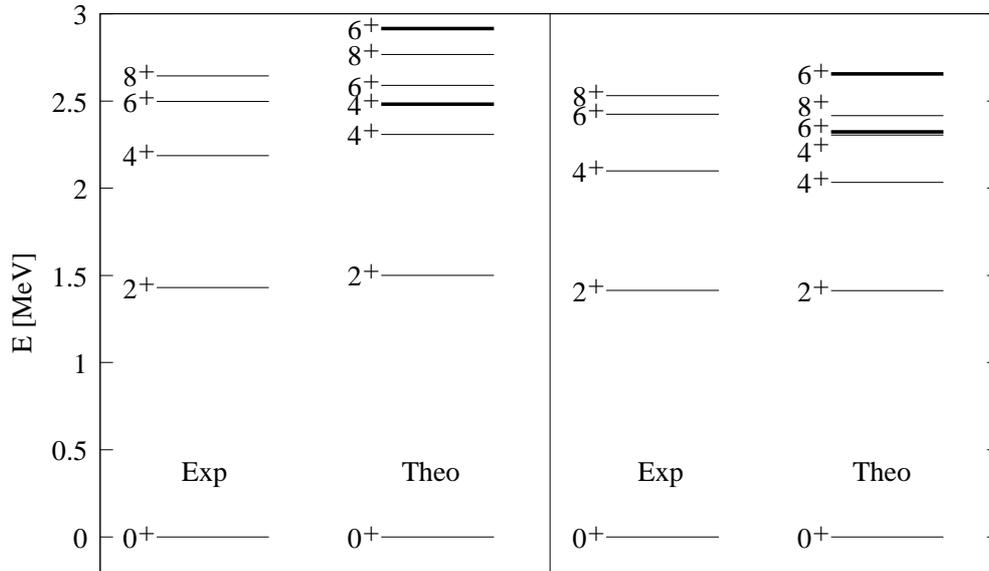


Abbildung 3.2:

Experimentelle und theoretische Energien von ^{94}Ru und ^{96}Pd . Die Spektren wurden mittels Wechselwirkungen berechnet, welche von ^{92}Mo und ^{98}Cd abgeleitet wurden und die Seniorität brechen. Die beiden lösaren Zustände sind jeweils durch dicke Linien gekennzeichnet.

stattfinden sollte. Ein hierzu durchgeführtes Experiment an ^{94}Ru von W. J. Mills konnte kein eindeutiges Ergebnis liefern [42]. Daher wird die Reaktion $^{92}\text{Mo}(\alpha, 2n)^{94}\text{Ru}$ zur Durchführung am Kölner Tandembeschleuniger vorgeschlagen.

Wir sind also zu dem bemerkenswerten Ergebnis gelangt, dass in einer $(9/2)^4$ -Konfiguration immer die beiden Zustände $|j^4, \nu = 4, J = 4\rangle$ und $|j^4, \nu = 4, J = 6\rangle$ existieren, welche gute Seniorität besitzen und exakt lösbar sind und zwar *unabhängig von der Wechselwirkung*. Betrachten wir alle Zustände für identische Fermionen in Form von Quantenzahlen der Reihe nach beginnend mit dem niedrigsten Teilchenspin, so sehen wir, dass die obigen Zustände die ersten sind, für welche die Multiplizitätsquantenzahl Δ Werte größer Null annehmen kann. Ob hier ein Zusammenhang besteht, ist bisher nicht geklärt. Es ist ebenfalls bemerkenswert, dass die Energie von den Parametern A und a_J abhängt, aber nicht die Wellenfunktion, sie ist für alle Hamiltonians die gleiche. Dies ist analog zum Fall der dynamischen Symmetrie. Wir erhielten dieses Ergebnis durch das Aufstellen eines Gleichungssystems für die Koeffizienten der Wellenfunktion sowie der Energie mit Hilfe des J -Schemas. Für oben genannte Zustände ist das Gleichungssystem lösbar und liefert die Wellenfunktion sowie die Energie. Eine Erklärung in dem Sinne, das wir wirklich verstehen warum diese Zustände lösbar sind, ist damit leider nicht gegeben. Ein weiteres Rätsel besteht darin, dass $j = 9/2$ -Fermionen die bisher einzigen Teilchen sind, für die bei $N = 4$ die hier diskutierte Art der partiellen dynamischen Symmetrie gefunden wurde. Eine entsprechende Suche brachte keine weiteren solcher Zustände für $j = 11/2, 13/2, 15/2$ und auch nicht für Bosonen mit $j = 3, 4, 5, 6$. Lediglich für $N > 4$ wurden Beispiele entdeckt (siehe hierzu Kapitel 3.4.2.2).

3.4.2.2 Numerische Beispiele für $N > 4$

Die in diesem Abschnitt vorgestellten Beispiele für die partielle Erhaltung der Seniorität wurden numerisch gefunden. Es wurde auf eine sicherlich sehr aufwendige Implementierung eines Programms verzichtet, welches für den allgemeinen Fall das Gleichungssystem (3.109) aufzu-

stellen vermag. Ein wesentlich einfacherer (wenn auch weniger eleganter) Weg besteht darin, zufällige Hamiltonians zu wählen und für gegebenes j und N für alle möglichen Spins J zu diagonalisieren. Die Hamiltonians sollen hierbei die Seniorität im Allgemeinen brechen, also Gleichung (3.95) verletzen. Durch sorgfältiges Anschauen der Wellenfunktion können wir dann (falls vorhanden) einzelne Zustände mit guter Seniorität entdecken.

3.4.2.2.1 Bosonen Es wurden bosonische Systeme mit den Teilchenspins $j = 3, 4, 5, 6$ untersucht. Für die Spins $j = 4, 5, 6$ wurden keine Zustände gefunden, die bei einer beliebigen Wechselwirkung lösbar sind. Folgende Teilchenzahlen und Drehimpulse wurden untersucht: ($j = 4, N \leq 8, J \leq 15$), ($j = 5, N \leq 7, J \leq 10$) und ($j = 6, N \leq 5, J \leq 10$). Interessant ist jedoch das f-Bosonen-System, denn hier existieren gleich mehrere Zustände, die für einen (fast) beliebigen Hamiltonian lösbar sind. Wir geben exemplarisch zwei Zustände an, es existieren aber noch einige (falls N nicht beschränkt ist evtl. sogar unendlich viele) weitere.

3.4.2.2.1.1 $j = 3, N = 6, J = 12$: Für

$$\hat{H} = 0.3\hat{N}_0 + 0.1\hat{V}^{(0)} + 1.0\hat{V}^{(2)} + 0.9\hat{V}^{(4)} + 0.7\hat{V}^{(6)} \quad (3.120)$$

ergibt die numerische Rechnung:

Basis of calculation 1 :

$$|0\rangle = |6, 4, 0, 24/2\rangle(24/2)$$

$$|1\rangle = |6, 6, 0, 24/2\rangle(24/2)$$

$$|2\rangle = |6, 6, 1, 24/2\rangle(24/2)$$

$$|3\rangle = |6, 6, 2, 24/2\rangle(24/2)$$

Eigenvalues for J = 24/2 ; P = 1 ; (4 of 4) :

7.252733 8.294599 8.500442 8.766038

Eigenvectors for J = 24/2 ; P = 1 ; (4 of 4) :

$$|0\rangle = 9.825261e-01 \ 1.599715e-01 \ 9.490416e-02 \ -6.696906e-03$$

$$|1\rangle = -8.911526e-16 \ -1.668351e-01 \ 3.463608e-01 \ 9.231469e-01$$

$$|2\rangle = -1.545970e-01 \ 4.323635e-01 \ 8.546065e-01 \ -2.425061e-01$$

$$|3\rangle = -1.036450e-01 \ 8.715716e-01 \ -3.750668e-01 \ 2.982376e-01$$

Auch hier ist die Wellenfunktion wieder unabhängig von \hat{H} . Indem wir die einzelnen Wechselwirkungen einzeln als Hamiltonian verwenden, können wir eine explizite Formel für die Energie des lösbaren Zustands erhalten.

$$E(f^6, \nu = 6, J = 12) = \frac{6}{\sqrt{7}}A + \frac{62}{11}a_4 + \frac{144}{11\sqrt{13}}a_6 \quad (3.121)$$

Diese Gleichung gilt nicht wenn der Hamiltonian keinen Term $\hat{V}^{(0)}$ enthält, denn dann mischen alle Zustände.

3.4.2.2.1.2 $j = 3, N = 7, J = 15$: Dieses Beispiel ist dem vorherigen sehr ähnlich. Für den gleichen Hamiltonian wie obigen im Beispiel erhalten wir:

Basis of calculation 1 :

$$|0\rangle = |7, 5, 0, 30/2\rangle(30/2)$$

$$|1\rangle = |7, 7, 0, 30/2\rangle(30/2)$$

$$|2\rangle = |7, 7, 1, 30/2\rangle(30/2)$$

$$|3\rangle = |7, 7, 2, 30/2\rangle(30/2)$$

Eigenvalues for J = 30/2 ; P = 1 ; (4 of 4) :

9.946019 11.084163 11.294510 11.611189

Eigenvectors for J = 30/2 ; P = 1 ; (4 of 4) :

$$|0\rangle = 9.801526e-01 \ 1.743240e-01 \ 9.421839e-02 \ -5.908809e-03$$

```

|1> = -3.477504e-14 -1.100106e-01 2.636434e-01 9.583266e-01
|2> = -1.615110e-01 4.335193e-01 8.662698e-01 -1.885522e-01
|3> = -1.149568e-01 8.772513e-01 -4.137532e-01 2.145305e-01

```

Die explizite Formel für die Energie lautet:

$$E(f^7, \nu = 7, J = 15) = \frac{1}{\sqrt{7}}A + \frac{74}{11}a_4 + \frac{240}{11\sqrt{13}}a_6 \quad (3.122)$$

Auch in diesem Fall muss \hat{H} den Term $\hat{V}^{(0)}$ enthalten, weil sonst alle Zustände mischen und obige Gleichung nicht gilt.

3.4.2.2.2 Fermionen Fermionische Systeme mit den Teilchenspins $j = 9/2, 11/2, 13/2$ und $j = 15/2$ wurden auf partielle Erhaltung der Seniorität hin numerisch untersucht. Diese Suche zeigte, dass lediglich für die Teilchenzahl $N = (2j + 1)/2 = n/2$ die hier betrachteten Zustände existieren. Es handelt sich also um so etwas wie eine halb gefüllte Schale. Aufgrund der Teilchen-Loch-Symmetrie ist daher Vorsicht geboten. Wir beschränken uns hier auf eines von vielen Beispielen und geben das Ergebnis einer Rechnung für $j = (9/2)$, $N = 5$ und $J = 9/2$ an.

Basis of calculation 1 :

```

|0> = |5,1,0,9/2>(9/2)
|1> = |5,3,0,9/2>(9/2)
|2> = |5,5,0,9/2>(9/2)

```

Doing the normal calculations ..

Eigenvalues for J = 9/2 ; P = 1 ; (3 of 3) :

```
-2.726281 -2.431639 -1.906943
```

Eigenvectors for J = 9/2 ; P = 1 ; (3 of 3) :

```

|0> = -2.807627e-01 0.000000e+00 9.597772e-01
|1> = 0.000000e+00 1.000000e+00 0.000000e+00
|2> = 9.597772e-01 0.000000e+00 2.807627e-01

```

Es handelt sich um einen anderen Fall von partiellen dynamischen Symmetrien, als die in den Kapiteln 3.4.2.1 und 3.4.2.2.1 diskutierten. Die Wellenfunktionen der entsprechenden Zustände aus den genannten Kapiteln ist konstant für alle Hamiltonians. Dies ist hier nicht der Fall. Es handelt sich hier in der Tat um eine Symmetrie, welche bei der halb gefüllten Schale auftritt. Wie in [43] im Detail erklärt wird, kann eine Zweiteilchenwechselwirkung zwei Zustände mit Senioritäten ν_1 und ν_2 nur dann mischen, falls gilt $|\nu_1 - \nu_2| = 4, 8, \dots$. Dies erklärt alle numerisch gefundenen Fälle.

3.4.3 Brechung der Seniorität nach einem Muster

Bei Systemen identischer Fermionen treten Fälle auf, bei denen die Seniorität nach einem Muster gebrochen ist. Das bedeutet, das z.B. Zustände mit Seniorität $\nu_1 = 1$ mit $\nu_2 = 3$ -Zuständen nicht mischen dies mit anderen Senioritäten aber wiederum der Fall ist. Solche Beispiele wurden (wie schon die aus Kapitel 3.4.2.2.2) nur für $N = n/2$ also für die halb gefüllte Schale gefunden. Wir geben hier ein Beispiel mit $j = 13/2$, $N = 7$ und $J = 13/2$ mit einem zufällig gewählten \hat{H} an. Aus Gründen der Übersichtlichkeit ist die Wellenfunktion nur schematisch angegeben. Ein 'X' steht dabei für einen Koeffizienten ungleich Null.

Basis of calculation 1 :

```

|0> = |7,1,0,13/2>(13/2)
|1> = |7,3,0,13/2>(13/2)
|2> = |7,5,0,13/2>(13/2)
|3> = |7,5,1,13/2>(13/2)
|4> = |7,5,2,13/2>(13/2)
|5> = |7,5,3,13/2>(13/2)

```

$|6\rangle = |7,5,4,13/2\rangle(13/2)$
 $|7\rangle = |7,5,5,13/2\rangle(13/2)$
 $|8\rangle = |7,7,0,13/2\rangle(13/2)$
 $|9\rangle = |7,7,1,13/2\rangle(13/2)$
 $|10\rangle = |7,7,2,13/2\rangle(13/2)$
 $|11\rangle = |7,7,3,13/2\rangle(13/2)$
 $|12\rangle = |7,7,4,13/2\rangle(13/2)$

Eigenvalues for $J = 13/2$; $P = 1$; (13 of 13) :

-4.332304 -3.890681 -3.738455 -3.505388 -3.405687 -3.133024 -3.080977
 -3.053066 -2.936514 -2.934772 -2.631568 -2.585883 -2.394759

Eigenvectors for $J = 13/2$; $P = 1$; (13 of 13) :

$|0\rangle = 0\ X\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0\ X\ X\ X\ X\ X$
 $|1\rangle = X\ 0\ X\ X\ X\ X\ X\ X\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0$
 $|2\rangle = X\ 0\ X\ X\ X\ X\ X\ X\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0$
 $|3\rangle = 0\ X\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0\ X\ X\ X\ X\ X$
 $|4\rangle = 0\ X\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0\ X\ X\ X\ X\ X$
 $|5\rangle = X\ 0\ X\ X\ X\ X\ X\ X\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0$
 $|6\rangle = X\ 0\ X\ X\ X\ X\ X\ X\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0$
 $|7\rangle = 0\ X\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0\ X\ X\ X\ X\ X$
 $|8\rangle = X\ 0\ X\ X\ X\ X\ X\ X\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0$
 $|9\rangle = 0\ X\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0\ X\ X\ X\ X\ X$
 $|10\rangle = X\ 0\ X\ X\ X\ X\ X\ X\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0$
 $|11\rangle = 0\ X\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0\ X\ X\ X\ X\ X$
 $|12\rangle = X\ 0\ X\ X\ X\ X\ X\ X\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0$

Das auftretende Muster bei den Koeffizienten lässt sich wiederum mit der Auswahlregel $|\nu_1 - \nu_2| = 4, 8, \dots$ für die halb gefüllte Schale erklären. Die Tatsache, dass dies rein numerisch gefunden wurde, kann als exzellenter Test für den numerischen Programmcode angesehen werden.

3.5 Bose-Einstein-Kondensate

Als eine Anwendung für Modelle identischer Bosonen betrachten wir hier Grundzustandsphasenübergänge von Bose-Einstein-Kondensaten. Im Folgenden wird das Phasendiagramm für den allgemeinen Fall (beliebiger Spin j) aufgestellt. Als Voraussetzung wird jedoch angenommen, dass das System in einer dynamischen Symmetrie vorliegt. Ein System aus eingefangenen identischen Atomen mit ganzzahligem Hyperfeinspin j kann unter entsprechenden Näherungen als ein System identischer Bosonen mit Spin j beschrieben werden [44, 45]. Der Hamiltonian nimmt also die bekannte Form an.

$$\hat{H}_g = A \cdot \hat{n}_0 + \sum_{J \text{ gerade}} a_J \cdot \hat{V}^{(J)} \quad (3.123)$$

Je nachdem um welchen Spin j es sich handelt, müssen die Bedingungen (3.25) erfüllt sein, damit das System als dynamische Symmetrie vorliegt. Ist dies der Fall, so kann in die Casimirform

$$\hat{H}_C = \alpha_1 \hat{C}_1[U(2j+1)] + \alpha_2 \hat{C}_2[U(2j+1)] + \beta \hat{C}_2[SO(2j+1)] + \gamma \hat{C}_2[SO(3)] \quad (3.124)$$

umparameterisiert werden und die Energien sind durch

$$E(N, \nu, J) = \alpha_1 N + \alpha_2 N(N+2j) + \beta \nu(\nu+2j-1) + \gamma J(J+1) \quad (3.125)$$

gegeben. Diese Gleichungen gelten ebenso wie folgende Diskussion für $j \geq 2$. Die Struktur des Grundzustandes ist unabhängig von α_1 und α_2 , denn die entsprechenden Casimiroperatoren geben für festes N lediglich einen konstanten Beitrag zu der Energie aller Zustände. Das gesuchte Phasendiagramm ist also zweidimensional. Das Problem reduziert sich damit auf das Finden desjenigen Satzes von Quantenzahlen (ν, J) für welche die Funktion

$$E(\nu, J) = \beta \nu(\nu+2j-1) + \gamma J(J+1) \quad (3.126)$$

für gegebenes β und γ minimal wird. Die Menge der möglichen Paare (ν, J) ist durch j, N sowie den entsprechenden Verzweigungsregeln für $U(2j+1) \supset SO(2j+1)$ und $SO(2j+1) \supset SO(3)$ festgelegt. Die erste dieser Regeln lautet

$$[N] \rightarrow (N), (N-2), (N-4), \dots, 0 \text{ oder } 1 \quad (3.127)$$

Die Verzweigungsregel für $SO(2j+1) \supset SO(3)$ ist zwar allgemein bekannt jedoch sehr kompliziert [46], was die Analyse erschwert. Das Problem sei entsprechend den Werten von β und γ in mehrere Fälle unterteilt.

- $\beta = 0 \quad \wedge \quad \gamma = 0$: Dieser Fall ist trivial.
- $\beta > 0 \quad \wedge \quad \gamma = 0$: Die Seniorität muss minimal sein. Der Grundzustand ist also eine Mischung aus allen Zuständen mit $\nu = 0$ für gerades N und eine Mischung aus allen Zuständen mit $\nu = 1$ für ungerades N . Da es jedoch sowohl für $\nu = 0$ als auch für $\nu = 1$ nur einen Zustand gibt, sind die beiden Grundzustände $(\nu = 0, J = 0)$ und $(\nu = 1, J = j)$.
- $\beta < 0 \quad \wedge \quad \gamma = 0$: Die Seniorität muss maximiert werden. Unabhängig von der Teilchenzahl existiert mindestens ein Zustand mit Seniorität $\nu = N$. Der Grundzustand ist eine Mischung aus allen Zuständen mit maximaler Seniorität und beliebigem Spin J also aus allen Zuständen mit $(\nu = N, J)$.
- $\beta = 0 \quad \wedge \quad \gamma > 0$: Der Drehimpuls muss so klein wie möglich sein. Der Grundzustand ist also eine Mischung aus allen Zuständen mit $J = 0$. Für kleine Teilchenzahlen existiert ein solcher Zustand evtl. nicht. Hier sind aber nur große N von Interesse.
- $\beta = 0 \quad \wedge \quad \gamma < 0$: Die Quantenzahl J muss in diesem Fall maximiert werden. Unabhängig von der Teilchenzahl existiert genau ein Zustand mit $(\nu = N, J = j \cdot N)$, welcher in diesem Fall der Grundzustand ist.
- $\beta < 0 \quad \wedge \quad \gamma < 0$: Beide Quantenzahlen müssen maximal werden. Der Grundzustand ist also gleich dem eindeutigen Zustand mit den Quantenzahlen $(N, j \cdot N)$.
- $\beta > 0 \quad \wedge \quad \gamma > 0$: Es muss sowohl die Seniorität als auch der Drehimpuls minimiert werden. Hier müssen zwei Fälle unterschieden werden.
 - N gerade : Bei geradzahligem Teilchen existiert genau ein Zustand, für den alle Teilchen in zum Drehimpuls $J = 0$ gekoppelten Paaren vorliegen. Also gilt für den Grundzustand $(\nu, J) = (0, 0)$.
 - N ungerade : In diesem Fall gibt es keinen Zustand mit Seniorität Null. Die niedrigstmögliche Seniorität ist $\nu = 1$ und der zugehörige Zustand hat den Drehimpuls $J = j$. Wie in Abschnitt C.4.1 gezeigt, existiert für geradzahliges $j > 1$ der eindeutige Zustand mit $(\nu = 3, J = 0)$. Für ungerades $j > 1$ existiert stattdessen $(\nu = 3, J = 1)$. Somit hat der Grundzustand entweder die Quantenzahlen $(\nu = 1, J = j)$ oder $(\nu = 3, J = 0)$ bzw. $(\nu = 3, J = 1)$. Ob $\nu = 1$ oder $\nu = 3$ energetisch günstiger ist, entscheidet sich nach dem Verhältnis von β und γ .
 - * j gerade : Die Phasen $(1, j)$ und $(3, 0)$ sind durch eine Linie voneinander getrennt, welche sich durch Gleichsetzen der Energien ergibt.

$$\beta = \frac{j(j+1)}{2(2j+3)}\gamma \quad (3.128)$$

- * j ungerade : Die Trennlinie der Phasen $(1, j)$ und $(3, 1)$ kann analog zum Fall „ j gerade“ berechnet werden.

$$\beta = \frac{j(j+1)-2}{2(2j+3)}\gamma \quad (3.129)$$

- $\beta > 0 \wedge \gamma < 0$: Die Seniorität muss minimiert werden und gleichzeitig muss der Spin so groß wie möglich sein. Für eine gegebene Seniorität ν ist der höchstmögliche Drehimpuls durch $J = j \cdot \nu$ gegeben. Die Struktur des Grundzustandes besteht also aus $(N - \nu)/2$ zu Null gekoppelten Paaren sowie ν Teilchen, die zum Spin $J = j \cdot \nu$ gekoppelt sind.

$$|N, \nu, J = j \cdot \nu, M = J\rangle \propto \left([b^\dagger \times b^\dagger]_0^{(0)} \right)^{\frac{N-\nu}{2}} \left(b_j^\dagger \right)^\nu |0\rangle \quad (3.130)$$

In Abhängigkeit vom Verhältnis der Koeffizienten β und γ ist ein Term $[b^\dagger \times b^\dagger]_0^{(0)}$ energetisch günstiger als $(b_j^\dagger)^2$.

- N gerade : Für den Grundzustand gilt entweder $(\nu, J) = (0, 0)$ oder $(\nu, J) = (N, j \cdot N)$. Durch Gleichsetzen der Energien beider Konfigurationen folgt die Trennlinie beider Phasen

$$\beta = -\frac{2N(2N+1)}{N(N+2j-1)}\gamma \quad (3.131)$$

- N ungerade : In diesem Fall bleibt immer mindestens ein ungepaartes Boson übrig, so dass die beiden möglichen Grundzustandskonfigurationen $(\nu, J) = (1, j), (N, j \cdot N)$ existieren. Die Trennlinie folgt wieder durch Gleichsetzen der Energien.

$$\beta = -\frac{2N(2N+1) - j(j+1)}{(N+2j)(N-1)}\gamma \quad (3.132)$$

In beiden Fällen gilt $\beta = -4\gamma$ für $N \rightarrow \infty$.

- $\beta < 0 \wedge \gamma > 0$: Die Seniorität muss möglichst groß sein, während der Drehimpuls klein gehalten werden muss. Die allgemeine Analyse dieses Falles ist sehr kompliziert, da die bei der Reduktion $SO(2j+1) \supset SO(3)$ auftretenden Multiplizitäten nur für $j = 2, 3$ in geschlossener Form bekannt sind. Für $j > 3$ ist lediglich ein rekursiver Ausdruck gegeben [46]. Es existieren abhängig von j kleine Teilchenzahlen, für welche ein Zustand mit $(\nu = N, J = 0)$ nicht existiert (z.B. $j = 3$ und $N = 5$). Numerische Studien hierzu legen jedoch nahe anzunehmen, dass für $j > 2$ und $N > 17$ immer mindestens ein Zustand mit den Quantenzahlen $(N, 0)$ existiert (siehe Kapitel C.4.4). Für $j > 2$ und $N > 17$ ist der Grundzustand also eine Mischung aus allen möglichen Zuständen mit $(\nu, J) = (N, 0)$ (für $j = 2$ siehe [45]).

Aus obigen Argumenten folgt, dass für eine allgemeine Analyse der Grundzustandsquantenzahlen eines Systems aus identischen Bosonen mit beliebigem Spin j mehrere Fälle unterschieden werden müssen. Die drei Fälle $j = 0, 1, 2$ müssen separat behandelt werden. Für $j > 2$ sind N gerade und N ungerade zu unterscheiden, wobei beim letztgenannten Fall wiederum j gerade und j ungerade separat behandelt werden müssen. Für eine lückenlose Analyse müssen für $\beta < 0$ und $\gamma > 0$ zusätzlich die Fälle $N \leq 17$ betrachtet werden. Der Fall $j = 0$ ist trivial und eine Analyse für $j = 1$ findet sich in [44]. Da das vollständige Phasendiagramm für $j = 2$ in [45] diskutiert wurde, gilt hier die Beschränkung $j > 2$. Da sich dieses Kapitel auf Bose-Einstein-Kondensate bezieht, wird auch $N \leq 17$ nicht weiter behandelt. Abbildung 3.3 zeigt die Phasendiagramme der verbleibenden drei Situationen. Die unterschiedlichen Phasen sind durch römische Zahlen gekennzeichnet. Es ist nicht erstaunlich, dass für gerades und ungerades j ein etwas anderes Phasendiagramm existiert. Die Anzahl der Phasen sind gleich und die Trennlinien stimmen näherungsweise überein. Wird statt dem Spin der Teilchen jedoch die Teilchenzahl variiert, so ergibt sich ein höchst erstaunlicher Effekt. Für eine gerade Teilchenzahl existieren drei unterschiedliche Phasen. Ist N ungerade, so beträgt die Anzahl der Phasen jedoch vier. Bei entsprechender Wahl von β und γ ändert sich also durch Zugabe eines einzelnen Teilchens zum Kondensat die Phase des Grundzustandes. Angenommen N ist gerade und die Grundzustandsquantenzahlen sind $(\nu = 0, J = 0)$, dann ändern sich diese zu $(1, j)$ oder $(3, 0)$ (bei geradem j) bzw. $(3, 1)$ (bei ungeradem j). Die Änderung der Seniorität beträgt

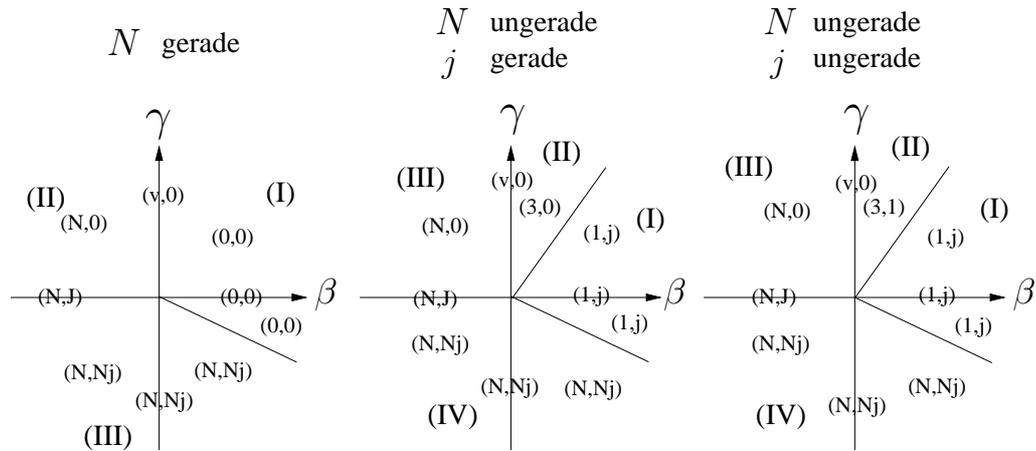


Abbildung 3.3:

Die Grundzustandsquantenzahlen (Seniorität und Drehimpuls) eines Systems aus identischen Bosonen mit $N > 17$ und Spin $j > 2$ unter der Voraussetzung (3.25). Die Parameter β und γ beziehen sich auf den Hamiltonian (3.124). Die drei bzw. vier Phasen sind durch römische Zahlen gekennzeichnet. Der Vollständigkeit halber sind auch auf den Achsen Quantenzahlen angegeben.

also maximal drei. Da alle realistischen Fälle durch ein nicht allzu hohes j abgedeckt sind, ist auch die Änderung des Drehimpulses in der Praxis begrenzt. In der reinen Theorie hingegen kann diese jeden beliebigen Wert annehmen. Abbildung 3.4 zeigt für $N = 4$ und $N = 5$ eines g -Bosonensystems alle Energieniveaus entlang des Einheitskreises in der β - γ -Ebene. Da Anzahl der Zustände mit steigender Teilchenzahl schnell zunimmt, muss hier ein unrealistisch kleiner Wert für N gewählt werden. Durch ein höheres N würde sich die Grafik jedoch nicht qualitativ ändern. Es sind deutlich alle drei bzw. vier Phasen zu erkennen.

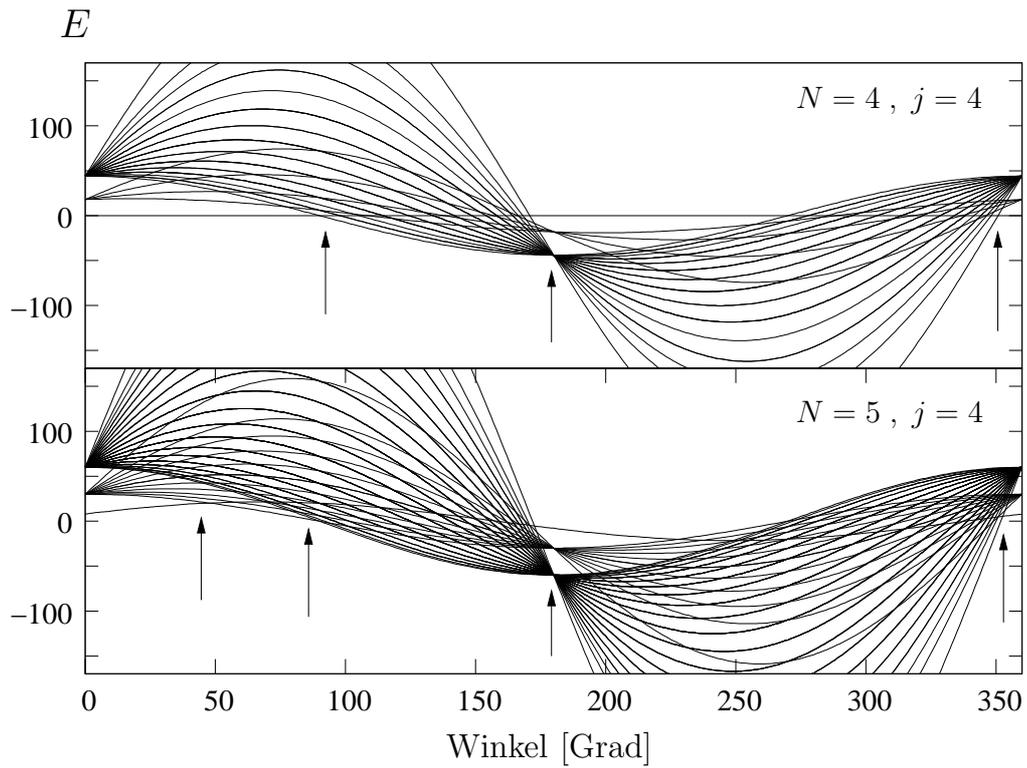


Abbildung 3.4:

Energieniveaus eines Systems aus identischen Teilchen mit Spin $j = 4$, beschrieben durch den Hamiltonian (3.124) für die Teilchenzahlen $N = 4$ und $N = 5$ und die Parameter $\beta^2 + \gamma^2 = 1$. Ein Winkel von 0 entspricht $\beta = 1$ und $\gamma = 0$. Deutlich zu erkennen ist die unterschiedliche Anzahl der Grundzustandsphasen. Die Orte der Phasenübergänge sind durch Pfeile gekennzeichnet.

Kapitel 4

Systeme mit unterscheidbaren Teilchen

In diesem Kapitel werden spezielle Eigenschaften von Systemen behandelt, die aus mindestens zwei verschiedenen Teilchensorten bestehen. Diese Teilchensorten sind im Sinne der Quantenmechanik unterscheidbar. Wir untersuchen Systeme unterscheidbarer Teilchen nicht allgemein sondern betrachten einige ausgewählte Modelle und führen die Untersuchungen größtenteils numerisch durch. Die erste Anwendung bezieht sich auf Quantenphasenübergänge. Es werden die Vorhersagen einer neuen Theorie der Quantenphasenübergänge [47], welche die Ordnung des Übergangs mit der Verteilung der Verzweigungspunkte des Hamiltonians in Zusammenhang bringt, anhand des sd-Interacting-Boson-Fermion-Model 1 verifiziert. Die zweite Anwendung bezieht sich auf eine Bose-Fermi-Symmetrie des Interacting-Boson-Fermion-Models. Alle numerischen Berechnungen wurden mit dem in Kapitel 2 vorgestellten Programm durchgeführt. Wann immer dies möglich war, wurden die Ergebnisse mit Computercodes anderer Autoren überprüft. Dieses Kapitel stellt somit eine Auswahl möglicher Anwendungen des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Programms dar und liefert den Beweis für seine Korrektheit.

4.1 Quantenphasenübergänge

Quantenphasenübergänge treten in unendlichen sowie in endlichen Vielteilchen-Quantensystemen bosonischer sowie fermionischer Natur auf (siehe z.B. [48, 49, 50, 51, 52]). Die Phasen werden durch entsprechende Variation der Parameter des Hamiltonians geändert. Zwischen den beiden Hamiltonians \hat{H}_1 und \hat{H}_2 zweier Phasen kann durch einen Parameter η interpoliert werden, so dass bei einem bestimmten kritischen Wert η_c ein Quantenphasenübergang auftritt.

$$\hat{H} = \eta\hat{H}_1 + (\eta - 1)\hat{H}_2 \quad , \quad \text{mit } [\hat{H}_1, \hat{H}_2] \neq 0 \quad (4.1)$$

Der Phasenübergang betrifft den Grundzustand sowie evtl. einzelne angeregte Zustände [52, 53]. Obwohl die für Quantenphasenübergänge typischen nicht analytischen Eigenschaften streng genommen erst bei unendlichen Systemen (also bei den hier betrachteten Systemen für unendliche Teilchenzahl $N \rightarrow \infty$) auftreten, können viele Eigenschaften auch bei moderaten Teilchenzahlen untersucht werden [54, 49, 57]. Entscheidend ist hier die Geschwindigkeit der Konvergenz gegen das klassische Limit, was in [54] anhand des sd-Interacting-Boson-Models [1] untersucht wurde. Die durch endliche Teilchenzahl hervorgerufenen Effekte verursachen für gewöhnlich eine Art Auswaschen der untersuchten Größen als Funktion des sogenannten Kontrollparameters η .

Dieses Kapitel behandelt Quantenphasenübergänge am Beispiel des sb-Bosonensystems. Es handelt sich bei diesen Systemen um Modelle bestehend aus zwei unterscheidbaren Teilchensorten. Das eine Teilchensorte ist ein s-Boson mit Spin Null und die zweite ein sog. b-Boson mit Spin l . In diesen Systemen ist ein Phasenübergang zweiter Ordnung zu finden [55, 52]. Diese

sogenannten Zwei-Niveau-Bosonen-Systeme eignen sich besonders gut für numerische Untersuchungen, da der Hamiltonian für relativ große Teilchenzahlen diagonalisiert werden kann. Außerdem modellieren sie realistische Systeme aus vielen verschiedenen Bereichen wie Molekül- und Kernphysik [1, 5], Festkörperphysik [8] sowie Quantenoptik [6] und Quantenchemie [7].

Wir betrachten hier Systeme mit endlicher Teilchenzahl N . Da die Anzahl der Einteilchenzustände bei Modellen aus zwei unterscheidbaren Teilchen mit Spin j_1 und j_2 mit $2j_1 + 2j_2 + 2$ ebenfalls endlich ist, existiert eine endliche Zahl d von Zuständen mit Energien $E_k(\eta)$. Wir gehen hier von einer Abwesenheit echter Entartungen aus. Der Hamiltonian wird also für jeden Satz evtl. auf der Trajektorie $\hat{H}_1 \rightarrow \hat{H}_2$ vorhandenen Quantenzahlen getrennt betrachtet. Dies rechtfertigt die Annahme des nicht verschwindenden Kommutators in Gleichung (4.1). Würde der Kommutator verschwinden, so könnten Zustände kreuzen. Wie bekannt ist, findet die größte Änderung zweier Eigenwerte bzw. Energien genau dann statt, wenn die entsprechenden Zustände an einer Niveauabstoßung teilnehmen (siehe hierzu auch Abschnitt 4.1.3). Ein Quantenphasenübergang findet statt, wenn der Abstand der entsprechenden Niveaus in Einheiten des mittleren Abstandes gegen Null geht für $N \rightarrow \infty$. Handelt es sich im Limes der unendlichen Teilchenzahl um eine Niveaureuzung, so ist die erste Ableitung $\frac{\partial}{\partial \eta} E_k(\eta)$ diskontinuierlich und es handelt sich um einen Quantenphasenübergang erster Ordnung. Liegt keine echte Niveaureuzung für $N \rightarrow \infty$ vor, so ist die erste Ableitung der Energie kontinuierlich und der Phasenübergang wird ebenfalls kontinuierlich genannt.

Beobachtet man für endliches N eine Niveauabstoßung, so existieren jedoch echte Entartungen im komplex erweiterten Parameterraum mit $\eta \in \mathbb{C}$. Je geringer der Abstand bei der Abstoßung auf der reellen η -Achse ist, in desto kleinerem Abstand dazu befinden sich die Entartungen im Komplexen (siehe Kapitel 4.1.4 für ein einfaches Beispiel). Die Verteilung der Entartungen in der komplexen Erweiterung des Parameterraumes ist also mit den strukturellen Veränderungen auf der reellen Achse eng verknüpft. In den folgenden Abschnitten wird eine Verbindung zwischen Quantenphasenübergängen und dieser Verteilung gezeigt. Dafür diskutieren wir zunächst die verwendete Klasse von Modellen und zeigen einige Beispiele für das Verhalten der Energieniveaus auf der reellen η -Achse in der Umgebung des Phasenübergangs des Grundzustands. Hierfür werden Hamiltonians der Form (4.1) verwendet und besonderes Augenmerk legen wir auf Niveauabstoßungen. In der Kernphysik kommt den sd-IBM1 die größte Bedeutung zu. Deswegen wurden die meisten numerischen Berechnungen unter Verwendung dieses Modells durchgeführt. Nach einer Einführung in das sd-IBM1 erweitern wir den Parameterraum, indem wir η komplex werden lassen. Anhand eines einfachen Zwei-Zustandssystems veranschaulichen wir Entartungen im Komplexen, diskutieren dann vor diesem Hintergrund das d -Zustandssystem allgemein und gehen dann wieder zu den realen Systemen über. Wir stellen dann eine Verbindung von der Verteilung der Entartungen im komplexen Parameterraum zu Quantenphasenübergängen anhand der Analogie zu einem zweidimensionalen Coulombgas her.

4.1.1 Das sb-Bosonen-System

Wir untersuchen hier ein Modell, welches aus zwei unterscheidbaren Bosonen besteht, von denen das erste ein s-Boson ist und somit den Spin Null besitzt. Der Spin der zweiten Bosonensorte sei l . Wir definieren die zu gutem Drehimpuls gekoppelten Generatoren:

$$G_{0,0}^{ss} := [s^\dagger \times \tilde{s}]_0^{(0)} \quad G_{l,M}^{sb} := [s^\dagger \times \tilde{b}]_M^{(l)} \quad G_{2,M}^{bs} := [b^\dagger \times \tilde{s}]_M^{(l)} \quad G_{J,M}^{bb} := [b^\dagger \times \tilde{b}]_M^{(J)} \quad (4.2)$$

Diese Generatoren schließen unter der Kommutatorrelation und bilden eine $U(2l+2)$ -Algebra. Da die Teilmenge bestehend aus den Generatoren $G_{J,M}^{bb}$ eine $U(2l+1)$ -Algebra generiert, können wir die bekannte Algebrakette für Systeme identischer Teilchen hier verwenden. Im Detail bedeutet dies, dass die $G_{J,M}^{bb}$ mit ungeradem J eine $SO(2l+1)$ -Algebra bilden und die drei Generatoren $G_{1,M}^{bb}$ bilden wiederum als Teilmenge eine $SO(3)$ -Algebra. Somit ist bereits die Algebrakette einer dynamischen Symmetrie bekannt. Uns interessiert hier nicht die vollständige algebraische Struktur der betrachteten Klasse von Modellen, sondern wir fokussieren stattdessen auf eine weitere dynamische Symmetrie. Die entsprechenden Generatoren sind die $G_{J,M}^{bb}$

zusammen mit den $[s^\dagger \times \tilde{b} + b^\dagger \times \tilde{s}]_M^{(l)}$ und die zugehörige Algebra ist die $SO(2l+2)$ [52].

$$U(2l+2) \supset \left\{ \begin{array}{c} U(2l+1) \\ SO(2l+2) \end{array} \right\} \supset SO(2l+1) \supset SO(3) \quad (4.3)$$

Folgende Tabelle fasst die Algebren mit ihren Generatoren zusammen.

Algebra	Generatoren
$U(2l+2)$	$G_{0,0}^{ss}, G_{l,M}^{sb}, G_{2,M}^{bs}, G_{J,M}^{bb}$
$U(2l+1)$	$G_{J,M}^{bb}$
$SO(2l+1)$	$G_{J,M}^{bb}$ mit J ungerade
$SO(2l+2)$	$[s^\dagger \times \tilde{b} + b^\dagger \times \tilde{s}]_M^{(l)}, G_{J,M}^{bb}$ mit J ungerade
$SO(3)$	$G_{1,M}^{bb}$

Wir definieren nun einen Hamiltonian, welcher zwischen den beiden dynamischen Symmetrien $U(2l+1)$ und $SO(2l+2)$ interpoliert.

$$\hat{H} = \eta\sqrt{2l+1}G_{0,0}^{ll} - \frac{1-\eta}{N}[s^\dagger \times \tilde{b} + b^\dagger \times \tilde{s}]_M^{(l)} \cdot [s^\dagger \times \tilde{b} + b^\dagger \times \tilde{s}]_M^{(l)} \quad (4.4)$$

Da dieser Hamiltonian durch die Casimirooperatoren $\hat{C}_1[U(2l+2)]$, $\hat{C}_2[SO(2l+2)]$ und $\hat{C}_2[SO(2l+1)]$ ausgedrückt werden kann, bricht er die $SO(2l+1)$ -Symmetrie nicht [52]. Die Seniorität der b-Bosonen ist also eine gute Quantenzahl. Diese Eigenschaft wird in späteren Kapiteln von Bedeutung sein.

4.1.2 Das sd-Interacting-Boson-Model 1

Das sd-Interacting-Boson-Modell (kurz sd-IBM1 oder auch manchmal nur IBM1) ist ein Spezialfall der im Kapitel 4.1.1 diskutierten Klasse von Modellen und besteht aus zwei Arten von Bosonen, welche die intrinsischen Spins 0 und 2 besitzen. Eine detaillierte Beschreibung des Modells inklusive einiger Erweiterungen findet sich in [1, 10, 5]. Wir beschränken uns hier auf eine kurze Wiedergabe einiger hier wichtiger Eigenschaften. Die Teilchen werden als s- und d-Bosonen bezeichnet, die elementaren Erzeuger- und Vernichteroperatoren werden üblicherweise mit d_m^\dagger , s^\dagger , \tilde{d}_m und s (es gilt $\tilde{s} = s$) mit $m = -2, -1, 0, 1, 2$ bezeichnet. Wir definieren die zu gutem Drehimpuls gekoppelten Generatoren

$$G_{0,0}^{ss} := [s^\dagger \times \tilde{s}]_0^{(0)} \quad G_{2,M}^{sd} := [s^\dagger \times \tilde{d}]_M^{(2)} \quad G_{2,M}^{ds} := [d^\dagger \times \tilde{s}]_M^{(2)} \quad G_{J,M}^{dd} := [d^\dagger \times \tilde{d}]_M^{(J)} \quad (4.5)$$

Diese 36 Generatoren schließen unter der Kommutatorrelation und generieren eine $U(6)$ -Algebra. Wie aus früheren Kapiteln bekannt, bilden die 25 Generatoren $G_{J,M}^{dd}$ für sich eine $U(5)$ -Algebra und weil es sich hierbei um identische Teilchen handelt (nur d-Bosonen), können wir die entsprechende Kette von Algebren verwenden.

$$\begin{array}{cccccc} U(6) & \supset & U(5) & \supset & SO(5) & \supset & SO(3) & \supset & SO(2) \\ N & & n_d & & \nu & & \Delta, J & & M \end{array} \quad (4.6)$$

Die unter den Algebren aufgeführten Quantenzahlen geben die in der Literatur gebräuchliche Notation wieder. Es existieren zwei weitere dynamische Symmetrien. Die entsprechenden Sätze von Generatoren sind

$$G_{1,M}^{dd}, \left[s^\dagger \times \tilde{d} + d^\dagger \times \tilde{s} \right]_m^{(2)} - \frac{\sqrt{7}}{2} \left[d^\dagger \times \tilde{d} \right]_m^{(2)} \quad (4.7)$$

mit der Algebrakette

$$\begin{array}{cccccc} U(6) & \supset & SU(3) & \supset & SO(3) & \supset & SO(2) \\ N & & (\lambda, \nu) & & \kappa, J & & M \end{array} \quad (4.8)$$

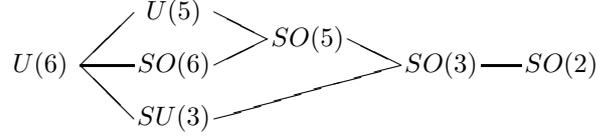
sowie

$$G_{1,M}^{dd}, G_{3,M}^{dd}, \left[s^\dagger \times \tilde{d} + d^\dagger \times \tilde{s} \right]_m^{(2)} \quad (4.9)$$

mit der zugehörigen Algebrakette

$$\begin{array}{ccccccc} U(6) & \supset & SO(6) & \supset & SO(5) & \supset & SO(3) & \supset & SO(2) \\ N & & \sigma & & \nu & & \Delta, J & & M \end{array} \quad (4.10)$$

Alle drei dynamischen Symmetrien können schematisch in einem Graphen dargestellt werden.



Das Programm ArbModel koppelt bei der Generierung der Basis zuerst immer identische Teilchen. Anschließend werden die Teilsysteme zu einem Gesamtdrehimpuls gekoppelt. Dies entspricht der sog. $U(5)$ -Basis. Hierbei handelt es sich also um Quantenzahlen, die zu der Algebrakette gehören, welche unter anderem $U(5)$ enthält. Diese Quantenzahlen der $U(5)$ -Basis wie sie in der Literatur verwendet werden, sind die Teilchenzahl N , die Anzahl der d-Bosonen n_d sowie die restlichen Quantenzahlen eines d-Bosonen-Systems ν , Δ , J und M . Da ein s-Bosonen-Zustand mit einer einzigen Quantenzahl klassifiziert werden kann (der s-Bosonen-Anzahl), reichen im Fall der $U(5)$ -Basis des sd-IBM1 also die 5 Quantenzahlen für ein d-Bosonensystem sowie die Anzahl der s-Bosonen $n_s = N - n_d$. Da ArbModel intern aus Konsistenzgründen immer 5-Quantenzahlen für identische Teilchen verwendet, wird eine entsprechende Basis in diesem Fall mit mehr Quantenzahlen als nötig angegeben. Das erste Teilsystem, welches immer einen Spin von Null besitzt, entspricht dem s-Bosonen-System. Im Folgenden ist ein Beispiel für die Ausgabe der Basis von ArbModel für das sd-IBM1 mit $N = 4$ und $J = 2$ aufgeführt.

$$\begin{aligned} |0\rangle &= |3, 1, 0, 0/2\rangle(0/2) \times |1, 1, 0, 4/2\rangle(4/2) \\ |1\rangle &= |2, 0, 0, 0/2\rangle(0/2) \times |2, 2, 0, 4/2\rangle(4/2) \\ |2\rangle &= |1, 1, 0, 0/2\rangle(0/2) \times |3, 1, 0, 4/2\rangle(4/2) \\ |3\rangle &= |0, 0, 0, 0/2\rangle(0/2) \times |4, 2, 0, 4/2\rangle(4/2) \\ |4\rangle &= |0, 0, 0, 0/2\rangle(0/2) \times |4, 4, 0, 4/2\rangle(4/2) \end{aligned}$$

Es ist also recht einfach möglich, diese Notation in die Standardnotation für die $U(5)$ -Basis (diese ist $|N, n_d, \nu, \Delta, J\rangle$) zu übersetzen, wie sie von anderen Programmen und in der Literatur verwendet wird. Vorsicht ist jedoch bei der Δ -Quantenzahl geboten. Die berechneten Wellenfunktionen können sich bezüglich der durch die Multiplizität aufgespannten Unterräume unterscheiden, denn hierbei ist die Wahl der Basisvektoren willkürlich. Ebenso kann sich der Wert dieser Quantenzahl in den Basisvektoren unterscheiden. ArbModel verwendet die Multiplizitätsquantenzahl lediglich um die Zustände zu gleichem N , ν und J beginnend mit Null in Einerschritten durchzuzählen. Je nach Spin des Teilchens ist aber eine Interpretation dieser Quantenzahl bekannt. Im Falle der d-Bosonen ist dies die Anzahl der zu Null gekoppelten d-Bosonentripel im Basisvektor. Da eine allgemeine Interpretation unabhängig vom Teilchenspin aber nicht bekannt ist, verwendet ArbModel diese Quantenzahl aus Konsistenzgründen auch bei d-Bosonen lediglich als eine Art Laufindex.

Im Folgenden sind die zu den Algebraketten gehörenden Casimiroperatoren mit ihren Eigenwerten bezüglich der entsprechenden Basis und Quantenzahl aufgeführt. Für eine detaillierte Beschreibung der drei dynamischen Symmetrien und ihren Quantenzahlen verweisen wir auf

[1, 10, 5]. Zunächst definieren wir die Anzahloperatoren sowie einige weitere Operatoren, die wir benutzen, um die Casimiroperatoren explizit anzugeben.

$$\hat{n}_s := [s^\dagger \times \tilde{s}]_0^{(0)} \quad , \quad \hat{n}_d := \sqrt{5} [d^\dagger \times \tilde{d}]_0^{(0)} \quad , \quad \hat{N} = \hat{n}_d + \hat{n}_s \quad (4.11)$$

$$\hat{L}_m := \sqrt{10} [d^\dagger \times \tilde{d}]_m^{(1)} \quad , \quad \hat{T}_m^{(3)} := [d^\dagger \times \tilde{d}]_m^{(3)} \quad , \quad \hat{T}_m^{(4)} := [d^\dagger \times \tilde{d}]_m^{(4)} \quad (4.12)$$

$$P^\dagger := \frac{1}{2} (d^\dagger \cdot d^\dagger - s^\dagger \cdot s^\dagger) \quad , \quad \tilde{P} := \frac{1}{2} (\tilde{d} \cdot \tilde{d} - \tilde{s} \cdot \tilde{s}) \quad (4.13)$$

$$\hat{Q}_m^\chi := [s^\dagger \times \tilde{d} + d^\dagger \times \tilde{s}]_m^{(2)} + \chi [d^\dagger \times \tilde{d}]_m^{(2)} \quad , \quad \hat{Q}_m := \hat{Q}_m^{-\sqrt{7}/2} \quad (4.14)$$

Wir betrachten hier nur Casimiroperatoren bis zur zweiten Ordnung. Zur $U(6)$ -Algebra existieren dann zwei Casimiroperatoren. Der Übersichtlichkeit halber bezeichnen wir die Zustände nur mit derjenigen Quantenzahl, von der die Eigenwerte abhängen.

$$\hat{C}_1[U(6)] = \hat{N} \quad \hat{C}_1[U(6)]|N\rangle = N|N\rangle \quad (4.15)$$

$$\hat{C}_2[U(6)] = \hat{N}(\hat{N} + 5) \quad \hat{C}_2[U(6)]|N\rangle = N(N + 5)|N\rangle \quad (4.16)$$

Da der Hamiltonian per Konstruktion die Teilchenzahl erhält, tragen diese Operatoren nur zur Bindungsenergie bei und sind immer diagonal.

Die beiden Casimiroperatoren zur $U(5)$ -Algebra sind nur in der sog. $U(5)$ -Basis diagonal. Ihre Form und Eigenwerte sind analog zu $\hat{C}_1[U(6)]$ und $\hat{C}_2[U(6)]$.

$$\hat{C}_1[U(5)] = \hat{n}_d \quad \hat{C}_1[U(5)]|n_d\rangle = n_d|n_d\rangle \quad (4.17)$$

$$\hat{C}_2[U(5)] = \hat{n}_d(\hat{n}_d + 4) \quad \hat{C}_2[U(5)]|n_d\rangle = n_d(n_d + 4)|n_d\rangle \quad (4.18)$$

Zu $SU(3)$ existiert ebenso wie zu $SO(6)$ nur ein Operator zweiter Ordnung.

$$\hat{C}_2[SO(6)] = \hat{N}(\hat{N} + 4) - 4P^\dagger \cdot \tilde{P} \quad \hat{C}_2[SO(6)]|\sigma\rangle = \sigma(\sigma + 4)|\sigma\rangle \quad (4.19)$$

$$\hat{C}_2[SU(3)] = 2\hat{Q} \cdot \hat{Q} + \frac{3}{4}\hat{L} \cdot \hat{L} \quad \hat{C}_2[SU(3)]|(\lambda, \mu)\rangle = (\lambda^2 + \mu^2 + \lambda\mu + 3(\lambda + \mu))|(\lambda, \mu)\rangle \quad (4.20)$$

Da $SO(5)$ gemeinsame Subalgebra zu den dynamischen Symmetrien $U(5)$ und $SO(6)$ ist, ist der $\hat{C}_2[SO(5)]$ in beiden Basen diagonal.

$$\hat{C}_2[SO(5)] = \frac{1}{5}\hat{L} \cdot \hat{L} + 2\hat{T}^{(3)} \cdot \hat{T}^{(3)} \quad \hat{C}_2[SO(5)]|\nu\rangle = \nu(\nu + 3)|\nu\rangle \quad (4.21)$$

Per Konstruktion ist $SO(3)$ Subalgebra zu allen drei dynamischen Symmetrien. Da wir immer Basiszustände mit gutem Drehimpuls verwenden, ist $\hat{C}_2[SO(3)]$ immer diagonal.

$$\hat{C}_2[SO(3)] = \hat{L} \cdot \hat{L} \quad \hat{C}_2[SO(3)]|J\rangle = J(J + 1)|J\rangle \quad (4.22)$$

Der Vollständigkeit halber geben wir auch den Casimiroperator zur $SO(2)$ -Algebra an. Da der Hamiltonian ein $SO(3)$ -invariant ist, hängen seine Eigenwerte nicht von der M -Quantenzahl ab. \hat{H} enthält also nie den Term $\hat{C}_1[SO(2)]$.

$$\hat{C}_1[SO(2)] = \hat{L}_0 \quad \hat{C}_1[SO(2)]|M\rangle = M|M\rangle \quad (4.23)$$

$$(4.24)$$

Aufgrund der oben angeführten Argumente enthält ein Hamiltonian, welcher durch Casimiroperatoren der drei dynamischen Symmetrien ausgedrückt wird und die Bindungsenergie nicht

enthält, höchstens 6 Parameter (wie oben erklärt enthält \hat{H} den Term $\hat{C}_1[SO(2)]$ ebenfalls nicht).

$$\hat{H}_C = x_1\hat{C}_1[U(5)] + x_2\hat{C}_2[U(5)] + x_3\hat{C}_2[SO(5)] + x_4\hat{C}_2[SO(6)] + x_5\hat{C}_2[SU(3)] + x_6\hat{C}_2[SO(3)] \quad (4.25)$$

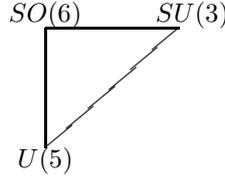
Folgende Liste zeigt alle möglichen Ein- und Zweiteilchenwechselwirkungen:

$$\hat{n}_s \quad \hat{n}_d \quad \hat{V}_{ssss}^{(0)} \quad \hat{V}_{ssdd}^{(0)} \quad \hat{V}_{sddd}^{(2)} \quad \hat{V}_{dddd}^{(0)} \quad \hat{V}_{dddd}^{(2)} \quad \hat{V}_{dddd}^{(4)} \quad (4.26)$$

Da $\hat{n}_s + \hat{n}_d = \hat{N}$ (was lediglich zur Bindungsenergie beiträgt) und $\hat{V}_{ssss}^{(0)} = \hat{n}_s \cdot \hat{n}_s$ gilt, existieren also ebenfalls 6 unabhängige Wechselwirkungen.

$$\hat{H}_g = a_1\hat{n}_d + a_2\hat{V}_{ssdd}^{(0)} + a_3\hat{V}_{sddd}^{(2)} + a_4\hat{V}_{dddd}^{(0)} + a_5\hat{V}_{dddd}^{(2)} + a_6\hat{V}_{dddd}^{(4)} \quad (4.27)$$

Daher kann jeder allgemeine sd-IBM1-Hamiltonian \hat{H}_g durch die Casimirform \hat{H}_C dargestellt werden. Durch entsprechende Wahl der Parameter können wir uns von einer dynamischen Symmetrie zu einer anderen bewegen. Der Parameterraum des sd-IBM1 wird häufig durch das sogenannte Casten-Dreieck (benannt nach R. F. Casten) dargestellt.



Eine gebräuchliche Form ist auch die Multipoldarstellung.

$$\hat{H}_m = b_1\hat{n}_d + b_2P^\dagger \cdot \tilde{P} + b_3\hat{L} \cdot \hat{L} + b_4\hat{Q} \cdot \hat{Q} + b_5\hat{T}^{(3)} \cdot \hat{T}^{(3)} + b_6\hat{T}^{(4)} \cdot \hat{T}^{(4)} \quad (4.28)$$

Eine leichte Abwandlung hiervon ist der sogenannte „Consistent-Q-Hamiltonian“ [1], bei dem ein zusätzlicher Parameter χ im Quadrupoloperator eingeführt wird. Dadurch sind nicht mehr alle Operatoren linear unabhängig. Insbesondere kann der Monopolterm durch die anderen Terme ausgedrückt und daher weggelassen werden.

$$\hat{H}_Q = c_1\hat{n}_d + c_2\hat{L} \cdot \hat{L} + c_3\hat{Q}^\chi \cdot \hat{Q}^\chi + c_4\hat{T}^{(3)} \cdot \hat{T}^{(3)} + c_5\hat{T}^{(4)} \cdot \hat{T}^{(4)} \quad (4.29)$$

Dem Hamiltonian in Multipolform kommt eine große praktische Bedeutung zu. Fittet man die Parameter so, dass der Hamiltonian experimentelle Daten möglichst gut beschreibt, so sind die Parameter zu den Termen der höheren Multipolordnungen $\hat{T}^{(3)} \cdot \hat{T}^{(3)}$ und $\hat{T}^{(4)} \cdot \hat{T}^{(4)}$ meist klein. In erster Näherung können wir also einen vereinfachten vier-parametrischen Hamiltonoperator annehmen.

$$\hat{H} = c_1\hat{n}_d + c_2\hat{L} \cdot \hat{L} + c_3\hat{Q}^\chi \cdot \hat{Q}^\chi \quad (4.30)$$

Möchte man nur Zustände gleichen Spins untersuchen, so kann der $\hat{L} \cdot \hat{L}$ -Term ebenfalls weggelassen werden, da dieser Term alle Zustände mit Drehimpuls J gleichermaßen um $c_2 \cdot J(J+1)$ verschiebt und daher nichts an der Struktur des Spektrums ändert. Da ein Faktor vor dem gesamten Hamiltonian ebenfalls die Struktur nicht beeinflusst, sondern nur skaliert, können wir für theoretische Untersuchungen die Zahl der Parameter weiter reduzieren. Wir gelangen so zu folgendem Zwei-Parameter-Hamiltonian, der als der einfachste sd-IBM1-Hamiltonian mit experimenteller Relevanz angesehen werden kann.

$$\hat{H} = \eta\hat{n}_d - \frac{1-\eta}{N}\hat{Q}^\chi \cdot \hat{Q}^\chi \quad (4.31)$$

Die Teilchenzahl N sorgt hierbei für eine angemessene Skalierung. Um zu sehen, für welche Wahl der Parameter wir eine dynamische Symmetrie erhalten, nehmen wir eine Umparametrisierung

von \hat{H}_Q nach \hat{H}_C vor.

$$x_1 = c_1 + \frac{2}{7} \left(\chi + \frac{\sqrt{7}}{2} \right) \chi c_3 + \frac{18}{35} c_5 \quad x_2 = \frac{2}{7} \left(\chi + \frac{\sqrt{7}}{2} \right) \chi c_3 + \frac{18}{35} c_5 \quad (4.32)$$

$$x_3 = \frac{1}{2} c_4 - \frac{3}{14} c_5 - \left(1 + \frac{3}{\sqrt{7}} \chi + \frac{2}{7} \chi^2 \right) c_3 \quad x_4 = \left(1 + \frac{2}{\sqrt{7}} \chi \right) c_3 \quad (4.33)$$

$$x_5 = -\frac{1}{\sqrt{7}} \chi c_3 \quad x_6 = c_2 + \frac{1}{14} \chi \left(\chi + 2\sqrt{7} \right) c_3 - \frac{1}{10} c_4 - \frac{1}{14} c_5 \quad (4.34)$$

Uns interessiert hier der einfachere Hamiltonian aus Gleichung (4.31). Für dessen Parameter gilt:

$$x_1 = \eta - \frac{2}{7} \left(\chi + \frac{\sqrt{7}}{2} \right) \chi \frac{1-\eta}{N} \quad x_2 = -\frac{2}{7} \left(\chi + \frac{\sqrt{7}}{2} \right) \chi \frac{1-\eta}{N} \quad (4.35)$$

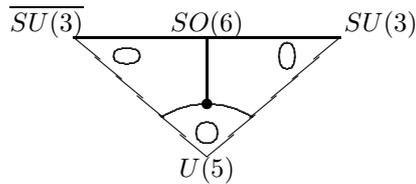
$$x_3 = \left(1 + \frac{3}{\sqrt{7}} \chi + \frac{2}{7} \chi^2 \right) \frac{1-\eta}{N} \quad x_4 = -\left(1 + \frac{2}{\sqrt{7}} \chi \right) \frac{1-\eta}{N} \quad (4.36)$$

$$x_5 = \frac{1}{\sqrt{7}} \chi \frac{1-\eta}{N} \quad x_6 = -\frac{1}{14} \chi \left(\chi + 2\sqrt{7} \right) \frac{1-\eta}{N} \quad (4.37)$$

Die drei oben genannten dynamischen Symmetrien erhalten wir also für folgende Sätze der Parameter η und χ :

(η, χ)	dyn. Symmetrie	Hamiltonian
$(1, \chi)$	$U(5)$	$\hat{H}_{U(5)} = \eta \hat{n}_d = \hat{C}_1[U(5)]$
$(0, 0)$	$SO(6)$	$\hat{H}_{SO(6)} = -\frac{1}{N} \hat{Q}^0 \cdot \hat{Q}^0 = \frac{1}{N} \hat{C}_2[SO(5)] - \frac{1}{N} \hat{C}_2[SO(6)]$
$(0, -\frac{\sqrt{7}}{2})$	$SU(3)$	$\hat{H}_{SU(3)} = -\frac{1}{N} \hat{Q} \cdot \hat{Q} = -\frac{1}{2N} \hat{C}_2[SU(3)] + \frac{3}{8N} \hat{C}_2[SO(3)]$

Für die Wahl von $(\eta, \chi) = (0, \sqrt{7}/2)$ erhalten wir ebenfalls eine dynamische Symmetrie, welche mit $\overline{SU(3)}$ bezeichnet wird. Diese ist analog zu $SU(3)$ und wird daher in der Literatur oft nicht gesondert aufgeführt. Die Eigenenergien dieses Systems sind gleich denen mit negativem χ . Die Wellenfunktionen unterscheiden jedoch sich in den Phasen ihrer Koeffizienten und daher ändern sich auch die Übergangsstärken beim Wechsel des Vorzeichens von χ . Hamiltonians mit $\chi > 0$ sind wichtig für die Beschreibung von Atomkernen mit positivem Quadrupolmoment $Q(2_1^+) = \langle 2_1^+ || \hat{Q}^\chi || 2_1^+ \rangle$ während ein negatives Quadrupolmoment durch $\chi < 0$ beschrieben wird. Die Deformation ist also prolat im $SU(3)$ -Limit und oblat im $\overline{SU(3)}$ -Limit. Wählen wir einen $U(5)$ -Hamiltonian, so erhalten wir $Q(2_1^+) = 0$ also ein sphärisches System. Bewegen wir uns für eine Teilchenzahl von z.B. $N = 50$ durch kontinuierliche Veränderung der Parameter (η, χ) z.B. von $(1, -\sqrt{7}/2)$ nach $(0, -\sqrt{7}/2)$ (also von $U(5)$ nach $SU(3)$), so verändert sich $Q(2_1^+)$ innerhalb eines recht kleinen Intervalls $\eta \in [\eta_c - \epsilon, \eta_c + \epsilon]$ und bleibt ansonsten näherungsweise konstant. Im Limes $N \rightarrow \infty$ erhalten wir sogar einen Sprung. Man spricht hier von einem Quantenphasenübergang erster Ordnung. Das Phasendiagramm des sd-IBM1 kann im sog. erweiterten Casten-Dreieck dargestellt werden. Es handelt sich um drei Linien von Phasenübergängen erster Ordnung sowie einem einzelnen Punkt, welcher einen Phasenübergang zweiter Ordnung darstellt (in der Zeichnung durch den ausgefüllten Kreis gekennzeichnet) [48, 56]. Wichtig ist die Bemerkung, dass es sich um Phasenübergänge des Grundzustandes handelt.



Diese Phasenübergänge des Grundzustandes wurden im klassischen Limit, also im Limes $N \rightarrow \infty$ mit der Ehrenfestklassifikation untersucht, indem das Energiefunktional aufgestellt wurde. Aber auch für moderate Teilchenzahlen lassen sich Effekte untersuchen, die mit dem Phasenübergang zusammenhängen [54]. Der Hamiltonian (4.31) enthält also verglichen mit seiner geringen Anzahl von Termen und Parametern eine vielfältige Struktur. Insbesondere ist er gut geeignet, um den Phasenübergang zweiter Ordnung für hohe Teilchenzahlen (die aus genannten Gründen besonders interessant sind) zu untersuchen. Hierfür setzen wir $\chi = 0$. Durch Variation von η gelangen wir dann ausgehend von $U(5)$ für $\eta = 1$ über den Phasenübergang zweiter Ordnung zu $SO(6)$ für $\eta = 0$. Für $\chi = 0$ können wir den Hamiltonian durch die drei Casimiroperatoren $\hat{C}_1[U(5)]$, $\hat{C}_2[SO(5)]$ und $\hat{C}_2[SO(6)]$ ausdrücken.

$$\hat{H}(\chi = 0) = \eta \hat{C}_1[U(5)] + \frac{1-\eta}{N} \hat{C}_2[SO(5)] - \frac{1-\eta}{N} \hat{C}_2[SO(6)] \quad (4.38)$$

Da weder $\hat{C}_1[U(5)]$ noch $\hat{C}_2[SO(6)]$ die $SO(5)$ -Symmetrie bzw. die Senioritätsquantenzahl bricht, zerfällt der Hamiltonian in Blöcke, welche zur jeweiligen Seniorität gehören. Wir können daher \hat{H} für jede Seniorität einzeln betrachten bzw. diagonalisieren. Dies ist für eine Rechnung mit möglichst hohen Teilchenzahlen extrem hilfreich, da die Dimension von \hat{H} dadurch sehr viel geringer ist, wie folgende Tabelle zeigt.

Teilchenzahl	$\dim(\hat{H}(J=0))$	$\dim(\hat{H}(\nu=0, J=0))$	Quotient
10	14	6	2.33
50	234	26	9.00
100	884	51	17.3
500	21084	251	84.0
1000	83834	501	167
5000	2085834	2501	834
10000	8338334	5001	1667

Die Anzahl der 0^+ -Zustände wächst mit N^2 während die Anzahl der 0^+ -Zustände mit $\nu = 0$ lediglich linear mit N ansteigt. Der numerische Aufwand reduziert sich daher enorm.

4.1.3 Niveauabstoßungen auf der reellen Achse

Wir betrachten den Hamiltonian aus Gleichung (4.31). Für festes $\chi = -\sqrt{7}/2$ bewegen wir uns durch entsprechende Wahl des Parameters η von der dynamischen Symmetrie $SU(3)$ ($\eta = 0$) nach $U(5)$ ($\eta = 1$). Auf dieser Trajektorie ist die Teilchenzahl N sowie der Spin J der Zustände eine gute Quantenzahl. Alle anderen Quantenzahlen (also n_d und ν sowie die $SU(3)$ -Symmetrie) sind gebrochen. Es ist bekannt, dass der Grundzustand einem Quantenphasenübergang erster Ordnung unterliegt [1]. Da der Grundzustand ein $J^\pi = 0^+$ Zustand ist, plotten wir für ein gegebenes N alle 0^+ -Energien für $\eta = 0..1$, wobei wir den Hamiltonian durch N dividieren um eine angemessene Skalierung zu erhalten.

$$\hat{H} = \frac{\eta}{N} \hat{n}_d - \frac{1-\eta}{N^2} \hat{Q}^{-\sqrt{7}/2} \cdot \hat{Q}^{-\sqrt{7}/2} \quad (4.39)$$

Die Abbildung 4.1 zeigt alle Energieniveaus als Funktion von η für die Teilchenzahl $N = 10$ (oben links). Der Phasenübergang des Grundzustandes ereignet sich etwa bei $\eta = 0.8$. Daher ist dieser Bereich noch einmal vergrößert dargestellt (oben rechts). Die Niveauabstoßung mit dem ersten angeregten Zustand ist deutlich zu erkennen. Lassen wir die Teilchenzahl nun steigen, so wird der minimale Abstand dieser beiden Zustände immer geringer und im Limes $N \rightarrow \infty$ handelt es sich um eine Kreuzung. Die erste Ableitung der Grundzustandsenergie ist dann nicht mehr analytisch und es handelt sich um einen Phasenübergang erster Ordnung. Die mit dem Phasenübergang erster Ordnung verbundenen Effekte bei endlicher Teilchenzahl können experimentell nachgewiesen werden [57]. Es existieren mehrere Positionen im Spektrum, bei denen sich zwei Zustände so nahe kommen, dass sie in der Grafik nicht von sich kreuzenden Zuständen

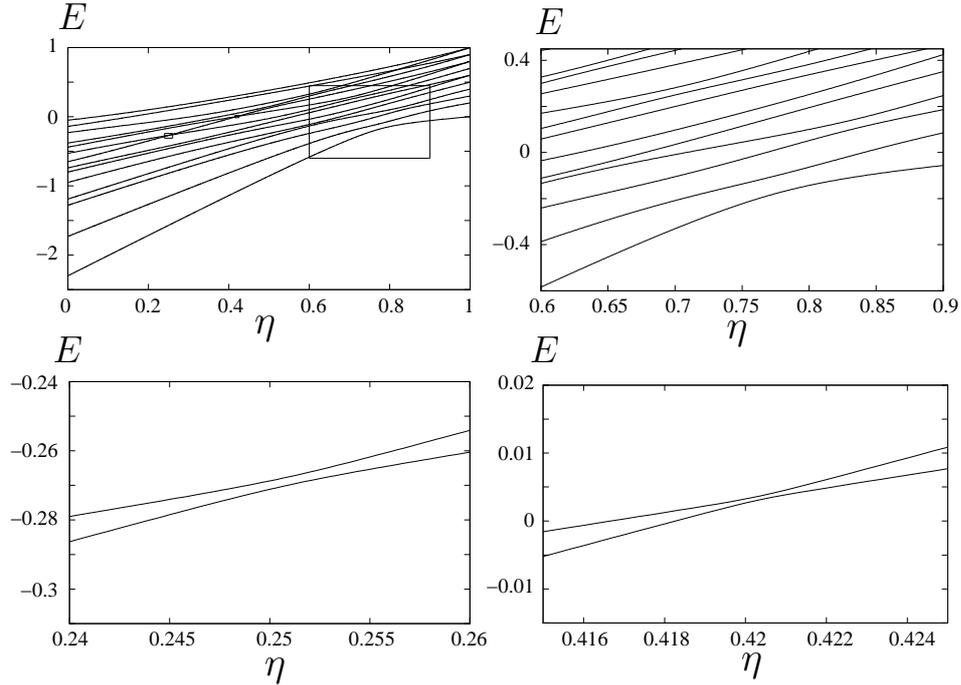


Abbildung 4.1:

Die Dynamik der Energieniveaus für den Hamiltonian (4.39) mit $N = 10$.

unterschieden werden können. Die beiden Fälle, für die der Niveauabstand am kleinsten ist, sind unten links und unten rechts vergrößert dargestellt. Wie anhand der η -Achse zu erkennen ist, wurde das linke Spektrum um einen Faktor 50, das rechte um einen Faktor 100 vergrößert. Die Bereiche entsprechen den kleinen Rechtecken in der oberen linken Grafik. In beidem Fällen ist erkennbar, dass sich die Zustände tatsächlich nicht kreuzen sondern abstoßen. Da hier außer für $\eta = 0$ und $\eta = 1$ nur $U(6)$ - und $SO(3)$ -Symmetrie vorliegt, sind lediglich N und J gute Quantenzahlen. Da wir das Spektrum jedoch für festes $N = 10$ und $J = 0$ betrachten, können sich keine Zustände kreuzen, weil das System nicht integrabel ist. Wir betrachten nun den Hamiltonian (4.31) für $\chi = 0$ und dividieren aus Skalierungsgründen wieder durch die Teilchenzahl.

$$\hat{H} = \frac{\eta}{N} \hat{n}_d - \frac{1-\eta}{N^2} \hat{Q}^0 \cdot \hat{Q}^0 \quad (4.40)$$

Für $\eta = 0$ befinden wir uns im $O(6)$ -Limit und durch kontinuierliche Variation von η von Null nach Eins gelangen wir zum $U(5)$ -Limit. Der obere linke Bereich der Abbildung 4.2 zeigt analog zum oberen linken Bereich der Abbildung 4.1 alle Energien als Funktion von η für $N = 10$. Wieder sind Bereiche zu sehen, in denen sich verschiedene Zustände sehr nahe kommen. In dem hier betrachteten Fall kann es sich im Gegensatz zur Trajektorie $SU(3) \rightarrow U(5)$ aber um echte Niveaufkreuzungen handeln, da zusätzlich zur $U(6)$ - und $SO(3)$ -Symmetrie eine weitere gute Quantenzahl existiert. Dies ist die d-Bosonen Seniorität ν . Im oberen rechten Plot sind die Zustände mit unterschiedlicher Senioritätsquantenzahl unterschiedlich dargestellt. Für $N = 10$ und $J = 0$ existieren die Senioritäten $\nu = 0, 3, 6, 9$. Die entsprechenden Zustände sind in der unteren Reihe von Abbildungen einzeln zu sehen. Auch hier kreuzen sich also keine Zustände, wenn wir alle existierenden Quantenzahlen festhalten und die Niveaus für einen Satz dieser Quantenzahlen betrachten. Es existiert jedoch ein fundamentaler Unterschied zwischen der Niveaudynamik für $\chi = 0$ und der vorher betrachteten für $\chi = -\sqrt{7}/2$. Im Fall von $\chi = 0$ ist das System integrabel, während dies für $\chi \neq 0$ nicht der Fall ist (Ausnahmen sind die dynamischen Symmetrien). Für $\chi = 0$ gehört der Hamiltonian zu einer größeren Gruppe von exakt lösbaren

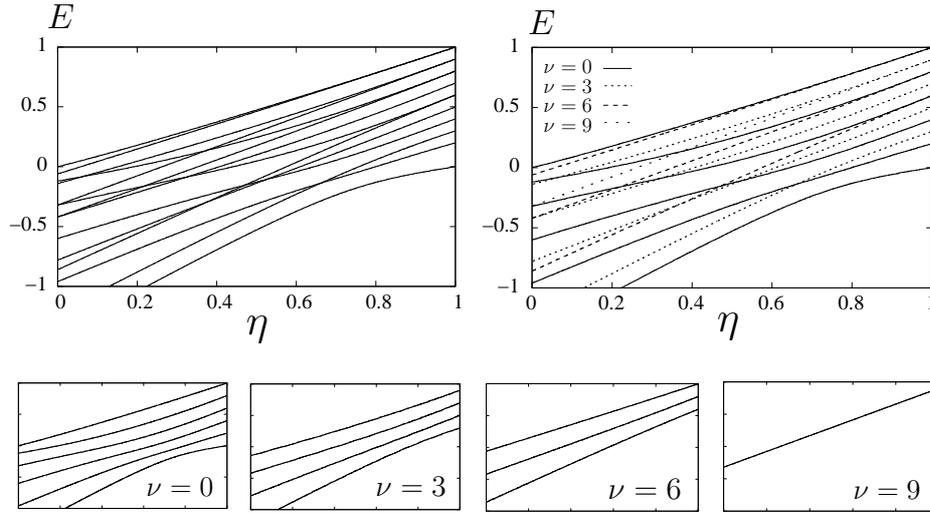


Abbildung 4.2:

Die Dynamik der Energieniveaus für den Hamiltonian (4.40) mit $N = 10$.

sogenannten *Pairing-Models* [58]. Trotzdem kreuzen sich keine Zustände, wenn diese für nur einen Satz von guten Quantenzahlen betrachtet werden. An dieser Stelle muss betont werden, dass dies eine Eigenschaft einer Klasse von Modellen ist, zu denen das sd-IBM1 gehört. Betrachten wir z.B. das sdg-IBM1, so können Zustände unter entsprechenden Bedingungen auch dann kreuzen, wenn alle guten Quantenzahlen festgehalten werden [59]. Aufgrund der Integrität stoßen sich auch keine Zustände ab. Die Nichtanalytizität aufgrund der Niveaubstößung existiert daher nicht und der Phasenübergang ist kontinuierlich [59]. Der Verlauf der Energien für $\nu = 0$ ähnelt in dem Bereich, in dem sich ein Paar von Zuständen besonders nahe kommt stark einer gewöhnlichen Zustandsabstoßung. Der Einfachheit halber nennen wir diesen Effekt im Folgenden ebenfalls Niveaubstößung, auch wenn dies streng genommen nicht korrekt ist. Im Weiteren ist für uns also eine Annäherung mit anschließender Entfernung zweier Energien eine Zustandsabstoßung.

Da der Grundzustand eine Seniorität von $\nu = 0$ besitzt, fokussieren wir hier auf diese Quantenzahl, denn nur Zustände mit $\nu = 0$ können mit dem Grundzustand wechselwirken. Der in Abbildung 4.2 gezeigte Verlauf für die Energien ist keine spezielle Eigenschaft des sd-IBM1. Wir betrachten nun das sb-IBM1, welches aus s-Bosonen sowie einem weiteren Typ von Bosonen mit frei gewähltem Spin l besteht. Wir drücken den Hamiltonian für diese Klasse von Modellen analog zu dem Hamiltonian (4.40) aus.

$$\hat{H} = \eta \frac{\sqrt{2l+1}[b^\dagger \times \tilde{b}]_0^{(0)}}{N} - \frac{1-\eta}{N^2} [s^\dagger \times \tilde{b} + b^\dagger \times \tilde{s}]^{(l)} \cdot [s^\dagger \times \tilde{b} + b^\dagger \times \tilde{s}]^{(l)} \quad (4.41)$$

Wie in Abschnitt 4.1.1 diskutiert, bricht dieser Hamiltonian die $SO(2l+1)$ -Symmetrie nicht. Durch Variation des Parameters η von Null nach Eins bewegen wir uns von der dynamischen Symmetrie $SO(2l+2)$ nach $U(2l+1)$. Abbildung 4.3 zeigt die Energieniveaus für $N = 30$ für die sechs tiefstmöglichen Spins des zweiten Bosons. Für $l = 2$ ergibt sich das schon bekannte Bild aus Abbildung 4.2, nur das hier aufgrund der höheren Teilchenzahl mehr Zustände existieren. Es ist deutlich zu erkennen, dass alle Zustände einen ähnlichen Verlauf zeigen. Etwa bei der Energie $E = 0$ durchlaufen die Niveaus ihre größte Annäherung zu den jeweils benachbarten Niveaus. Je höher der Zustand angeregt ist, desto kleiner ist der Wert für η bei dem der Abstand zu den jeweils tiefer und höher liegenden Niveaus am geringsten ist. Der Verlauf erinnert an eine Druckwelle, die sich vom oberen Bereich des Spektrums bei kleinem η durch das gesamte

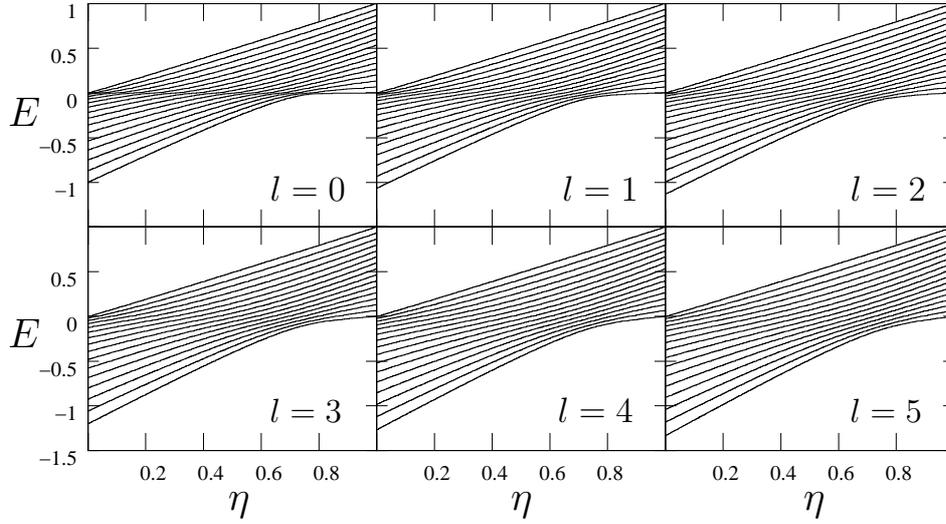


Abbildung 4.3:

Die Dynamik der Energieniveaus für den Hamiltonian (4.41) mit $N = 30$, $\nu = 0$ und $J = 0$.

Spektrum bis hin zum Grundzustand bei $\eta \approx 0.8$ bewegt. Die Dynamik der Energieniveaus wurde für diese Trajektorie sowie für das klassische Limit detailliert untersucht [60, 61]. Der bekannte Phasenübergang zweiter Ordnung des Grundzustandes befindet sich genau an dieser Stelle. Die Kompression des Spektrums im Bereich um $E = 0$ (also die relative Zustandsdichte) ist bei gleicher Teilchenzahl für kleines l am stärksten. Der Effekt ist bei endlicher Teilchenzahl also für einen niedrigen Spin des zweiten Bosons stärker als für einen hohen Spin. Dies deutet darauf hin, dass die Konvergenz zum klassischen Limit mit steigender Teilchenzahl für $l = 0$ am schnellsten ist. Da alle Niveaus einen sehr ähnlichen Verlauf zeigen, liegt die Vermutung nahe, dass auch diese wie der Grundzustand einem Quantenphasenübergang unterliegen. Diese Vermutung wird in den folgenden Abschnitten bestätigt. Der entsprechende theoretische Hintergrund macht Gebrauch von der Verteilung der sog. Verzweigungspunkte des Hamiltonians. Daher folgt zunächst eine Einführung hierzu und anschließend die Anwendung auf Quantenphasenübergänge.

4.1.4 Verzweigungspunkte des Quantenhamiltonians

4.1.4.1 Das Zwei-Niveau-System

Wir betrachten ein einfaches Zwei-Zustands-System.

$$H = \eta \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix} - (1 - \eta) \begin{pmatrix} 0 & c \\ c & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{mit } a, b, c \in \mathbb{R} \quad (4.42)$$

Wir bestimmen nun die Eigenwerte dieses Hamiltonians, indem wir die quadratische Gleichung $\det(H - E \cdot \underline{1}) = 0$ lösen. Nach kurzer Rechnung erhalten wir für die Eigenwerte E_1 und E_2 :

$$E_{1,2} = \frac{\eta(a+b)}{2} \pm \sqrt{\frac{\eta^2(a-b)^2}{4} + (\eta-1)^2 c^2} \quad (4.43)$$

Für reelles η tritt Entartung also nur dann auf, wenn gilt: $c = 0$ und $a = b$. Es sei nun $c \neq 0$ und $a \neq b$, so dass auf der reellen η -Achse keine Entartung auftreten kann. Die beiden Niveaus können sich jedoch auf der komplexen η -Ebene kreuzen. Damit Entartung eintritt, muss der

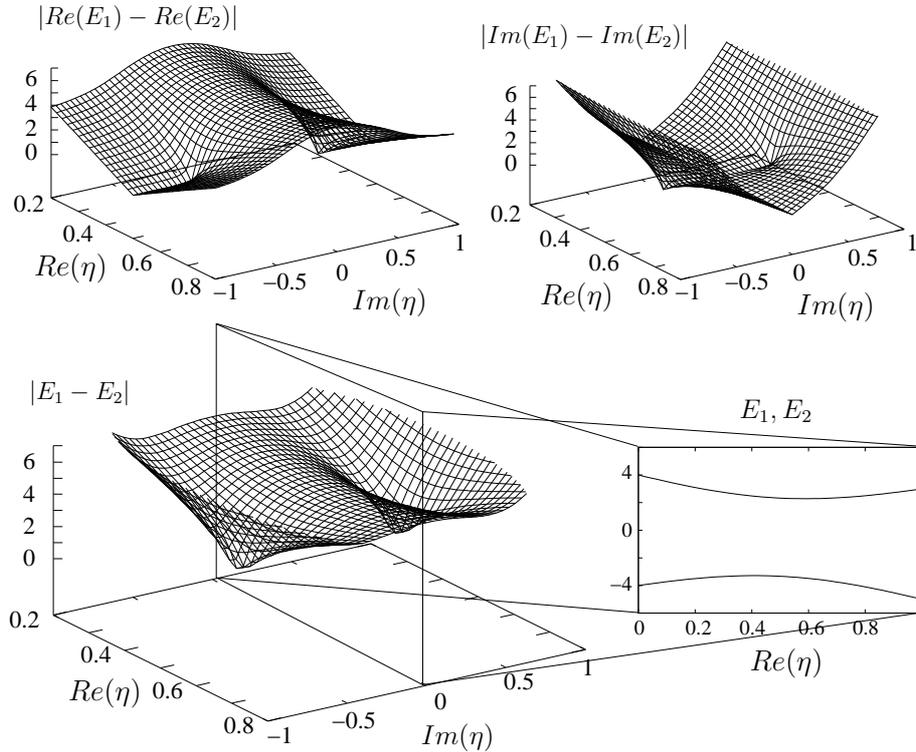


Abbildung 4.4:

Verzweigungspunkte am Beispiel des Zwei-Niveau-Systems aus Gleichung (4.46). Der 2D-Plot zeigt die gewöhnliche Niveauabstoßung auf der reellen Achse.

Term unter der Wurzel in Gleichung (4.43) gleich Null werden.

$$\frac{\eta^2(a-b)^2}{4} + (\eta-1)^2c^2 = 0 \quad (4.44)$$

Durch einfache Umformung erhalten wir folgende Lösungen für η :

$$\eta_{1,2} = \frac{4c \pm i \cdot 2c(a-b)}{(a-b)^2 + 4} \quad (4.45)$$

Die beiden Lösungen η_1 und η_2 sind also (in Übereinstimmung mit obigen Bemerkungen) komplex. Die Punkte in der komplexen Parameterenebene, für die zwei (oder evtl. mehr) Niveaus kreuzen, nennen wir hier die Verzweigungspunkte des Quantenhamiltonians. Je größer die Stärke der Wechselwirkung c gewählt ist, desto weiter entfernt befinden sich die Verzweigungspunkte von der reellen Achse. Für $c = 0$ gilt $\eta_1 = \eta_2$ und die Zustände kreuzen sich auf der reellen Achse. Da H für komplexes η eine komplexe symmetrische Matrix ist, sind auch die Eigenwerte komplex (es sei denn, η ist reell, dann ist H reell symmetrisch). Zur Veranschaulichung wählen wir den Hamiltonian

$$H = \eta \begin{pmatrix} -5 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} - (1-\eta) \begin{pmatrix} 0 & -4 \\ -4 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.46)$$

und tragen die komplexen Energien über der η -Ebene auf. Wie aus der Zeichnung 4.4 ersichtlich, können die Niveaus für reelles η nicht entarten. In der komplexen η -Ebene existieren jedoch zwei Punkte, in denen die komplexen Eigenwerte gleich sind. Diese beiden Punkte sind im unteren 3D-Plot deutlich zu erkennen. Aus algebraischen Gründen existieren Linien in der η -Ebene,

auf denen nur die imaginären Anteile der Eigenwerte entartet sind. Eine solche Linie beginnt auf der reellen Achse, verläuft bis zu einem Verzweigungspunkt und endet dort (siehe rechter 3D-Plot). Im Verzweigungspunkt beginnt eine Linie, auf welcher nur der reelle Anteil entartet ist und entfernt sich im weiteren Verlauf von der reellen Achse (siehe obere linke Grafik). Betrachtet man lediglich reelles η , so zeigt sich der bekannte Verlauf der Eigenwerte bei einer Niveauabstoßung (siehe 2D-Plot).

4.1.4.2 Verzweigungspunkte allgemein

Wir betrachten nun die Verzweigungspunkte allgemein für einen beliebigen Quantenhamiltonian $\hat{H}(\eta) = \eta\hat{H}_1 + (\eta - 1)\hat{H}_2$. Die Dimension der Matrix H sei d . Die Verzweigungspunkte η_i des Systems sind diejenigen Punkte im komplexen Parameterraum, an denen zwei oder mehr Eigenwerte entarten. Entartung von Eigenwerten bedeutet, dass das charakteristische Polynom eine zwei- oder mehrfache Nullstelle besitzt bzw. dass ein Hoch- oder Tiefpunkt die Eigenwertachse berührt. Also sind die η_i die Lösungen der beiden Gleichungen:

$$\begin{aligned} \det(H(\eta) - E \cdot \underline{\underline{1}}) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial E} \det(H(\eta) - E \cdot \underline{\underline{1}}) &= 0 \end{aligned} \quad (4.47)$$

Das charakteristische Polynom ist vom Grad d sowohl in E als auch in η und die Ableitung ist von Grad $d - 1$ in E und η . Durch ein Iterationsverfahren kann der Grad in E sukzessive herabgesetzt werden, bis wir zu einem einzigen Polynom $g(\eta)$ von Grad $d(d-1)$ gelangen, welches nur noch η als Parameter enthält [62]. Die $d(d-1)$ Verzweigungspunkte sind die Lösungen der Gleichung:

$$g(\eta) = 0 \quad (4.48)$$

Eine explizite Form von $g(\eta)$ kann direkt gefunden werden, ohne den oben erwähnten Eliminationsprozess zu durchlaufen. Da $g(\eta)$ genau dann gleich Null ist, wenn mindestens zwei Energien gleich sind, können wir für das Polynom folgende Form ansetzen:

$$g(\eta) = \prod_{i=1}^d \underbrace{\prod_{j \neq i} (E_j(\eta) - E_i(\eta))}_{=: g_i(\eta)} \quad (4.49)$$

Dieses Polynom ist von Grad $d(d-1)$ und da ein Polynom durch seinen Grad und seine Nullstellen eindeutig bestimmt ist, haben wir die korrekte Funktion gefunden. Wir nennen $g(\eta)$ die „Diskriminante“ von H . Die d partiellen Diskriminanten $g_i(\eta)$ sind von Grad $d-1$ und ihre Nullstellen beziehen sich auf Entartungen mit einem bestimmten Eigenwert $E_i(\eta)$. Die komplexen Eigenwerte $E_i(\eta)$ leben auf d Riemannschen Flächen, die sich irgendwo in der komplexen η -Ebene in einem Punkt berühren. An diesem Punkt tritt die Entartung auf. Es ist noch zu erwähnen, dass jedes beliebige Paar von Niveaus im komplexen entartet. Möchte man einen bestimmten Zustand untersuchen, so ist man also an den Nullstellen dieser partiellen Diskriminante $g_i(\eta)$ interessiert. Es existieren mehrere Möglichkeiten, wie sich die Riemannschen Flächen berühren können.

- *Ein diabolischer Punkt*
Hier berühren sich die Flächen lediglich [63].
- *Ein sog. Verzweigungspunkt*
In diesem Fall sind die Riemannschen Flächen durch eine Wurzel-Type von Singularität verschränkt [64].

Bei den hier diskutierten Fällen handelt es sich um den letztgenannten Typ von Singularität. Dies folgt aus einer Entwicklung in der Umgebung der Entartung, welche es erlaubt, das Verhalten der beiden Eigenwerte durch eine 2×2 Matrix mit nicht verschwindenden Nebendiagonalen

zu beschreiben. In dieser Situation handelt es sich um einen Verzweigungspunkt. Ein diabolischer Punkt tritt auf, wenn die nicht-diagonalen Matrixelemente am Punkt der Singularität verschwinden [65]. Findet auf der reellen Achse eine Niveauabstoßung statt, so befinden sich im komplexen die entsprechenden Verzweigungspunkte nicht weit entfernt [66]. Je geringer der Abstand der Niveaus, um so näher liegen die Verzweigungspunkte an der reellen Achse. Die Verteilung der Verzweigungspunkte ist also eng mit der Dynamik der Niveaus auf der reellen Achse und damit auch mit den Quantenphasenübergängen verknüpft. Kommen sich zwei Energien im reellen für $N \rightarrow \infty$ immer näher, so wandert also der entsprechende Verzweigungspunkt immer näher an die reelle Achse. Bei einem Quantenphasenübergang verschwindet der Niveauabstand relativ zum mittleren Abstand für unendliche Teilchenzahl. Aufgrund des Zusammenhangs der reellen Niveauabstände mit der Position der entsprechenden Verzweigungspunkte müssen diese also ein spezielles Verhalten zeigen, welches auch von der Ordnung des Phasenübergangs abhängt [53, 47]. In Abschnitt 4.1.5 wird dieser Zusammenhang detailliert dargestellt sowie die recht aufwändige numerische Überprüfung mittels des Programms ArbModel beschrieben.

Eine allgemeine Möglichkeit, die Verteilung der Nullstellen von $g(\eta)$ oder auch einer partiellen Diskriminante $g_k(\eta)$ zu berechnen, besteht nun darin, den Residuensatz anzuwenden um die Anzahl $n(r)$ der Nullstellen innerhalb eines geschlossenen Weges (z.B. $|\eta| = r$) zu zählen.

$$n(r) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|\eta|=r} \frac{g'(\eta)}{g(\eta)} d\eta \quad (4.50)$$

Dieses Gebiet könnte in der Praxis z.B. ein Rechteck sein, welches iterativ verkleinert wird, bis die gewünschte Auflösung erreicht ist. Dieses Verfahren wird für große Dimensionen von H jedoch nur noch schwer anwendbar, da für jede Stützstelle des Integrals erneut alle Eigenwerte berechnet werden müssen. Wie in Kapitel 4.1.5 gezeigt wird, ist es aber gar nicht nötig, die genaue Position aller Verzweigungspunkte explizit zu kennen.

4.1.5 Coulomb-Analogie für Verzweigungspunkte

Die hier untersuchte Klasse von Hamiltonians hat die Form $\hat{H} = \eta \hat{H}_1 - (1 - \eta) \hat{H}_2$ mit reellen \hat{H}_1 und \hat{H}_2 . Es sei M_{ij} die Lösungsmenge der Gleichung $E_i(\eta) = E_j(\eta)$. Da \hat{H}_1 und \hat{H}_2 als reell angenommen sind, existieren immer zwei Verzweigungspunkte zu einem Paar (E_i, E_j) , welche zueinander komplex konjugiert sind. Es sei η_{ij} jenes Element aus M_{ij} , für welches $\text{Im}(\eta_{ij}) > 0$ gilt. Uns interessiert hier nur $i \neq j$ und wegen $\eta_{ij} = \eta_{ji}^*$ sind die $\frac{1}{2}d(d-1)$ Verzweigungspunkte auf der komplexen Halbebene mit positivem Imaginäranteil durch die η_{ij} mit $i < j$ gegeben. Dann gilt für die Diskriminante $g(\eta)$ [47]:

$$g(\eta) \propto \prod_{i=1}^d \prod_{j>i} (\eta - \eta_{ij})(\eta - \eta_{ij}^*) \quad (4.51)$$

und außerdem

$$g(\eta) = \prod_{i=1}^d g_i(\eta) \quad \text{mit} \quad g_i(\eta) = \prod_{j \neq i} (E_i(\eta) - E_j(\eta)) \quad (4.52)$$

Wir quadrieren diese beiden Gleichungen und erhalten:

$$g^2(\eta) \propto \prod_{i=1}^d \prod_{j>i} (\eta - \eta_{ij})^2 (\eta - \eta_{ij}^*)^2 \quad (4.53)$$

$$\stackrel{\eta_{ij} = \eta_{ji}^*}{=} \prod_{i=1}^d \prod_{j \neq i} (\eta - \eta_{ij})(\eta - \eta_{ij}^*)$$

sowie

$$g^2(\eta) = \prod_{i=1}^d g_i^2(\eta) \quad \text{mit} \quad g_i^2(\eta) = \prod_{j \neq i} (E_i(\eta) - E_j(\eta))^2 \quad (4.54)$$

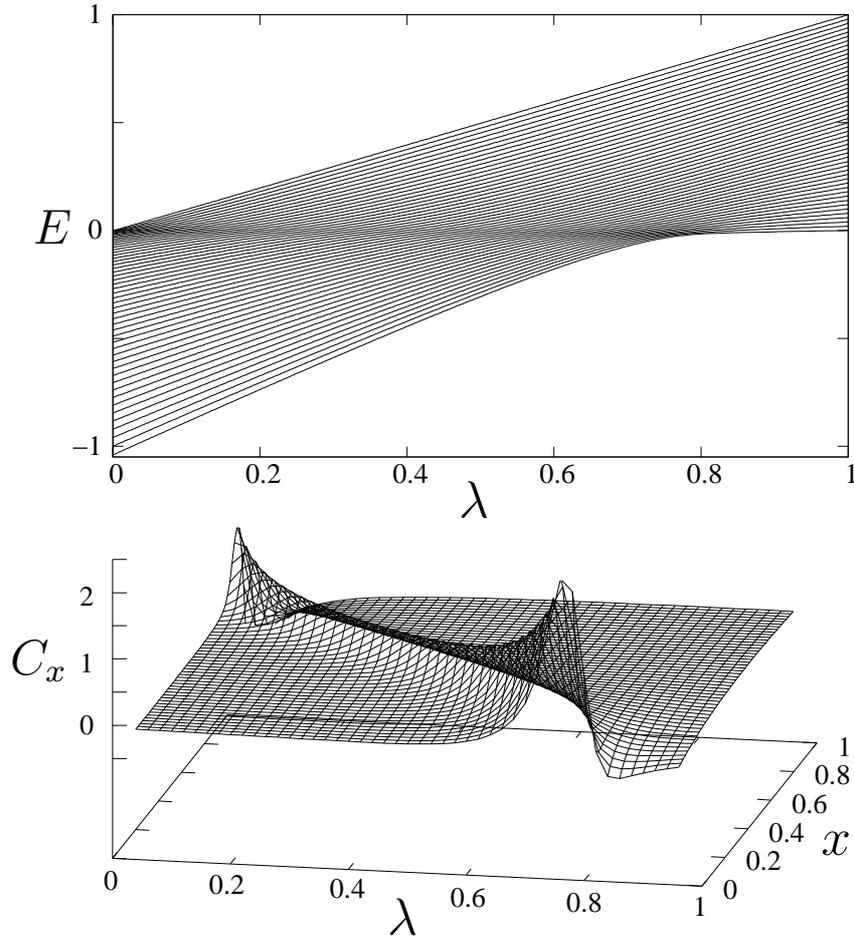


Abbildung 4.5:

Die Energien auf der Trajektorie $O(6) \rightarrow U(5)$ des sd-IBM1 für $\nu = 0$ und $N = 100$ sowie die entsprechenden $C_x(\lambda)$. x bezeichnet die Position im Spektrum, $x = 0$ ($x = 1$) entspricht dem tiefsten (höchsten) Zustand.

Da $g_i^2(\eta)$ ein Polynom vom Grad $2(d-1)$ mit den Nullstellen η_{ij} und η_{ij}^* ist, gilt

$$g_i^2(\eta) = \prod_{j \neq i} (E_i(\eta) - E_j(\eta))^2 = c_i \prod_{j \neq i} (\eta - \eta_{ij})(\eta - \eta_{ij}^*) \quad (4.55)$$

mit $c_i \in \mathbb{R}_{>0}$. Es sei $\eta = \lambda + i\mu$ und $\eta_{ij} = \lambda_{ij} + i\mu_{ij}$. Für reelles $\eta = \lambda$ erhalten wir dann:

$$g_i^2(\lambda) = c_i \prod_{j \neq i} \underbrace{[(\lambda - \lambda_{ij})^2 + \mu_{ij}^2]}_{=: R_{ij}^2(\lambda)} \quad (4.56)$$

Somit ist $R_{ij}(\lambda)$ gleich dem Abstand der beiden Punkte λ und η_{ij} in der komplexen Zahlenebene. Also ist $g_i(\lambda)$ sensitiv zu den Verzweigungspunkten der i -ten Riemannschen Fläche in der Nähe der reellen Achse. Dies ist sehr bemerkenswert, da sich die partielle Diskriminante $g_i(\lambda)$ gleichzeitig durch die reellen Eigenwerte $E_i(\lambda)$ ausdrücken lässt (siehe Gleichung (4.49)). Wir definieren

$$U_i(\lambda) := -\frac{1}{2(d-1)} \ln g_i^2(\lambda) \quad (4.57)$$

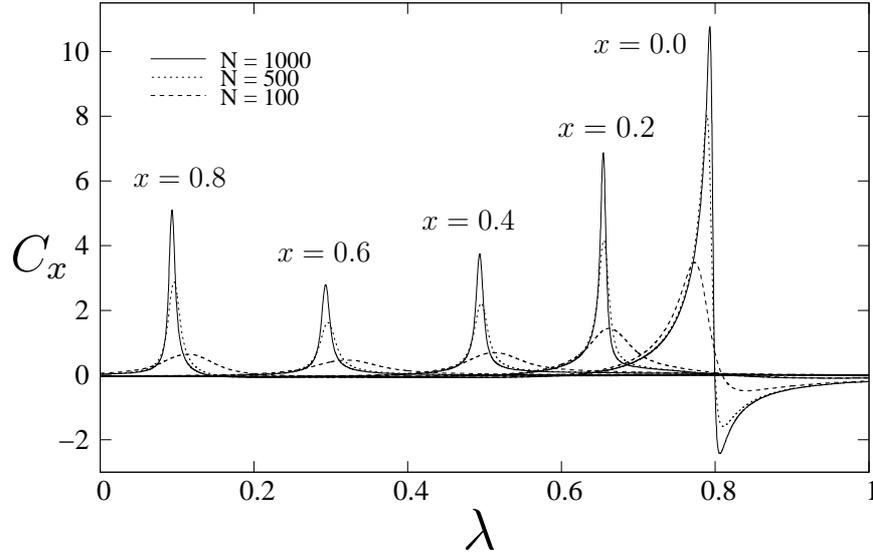


Abbildung 4.6:

$C_x(\lambda)$ einiger Zustände für $N = 100, 500, 1000$. Die Zunahme der Peakhöhe mit steigender Teilchenzahl ist deutlich zu erkennen.

und erhalten

$$\begin{aligned}
 U_i(\lambda) &= -\frac{\ln c_i}{2(d-1)} - \frac{1}{d-1} \sum_{i \neq j} \ln R_{ij}(\lambda) \\
 &= -\frac{1}{d-1} \sum_{i \neq j} \ln |E_i(\lambda) - E_j(\lambda)|
 \end{aligned} \tag{4.58}$$

Die erste Zeile obiger Gleichung hat die Form eines zweidimensionalen Coulombpotenzials. Die Entartungen kann man sich daher als Punktladungen in der komplexen Ebene vorstellen. Das Einführen von $U_i(\lambda)$ mit der Definition (4.57) macht es also möglich, von der bekannten Theorie der Elektrostatik zu profitieren. Durchläuft der i -te Zustand einen Quantenphasenübergang bei λ_i^c , so nähern sich zumindest einige Verzweigungspunkte und im Bild der Elektrostatik die Punktladungen infinitesimal an diesen Punkt λ_i^c auf der reellen Achse an [67, 68]. Da $U_i(\lambda)$ also die Funktion eines Potenzials annimmt, ist es naheliegend die zugehörige Kraft $F_i(\lambda)$ zu definieren.

$$F_i(\lambda) := -\frac{d}{d\lambda} U_i(\lambda) \tag{4.59}$$

$F_i(\lambda)$ ist die Kraft auf eine Probeladung auf der reellen Achse, hervorgerufen durch Punktladungen an den Koordinaten der Verzweigungspunkte. Da die Verteilung der Ladungen spiegel-symmetrisch bezüglich der λ -Achse ist (weil H eine komplex symmetrische Matrix ist), zeigt $F_i(\lambda)$ immer parallel oder antiparallel zu dieser Achse. Wir betrachten auch die Änderung der Kraft:

$$C_i(\lambda) := \frac{d}{d\lambda} F_i(\lambda) \tag{4.60}$$

Wir betrachten nun $C_i(\lambda)$ am Ort eines Phasenübergangs λ_i^c des i -ten Zustandes. Offenbar gilt für ein kleines $\epsilon > 0$

$$F_i(\lambda_i^c + \epsilon) = -F_i(\lambda_i^c - \epsilon) \tag{4.61}$$

und die Änderung der Kraft $C_i(\lambda)$ wird maximal bei $\lambda = \lambda_i^c$. Handelt es sich um einen Sprung von $F_i(\lambda)$ für $N \rightarrow \infty$, so divergiert $C_i(\lambda_i^c)$. Dieser Fall entspricht einer linienförmigen La-

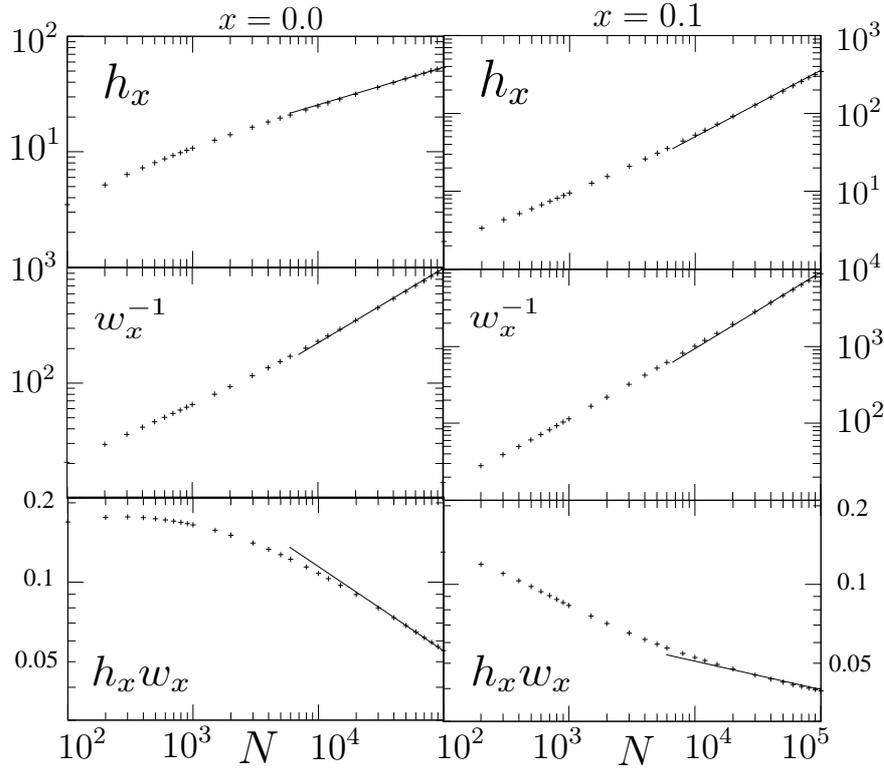


Abbildung 4.7:

Die Abbildung zeigt die Peakhöhe h_x von $C_x(\lambda)$, die Halbwertsbreite w_x des Peaks sowie das genäherte Peakvolumen $h_x \cdot w_x$ für Teilchenzahlen bis zu $N = 10^5$. Die Linien deuten die Konvergenz zu einer exponentielle Abhängigkeit an.

ungsverteilung, welche die reelle Achse schneidet. Um eine evtl. Diskontinuität der Kraft zu detektieren, definieren wir eine weitere Größe:

$$Q_i(\lambda) := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\lambda-\epsilon}^{\lambda+\epsilon} C_i(\lambda') d\lambda' = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} [F_i]_{\lambda-\epsilon}^{\lambda+\epsilon} \quad (4.62)$$

Das so definierte $Q_i(\lambda)$ eignet sich dafür, die Ordnung eines Quantenphasenübergangs des i -ten Zustandes zu detektieren. Wie aus der Definition von $U_i(\lambda)$ ersichtlich, ist die Kraft $F_i(\lambda)$ diskontinuierlich, falls $\frac{d}{d\lambda} E_i(\lambda)$ selbst diskontinuierlich ist. Dies wird an folgender Gleichung deutlich:

$$F_i(\lambda) = \frac{1}{\Omega} \sum_{j \neq i} (-1)^{z_{ji}} \frac{\frac{d}{d\lambda} [E_j(\lambda) - E_i(\lambda)]}{|E_j(\lambda) - E_i(\lambda)|} \quad (4.63)$$

mit $z_{ji} = 0$ für $E_j(\lambda) - E_i(\lambda) > 0$ und $z_{ji} = 1$ sonst. $F_i(\lambda)$ ist also kontinuierlich, es sei denn, mindestens eine der Ableitungen $\frac{d}{d\lambda} (E_j(\lambda) - E_i(\lambda))$ ist nicht kontinuierlich. Daher gilt $Q_i(\lambda_i^c) \neq 0$ für einen Übergang erster Ordnung und $Q_i(\lambda_i^c) = 0$ für einen kontinuierlichen Quantenphasenübergang. In jedem Fall wird aber die Peakhöhe von $C_i(\lambda)$ gegen unendlich gehen.

Wir betrachten dieses nun am Beispiel des Hamiltonians (4.41) für $l = 2$ (siehe auch Abbildung 4.3). Es handelt sich also um das sd-IBM1 auf der Trajektorie $SO(6) \rightarrow U(5)$. Die Abbildung 4.5 zeigt alle Energien für $\nu = 0$ und $N = 100$ mit den entsprechenden $C_x(\lambda)$. x gibt die Position des entsprechenden Zustands im Spektrum an wobei $x = 0$ ($x = 1$) für den tiefsten (höchsten) Zustand steht. Wie aus der Grafik ersichtlich, zeigt $C_x(\lambda)$ einen Peak

an der Stelle, an welcher der entsprechende Zustand seinen benachbarten Niveaus besonders nahe kommt. Wir untersuchen nun das Verhalten von $C_x(\lambda)$ und $Q_x(\lambda)$ einiger ausgewählter Zustände für deutlich höhere Teilchenzahlen. Abbildung 4.6 zeigt $C_x(\lambda)$ für Zustände, die sich über das gesamte Spektrum verteilen für die Teilchenzahlen $N = 100$, $N = 500$ und $N = 1000$. Bei Quantenphasenübergängen erster Ordnung muss die Peakhöhe divergieren, das Peakvolumen aber gegen Null gehen. Offenbar ist die Konvergenz gegen das klassische Limit nicht schnell genug, um anhand der Abbildung 4.6 eine sichere Aussage treffen zu können. Daher betrachten wir die Peakhöhe h_x von $C_x(\lambda)$, die Halbwertsbreite w_x sowie das Peakvolumen, welches wir durch $h_x \cdot w_x$ nähern, für noch höhere Teilchenzahlen (siehe Abbildung 4.7). Die Abbildung bezieht sich auf den Grundzustand ($x = 0$, linke Seite) sowie einem angeregten Zustand ($x = 0.1$, rechte Seite). Die untersuchten Teilchenzahlen erstrecken sich über mehrere Größenordnungen von $N = 10^2$ bis zu $N = 10^5$. Alle Achsen sind logarithmisch. Der obere Teil zeigt die Peakhöhe h_x von $C_x(\lambda)$. Ab einer Teilchenzahl von etwa 10^4 stellt sich (in der doppelt logarithmischen Darstellung) ein näherungsweise linearer Verlauf ein, was durch die durchgehende Linie angedeutet ist. Da es sich um einen Quantenphasenübergang zweiter Ordnung (also um einen kontinuierlichen) handelt, sollte das Peakvolumen jedoch verschwinden. Daher muss die Halbwertsbreite w_x mit steigender Teilchenzahl gegen Null gehen. Der Verlauf von w_x^{-1} muss daher ebenfalls divergieren, was im mittleren Teil der Grafik wiedergegeben ist. Die Geschwindigkeit der Divergenz dieser beiden Größen entscheidet darüber, ob das Peakvolumen verschwindet oder nicht. Näherungsweise ist das Volumen durch $c \cdot h_x w_x$ gegeben (mit $c = \text{const.}$). Daher ist im unteren Bereich der Abbildung das Produkt $h_x w_x$ aufgetragen. Auch hier stellt sich für hohe Teilchenzahlen ein linearer Verlauf ein. Da diese Linien fallend sind, stimmt das Ergebnis mit den oben abgeleiteten Vorhersagen überein. Die hier gezeigte numerische Studie mit ArbModel bestätigt also die Interpretation der Verzweigungspunkte des Quantenhamiltonians als zweidimensionales Coulombgas. Es muss jedoch betont werden, dass die Konvergenz gegen das klassische Limit hier offenbar derart langsam ist, dass Berechnungen zu Teilchenzahlen von mehr als 10^5 wünschenswert erscheinen. Da aber die Dimension d des Hamiltonians für diese Teilchenzahl bereits 50001 beträgt, ist eine Rechnung zu noch höherem N numerisch sehr aufwendig.

4.2 Das sd-Interacting-Boson-Fermion-Fermion-Model 1

Wir beschreiben hier einen weiteren Test für das Programm "ArbModel". Zu diesem Zweck soll ein Modell benutzt werden, welches sowohl Bosonen als auch Fermionen enthält. Das sd-IBM1 ist in diesem Sinne also zu einfach, da es nur aus Bosonen besteht. Die Konstruktion eines kernphysikalisch relevanten Modells mit beiden Teilchenarten ist jedoch einfach. Wir betrachten z.B. die Neutronen eines Kerns als Bosonen und die Protonen als echte Fermionen. Diese Betrachtung ähnelt dem sd-IBM2. Dort handelt es sich um Proton- und Neutronbosonen. Wir ersetzen hier lediglich die Protonbosonen durch Fermionen. Dieses Modell kann z.B. auf den Kern ^{198}Hg angewendet werden [69]. Es handelt sich hierbei um ein System aus acht Neutronen und zwei Protonen. Die Neutronen beschreiben wir durch vier Bosonen, die Protonen durch Fermionen. Als möglichen Spin der Bosonen lassen wir Null und Zwei zu. Der Neutronenanteil wird also durch das gewöhnliche sd-IBM1 beschrieben. An dieses Bosonensystem koppeln wir zwei Fermionen. Als möglichen Spin dieser Fermionen lassen wir nur $j = 3/2$ zu. Das dies speziell für ^{198}Hg eine sinnvolle Näherung ist, ergibt sich aus der Schalenstruktur der Atomkerne. Die Fermionen sitzen in diesem Modell also immer in der gleichen Schale und sind daher als zwei identische Teilchen mit Spin $j = 3/2$ anzusehen. Für tiefliegende Anregungen dominieren Konfigurationen entsprechend dieser Näherung. Das Modell besteht daher aus den Bosonenerzeugern s_0^\dagger und d_m^\dagger mit $m = -2, -1, 0, 1, 2$ und den Fermionenerzeugern f_m^\dagger mit $m = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$ sowie aus den entsprechenden Vernichtern. Eine detaillierte Beschreibung des Modells und seiner algebraischen Struktur findet sich in [11, 5]. Die dort zu findende Ausarbeitung behandelt jedoch nur den Fall eines einzigen Fermions ($N_f = 1$). In [69] wird der Fall $N_f = 2$ mit vier Bosonen ($N_b = 4$) für die Energien einer bestimmten dynamischen Symmetrie des Modells rein analy-

tisch behandelt. Der hier besprochene Test für den numerischen Code besteht nun darin, diese Ergebnisse zu verifizieren und zusätzlich einige M1-Übergangsstärken zu berechnen. Da die Berechnungen in einer dynamischen Symmetrie stattfinden, unterliegen die Matrixelemente des M1-Operators entsprechenden Auswahlregeln. Diese Auswahlregeln werden für den Fall $N_b = 4$ und $N_f = 2$ zunächst analytisch bestimmt und anschließend numerisch verifiziert.

4.2.1 Die Gruppenkette und der Hamiltonian

Bei der für den Test ausgewählten Gruppenkette handelt es sich um eine dynamische Bose-Fermi-Symmetrie. Im Folgenden geben oben stehende Indizes „B“ und „F“ an, ob es sich bei den Generatoren der jeweiligen Algebra um bosonische oder fermionische Operatoren handelt. Mit „BF“ werden Algebren mit gemischten Generatoren bezeichnet.

$$\begin{array}{ccccccc} U^B(6) \otimes U^F(4) \supset SO^B(6) \otimes SU^F(4) \supset SU^{BF}(4) \supset USp^{BF}(4) \supset SU^{BF}(2) \\ [N_b] \quad [1^{N_f}] \quad (\sigma_b) \quad [\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3] \quad (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) \quad (\tau_1, \tau_2) \quad J \end{array} \quad (4.64)$$

Die Quantenzahlen zur Klassifizierung der entsprechenden irreduziblen Darstellungen entsprechen hierbei den in der Literatur [11, 5] üblichen. Wegen $SO(6) \simeq SU(4)$ und $SO(5) \simeq USp(4)$ ist es reine Konvention, ob Quantenzahlen der orthogonalen oder unitären bzw. symplektischen Gruppe benutzt werden. Per Konvention werden hier Quantenzahlen bezüglich unitärer Darstellungen in eckigen Klammern angegeben. Für orthogonale Gruppen werden runde Klammern benutzt und die symplektischen Labels stehen in spitzen Klammern. Eine Schur-Funktionen (oder kurz S-Funktionen) wird durch geschweifte Klammern symbolisiert.

$$\begin{array}{l} [\lambda_1, \lambda_2, \dots] \hat{=} \text{unitäre Darstellung} \\ (\lambda_1, \lambda_2, \dots) \hat{=} \text{orthogonale Darstellung} \\ \langle \lambda_1, \lambda_2, \dots \rangle \hat{=} \text{symplektische Darstellung} \\ \{ \lambda_1, \lambda_2, \dots \} \hat{=} \text{S-Funktion} \end{array} \quad (4.65)$$

Der allgemeinste zur Gruppenkette (4.64) gehörende Hamiltonian ohne diejenigen Terme, welche nur zur Bindungsenergie beitragen, ist durch vier Casimiroperatoren gegeben.

$$\hat{H} = DC_2[SO^B(6)] + AC_2[SU^{BF}(4)] + BC_2[USp^{BF}(4)] + CC_2[SU^{BF}(2)] \quad (4.66)$$

Um diesen Hamiltonian mit ArbModel diagonalisieren zu können, werden die Casimiroperatoren explizit als Funktion der elementaren Erzeuger- und Vernichtoperatoren benötigt.

$$\hat{C}_2[SO^B(6)] = \hat{N}(\hat{N} + 4) - 4P^\dagger \cdot \tilde{P} \quad (4.67)$$

$$P^\dagger = \frac{1}{2} (d^\dagger \cdot d^\dagger - s^\dagger \cdot s^\dagger) \quad ; \quad \tilde{P} = \frac{1}{2} (\tilde{d} \cdot \tilde{d} - \tilde{s} \cdot \tilde{s}) \quad (4.68)$$

$$\hat{C}_2[SU^{BF}(4)] = \frac{2}{10} \hat{J} \cdot \hat{J} + \hat{Q} \cdot \hat{Q} + \hat{O} \cdot \hat{O} \quad (4.69)$$

$$\hat{C}_2[USp^{BF}(4)] = \frac{2}{10} \hat{J} \cdot \hat{J} + \hat{O} \cdot \hat{O} \quad (4.70)$$

$$\hat{C}_2[SU^{BF}(2)] = \hat{J} \cdot \hat{J} \quad (4.71)$$

$$\hat{O}_m = [d^\dagger \times \tilde{d}]^{(3)} - \frac{1}{\sqrt{2}} [f^\dagger \times \tilde{f}]^{(3)} \quad (4.72)$$

$$\hat{Q}_m = [s^\dagger \times \tilde{d}]^{(2)} + [d^\dagger \times \tilde{s}]^{(2)} + [f^\dagger \times \tilde{f}]^{(2)} \quad (4.73)$$

$$\hat{J}_m = \sqrt{10} [d^\dagger \times \tilde{d}]^{(1)} + \sqrt{5} [f^\dagger \times \tilde{f}]^{(1)} \quad (4.74)$$

Des Weiteren sollen M1-Übergangsstärken berechnet werden. Der entsprechende Operator ist durch eine Linearkombination aller zum Drehimpuls $J = 1$ gekoppelten Generatoren der $U^B(6) \otimes U^F(4)$ -Algebra gegeben.

$$\hat{T}(M1) = \alpha[d^\dagger \times \tilde{d}]^{(1)} + \beta[f^\dagger \times \tilde{f}]^{(1)} \quad (4.75)$$

Für den Test des Programms kann prinzipiell jeder beliebige Satz von Parametern verwendet werden. Um die Ergebnisse mit denen aus [69] vergleichen zu können wird jedoch $A = -0.097$, $B = 0.042$ und $C = 0.025$ verwendet. Dieser Parametersatz entspricht einer realistischen Rechnung für ^{198}Hg und findet sich in [69, 70]. Da hierbei nur Zustände mit maximalem σ_b von Interesse sind, werden alle anderen durch die Wahl $D = -100$ zu großen Energien hin verschoben. Die Energien der Zustände sind durch folgende Formel gegeben:

$$\begin{aligned} \hat{H}|(\sigma_b), (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3), (\tau_1, \tau_2), J\rangle = & D\sigma_b(\sigma_b + 4) + A(\sigma_1(\sigma_1 + 4) + \sigma_2(\sigma_2 + 2) + \sigma_3^2) + \\ & B(\tau_1(\tau_1 + 3) + \tau_2(\tau_2 + 1)) + CJ(J + 1)|(\sigma_b), (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3), (\tau_1, \tau_2), J\rangle \end{aligned} \quad (4.76)$$

Um die mit Hilfe dieser Gleichung berechneten Energien mit den numerischen Ergebnissen vergleichen zu können, müssen alle Quantenzahlen bekannt sein. Diese können bestimmt werden, wenn die Verzweigungsregeln der Gruppenkette (4.64) bekannt sind. Eine detaillierte Ausarbeitung dieser Regeln ist im Anhang C.5 zu finden.

4.2.2 Der Verzweigungsbaum für $N_b = 4$

Mit den im Anhang C.5 hergeleiteten Verzweigungsregeln kann der vollständige Verzweigungsbaum für den Fall $N_b = 4$ aufgestellt werden.

4.2.2.1 $N_f = 0$ und $N_f = 4$

Aufgrund der Äquivalenz von $[1, 1, 1, 1]_{SU(4)}$ mit $[0]_{SU(4)}$ können die beiden Fälle $N_f = 0$ und $N_f = 4$ gemeinsam behandelt werden.

$U^B(6) \otimes U^F(4)$	$SU^B(4) \otimes SU^F(4)$	$SU^{BF}(4)$	$USp^{BF}(4)$	$SU^{BF}(2)$ bzw. Spin in $[\hbar]$
$[4] \otimes [1^{N_f}]$	$[0] \otimes [0]$	$[0]$	$\langle 0, 0 \rangle$	0
	$[2, 2] \otimes [0]$	$[2, 2]$	$\langle 0, 0 \rangle$	0
			$\langle 1, 1 \rangle$	2
			$\langle 2, 2 \rangle$	2, 4
	$[4, 4] \otimes [0]$	$[4, 4]$	$\langle 0, 0 \rangle$	0
			$\langle 1, 1 \rangle$	2
			$\langle 2, 2 \rangle$	2, 4
			$\langle 3, 3 \rangle$	0, 3, 4, 6
			$\langle 4, 4 \rangle$	2, 4, 5, 6, 8

(4.77)

4.2.2.2 $N_f = 1$ und $N_f = 3$

Die beiden Fälle $N_f = 1$ und $N_f = 3$ entsprechen einer Spiegelung an der halbgefüllten Schale. Daher muss die Anzahl der Zustände zu jedem Spin jeweils gleich sein. Dies spiegelt sich darin wieder, dass zwei Darstellungen der $SU(4)$, welche einer Spiegelung an der halbgefüllten Schale entsprechen, jeweils zu den gleichen Darstellungen der $USp(4)$ verzweigen. Der Fall $N_f = 3$ bietet im Vergleich zu $N_f = 1$ also wenig neue Physik. Da in der Literatur eine entsprechende Ausarbeitung aber nicht zu finden ist, werden hier die nach den oben hergeleiteten Verzweigungsregeln bestimmten Quantenzahlen beider Fälle angegeben. Um den Faktor $1/2$ in

der Notation einzusparen sind die Drehimpuls jeweils in Einheiten von $\hbar/2$ angegeben.

$U^B(6) \otimes U^F(4)$	$SU^B(4) \otimes SU^F(4)$	$SU^{BF}(4)$	$USp^{BF}(4)$	$SU^{BF}(2)$ bzw. Spin in $[\hbar/2]$
$[4] \otimes [1]$	$[0] \otimes [1]$	$[1]$	$\langle 1, 0 \rangle$	3
	$[2, 2] \otimes [1]$	$[3, 2]$	$\langle 1, 0 \rangle$	3
			$\langle 2, 1 \rangle$	1, 5, 7
			$\langle 3, 2 \rangle$	3, 5, 7, 9, 11
		$[2, 2, 1]$	$\langle 1, 0 \rangle$	3
			$\langle 2, 1 \rangle$	1, 5, 7
	$[4, 4] \otimes [1]$	$[5, 4]$	$\langle 1, 0 \rangle$	3
			$\langle 2, 1 \rangle$	1, 5, 7
			$\langle 3, 2 \rangle$	3, 5, 7, 9, 11
			$\langle 4, 3 \rangle$	3, 5, 7, 9 ² , 11, 13, 15
			$\langle 5, 4 \rangle$	1, 5, 7 ² , 9, 11 ² , 13 ² , 15, 17, 19
		$[4, 4, 1]$	$\langle 1, 0 \rangle$	3
			$\langle 2, 1 \rangle$	1, 5, 7
			$\langle 3, 2 \rangle$	3, 5, 7, 9, 11
			$\langle 4, 3 \rangle$	3, 5, 7, 9 ² , 11, 13, 15

(4.78)

$U^B(6) \otimes U^F(4)$	$SU^B(4) \otimes SU^F(4)$	$SU^{BF}(4)$	$USp^{BF}(4)$	$SU^{BF}(2)$ bzw. Spin in $[\hbar/2]$
$[4] \otimes [1, 1, 1]$	$[0] \otimes [1, 1, 1]$	$[1, 1, 1]$	$\langle 1, 0 \rangle$	3
	$[2, 2] \otimes [1, 1, 1]$	$[3, 3, 1]$	$\langle 1, 0 \rangle$	3
			$\langle 2, 1 \rangle$	1, 5, 7
			$\langle 3, 2 \rangle$	3, 5, 7, 9, 11
		$[2, 1]$	$\langle 1, 0 \rangle$	3
			$\langle 2, 1 \rangle$	1, 5, 7
	$[4, 4] \otimes [1, 1, 1]$	$[5, 5, 1]$	$\langle 1, 0 \rangle$	3
			$\langle 2, 1 \rangle$	1, 5, 7
			$\langle 3, 2 \rangle$	3, 5, 7, 9, 11
			$\langle 4, 3 \rangle$	3, 5, 7, 9 ² , 11, 13, 15
			$\langle 5, 4 \rangle$	1, 5, 7 ² , 9, 11 ² , 13 ² , 15, 17, 19
		$[4, 3]$	$\langle 1, 0 \rangle$	3
			$\langle 2, 1 \rangle$	1, 5, 7
			$\langle 3, 2 \rangle$	3, 5, 7, 9, 11
			$\langle 4, 3 \rangle$	3, 5, 7, 9 ² , 11, 13, 15

(4.79)

4.2.2.3 $N_f = 2$

In den folgende Abschnitten werden $M1$ -Übergangsmatrixelemente für den Fall $N_f = 2$ berechnet. Die vollständige Liste der entsprechenden Niveaus liefert folgende Tabelle.

$U^B(6) \otimes U^F(4)$	$SU^B(4) \otimes SU^F(4)$	$SU^{BF}(4)$	$USp^{BF}(4)$	$SU^{BF}(2)$ bzw. Spin in $[\hbar]$
$[4] \otimes [1, 1]$	$[0] \otimes [1, 1]$	$[1, 1]$	$\langle 0, 0 \rangle$	0
			$\langle 1, 1 \rangle$	2
	$[2, 2] \otimes [1, 1]$	$[3, 3]$	$\langle 0, 0 \rangle$	0
			$\langle 1, 1 \rangle$	2
			$\langle 2, 2 \rangle$	2, 4
			$\langle 3, 3 \rangle$	0, 3, 4, 6
		$[3, 2, 1]$	$\langle 1, 1 \rangle$	2
			$\langle 2, 2 \rangle$	2, 4
			$\langle 3, 1 \rangle$	1, 2, 3, 4, 5
			$\langle 2, 0 \rangle$	1, 3
		$[1, 1]$	$\langle 0, 0 \rangle$	0
			$\langle 1, 1 \rangle$	2
	$[4, 4] \otimes [1, 1]$	$[5, 5]$	$\langle 0, 0 \rangle$	0
			$\langle 1, 1 \rangle$	2
			$\langle 2, 2 \rangle$	2, 4
			$\langle 3, 3 \rangle$	0, 3, 4, 6
			$\langle 4, 4 \rangle$	2, 4, 5, 6, 8
			$\langle 5, 5 \rangle$	2, 4, 5, 6, 7, 8, 10
		$[5, 4, 1]$	$\langle 1, 1 \rangle$	2
			$\langle 2, 2 \rangle$	2, 4
			$\langle 3, 3 \rangle$	0, 3, 4, 6
			$\langle 4, 4 \rangle$	2, 4, 5, 6, 8
			$\langle 5, 3 \rangle$	1, 2, 3 ² , 4 ² , 5 ² , 6 ² , 7 ² , 8, 9
			$\langle 4, 2 \rangle$	1, 2, 3 ² , 4, 5 ² , 6, 7
			$\langle 3, 1 \rangle$	1, 2, 3, 4, 5
			$\langle 2, 0 \rangle$	1, 3
		$[3, 3]$	$\langle 0, 0 \rangle$	0
			$\langle 1, 1 \rangle$	2
			$\langle 2, 2 \rangle$	2, 4
			$\langle 3, 3 \rangle$	0, 3, 4, 6

(4.80)

4.2.3 $M1$ -Übergänge

Der $M1$ -Operator lautet

$$\hat{T}^{M1} = \alpha[d^\dagger \times \tilde{d}]^{(1)} + \beta[f^\dagger \times \tilde{f}]^{(1)} \quad (4.81)$$

Die Matrixelemente der beiden Terme dieses Operators stehen in einer einfachen Beziehung zueinander [11]

$$\langle \psi_1 || [d^\dagger \times \tilde{d}]_m^{(1)} || \psi_2 \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} \langle \psi_1 || [f^\dagger \times \tilde{f}]_m^{(1)} || \psi_2 \rangle \quad (4.82)$$

Daher genügt es, z.B. nur den bosonischen Term zu betrachten. Der Tensorcharakter der bosonischen Erzeuger und Vernichter ist

$$\begin{aligned} d_m^\dagger &\triangleq T^{[1] \otimes [0], [1, 1] \otimes [0], [1, 1], \langle 1, 1 \rangle, [4], m} \\ \tilde{d}_m &\triangleq T^{[1^5] \otimes [0], [1, 1] \otimes [0], [1, 1], \langle 1, 1 \rangle, [4], m} \end{aligned} \quad (4.83)$$

Durch bilden des äußeren Produkts der Anteile der entsprechenden Gruppen und Anwendung der Verzweigungsregeln ergibt sich der Tensorcharakter des gekoppelten Operators.

$$[d^\dagger \times \tilde{d}]_m^{(1)} \triangleq T^{[2, 1^4] \otimes [0], [2, 1, 1] \otimes [0], [2, 1, 1], \langle 2 \rangle, [2], m} \quad (4.84)$$

Hieraus können die Auswahlregeln für M1-Übergänge bestimmt werden. In der Literatur ist es üblich, nicht die Labels bezüglich $SU(4)$ und $USp(4)$ sondern diejenigen bezüglich $SO(6)$ und $SO(5)$ zu verwenden. Daher werden die Auswahlregeln hier ebenfalls bezüglich der speziellen orthogonalen Gruppe angegeben. Für $N_f = 2$ gilt:

$$\Delta\sigma_1 \leq 1 \quad \wedge \quad \Delta\sigma_2 \leq 1 \quad \wedge \quad \Delta\tau_1 = \Delta\tau_2 \leq 1 \quad (4.85)$$

Da für alle hier besprochenen Zustände $\sigma_3 = 0$ gilt, kommt dieses Label in obigen Gleichungen nicht vor. In folgender Tabelle sind einige Beispiele für das Betragsquadrat des reduzierten Matrixelements des M1-Operators zwischen tiefliegenden Zuständen aufgeführt (alle Werte wurden mit ArbModel berechnet).

	$\langle 5, 0, 0 \rangle \langle 0, 0 \rangle 0$	$\langle 5, 0, 0 \rangle \langle 3, 0 \rangle 0$	$\langle 4, 1, 0 \rangle \langle 3, 0 \rangle 0$	$\langle 3, 0, 0 \rangle \langle 0, 0 \rangle 0$	$\langle 3, 0, 0 \rangle \langle 3, 0 \rangle 0$	$\langle 4, 1, 0 \rangle \langle 1, 1 \rangle 1$	$\langle 5, 0, 0 \rangle \langle 2, 0 \rangle 2$	$\langle 5, 0, 0 \rangle \langle 1, 0 \rangle 2$
$\langle 4, 1, 0 \rangle \langle 1, 1 \rangle 1$	1/5	0	0	2/5	0	3/20	9/20	0
$\langle 4, 1, 0 \rangle \langle 2, 1 \rangle 1$	0	11/30	2/7	0	1/210	0	0	3/50
$\langle 4, 1, 0 \rangle \langle 3, 1 \rangle 1$	0	0	0	0	0	0	1/25	0
$\langle 4, 1, 0 \rangle \langle 4, 1 \rangle 1$	0	1/75	11/175	0	11/21	0	0	0

Die Tatsache, dass das Betragsquadrat des reduzierten Matrixelement in allen Fällen eine rationale Zahl ist, kann als starkes Indiz für Korrektheit angesehen werden, denn dies ist im Allgemeinen nur in einer dynamischen Symmetrie der Fall. Für den Fall der dynamischen Symmetrie lassen sich geschlossene Ausdrücke für die oben aufgeführten reduzierten Matrixelemente finden. Wir geben hier ein Beispiel [71].

$$|\langle \langle 4, 1, 0 \rangle \langle 1, 1 \rangle 1 || [d^\dagger \times \tilde{d}]^{(1)} || \langle \langle 5, 0, 0 \rangle \langle 2, 0 \rangle 2 \rangle|^2 = \frac{3(N_b + 5)(N_b + 6)}{20(N_b + 1)(N_b + 2)} \quad (4.86)$$

Für $N_b = 4$ ergibt obige Formel einen Wert von 9/20, was mit dem numerisch ermittelten Wert übereinstimmt. Aufgrund der Tatsache, dass zwei identische Fermionen mit Spin $j = 3/2$ zu $J = 0$ und $J = 2$ koppeln können, existiert hier eine Analogie zum sd-IBM2. In [78] sind die entsprechenden analytischen Ausdrücke gegeben. Da zwei Fermionen einem Boson entsprechen, muss eine Substitution in der Teilchenzahl vorgenommen werden. Wir geben hier zwei Beispiele.

$$\begin{aligned} B(M1; 1_M^+ \rightarrow 2_2^+) &= \frac{3}{4\pi} (g_\nu - g_\pi)^2 \frac{(N+4)(N+5)}{2(N-1)N(N+1)} N_\nu N_\pi \\ B(M1; 1_M^+ \rightarrow 0_1^+) &= \frac{3}{4\pi} (g_\nu - g_\pi)^2 \frac{1}{N+1} N_\nu N_\pi \end{aligned} \quad (4.87)$$

Für die Umrechnung zum reduzierten Matrixelement von $[d^\dagger \times \tilde{d}]^{(1)}$ bezüglich der hier diskutierten dynamischen Bose-Fermi-Symmetrie muss zunächst $g_\pi = 0$ und $g_\nu = 1$ gesetzt werden. Des Weiteren wurde der M1-Operator in [78] mit einem Vorfaktor definiert und bei der Umrechnung des $B(M1)$ zum reduzierten Matrixelement tritt zusätzlich ein Faktor 3 auf. Insgesamt führt dies zu einem Faktor von $4\pi/10$. Aufgrund der Behandlung eines Fermionepaares als Boson, muss die Substitution $N \rightarrow N_b + 1$, $N_\pi \rightarrow 1$ und $N_\nu \rightarrow N$ ausgeführt werden. In ersten Fall führt dies zu weiter oben angegebenen Formel und der zweite Fall ergibt

$$|\langle \langle 4, 1, 0 \rangle \langle 1, 1 \rangle 1 || [d^\dagger \times \tilde{d}]^{(1)} || \langle \langle 5, 0, 0 \rangle \langle 0, 0 \rangle 0 \rangle|^2 = \frac{3N_b}{10(N_b + 2)} \quad (4.88)$$

was mit dem entsprechenden Wert aus obiger mit ArbModel berechneten Tabelle übereinstimmt.

4.2.4 Vollständige Niveaustuktur für $N_b = 4, N_f = 2$

Im Folgenden ist der Output des Programms ArbModel für den Hamiltonian

$$\hat{H} = DC_2[SO^B(6)] + AC_2[SU^{BF}(4)] + BC_2[USp^{BF}(4)] + CC_2[SU^{BF}(2)] \quad (4.89)$$

mit dem Parametersatz $A = -0.097, B = 0.042, C = 0.025$ und $D = -100$ und den beiden M1-Operatoren

$$O1 := [d^\dagger \times \tilde{d}]^{(1)} \quad \wedge \quad O2 := [f^\dagger \times \tilde{f}]^{(1)} \quad (4.90)$$

gegeben.

```

Eigenvalues for J = 0/2 ; P = 1 ; (9 of 9) :
0.000000 0.756000 1.726000 2.328000 3.084000 2002.328000 2003.084000
2003.880000 3203.880000
Eigenvalues for J = 2/2 ; P = 1 ; (6 of 6) :
1.272000 1.524000 1.860000 2.280000 2003.212000 2003.464000
Eigenvalues for J = 4/2 ; P = 1 ; (19 of 19) :
0.318000 0.570000 1.288000 1.326000 1.540000 1.624000 1.830000 1.960000
2.296000 2.380000 2.646000 2.898000 2002.646000 2002.898000 2003.228000
2003.480000 2003.564000 2004.198000 3204.198000
Eigenvalues for J = 6/2 ; P = 1 ; (12 of 12) :
1.056000 1.522000 1.774000 2.026000 2.110000 2.110000 2.530000 2.530000
3.384000 2003.384000 2003.462000 2003.714000
Eigenvalues for J = 8/2 ; P = 1 ; (17 of 17) :
0.920000 1.256000 1.676000 1.890000 1.974000 2.180000 2.226000 2.310000
2.646000 2.730000 2.730000 3.248000 3.584000 2003.248000 2003.584000
2003.830000 2003.914000
Eigenvalues for J = 10/2 ; P = 1 ; (9 of 9) :
1.926000 2.224000 2.430000 2.560000 2.560000 2.896000 2.980000 2.980000
2004.164000
Eigenvalues for J = 12/2 ; P = 1 ; (10 of 10) :
1.806000 2.226000 2.730000 2.776000 2.860000 3.196000 3.280000 3.280000
4.134000 2004.134000
Eigenvalues for J = 14/2 ; P = 1 ; (4 of 4) :
3.080000 3.210000 3.630000 3.630000
Eigenvalues for J = 16/2 ; P = 1 ; (4 of 4) :
2.976000 3.480000 3.946000 4.030000
Eigenvalues for J = 18/2 ; P = 1 ; (1 of 1) :
4.480000
Eigenvalues for J = 20/2 ; P = 1 ; (1 of 1) :
4.430000
<2 1 || 01 || 3 1> = 0.000000e+00 ; ||^2 = 0.000000e+00
<2 2 || 01 || 3 1> = 2.449490e-01 ; ||^2 = 6.000000e-02
<2 3 || 01 || 3 1> = 0.000000e+00 ; ||^2 = 0.000000e+00
<2 4 || 01 || 3 1> = -4.357039e-14 ; ||^2 = 1.898379e-27
<2 2 || 02 || 3 1> = -3.464102e-01 ; ||^2 = 1.200000e-01

```

Die Dimension der Hamiltonmatrix zu jedem Drehimpuls entspricht der durch die Verzweigungsregeln gegebenen Anzahl der Zustände und alle Energien entsprechen *exakt* den durch die Gleichung (4.76) vorhergesagten. Laut der Auswahlregel für M1-Übergänge müssen drei der vier reduzierten Matrixelemente des Operators $[d^\dagger \times \tilde{d}]^{(1)}$ verschwinden. Eines dieser drei Matrixelemente wird nicht exakt zu Null berechnet. Dies kann zwei Gründe haben. Zum Einen ist die numerische Genauigkeit endlich und zum Anderen werden die Parameter des Hamiltonians nur mit endlich vielen Dezimalstellen angegeben. Dies gilt nicht nur für die Diagonalisierung sondern auch z.B. für alle intern berechneten 6j-Symbole sowie evtl. Faktoren der Form $\sqrt{2j+1}$,

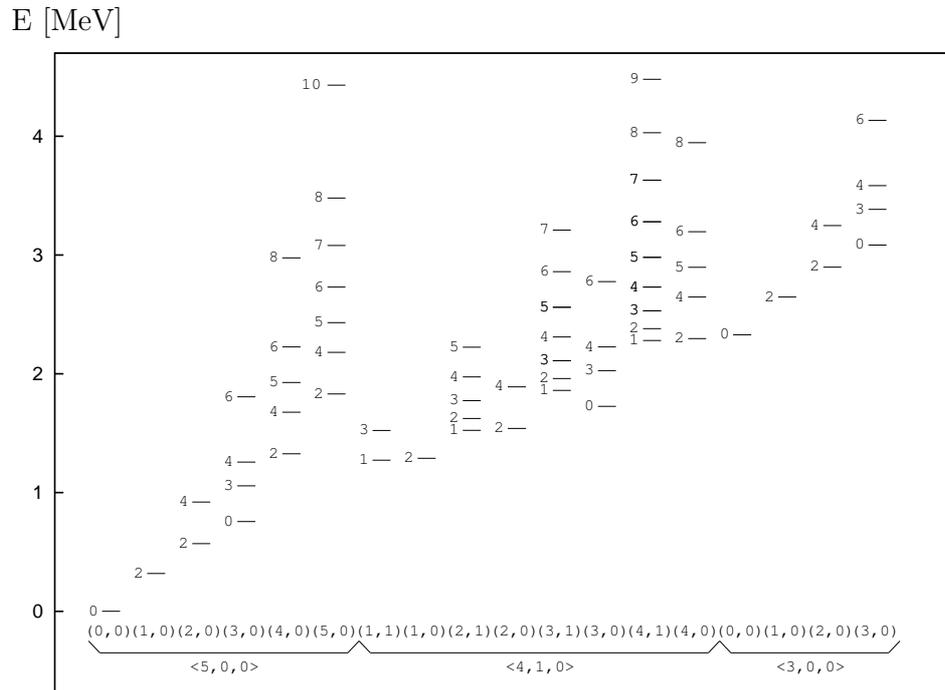


Abbildung 4.8:
 Vollständige $U^B(6) \times U^F(4)$ -Niveaustuktur für $N_b = 4, N_f = 2$ und $\sigma_b = 4$

den CFPs (welche zwar ohne numerischen Fehler berechnet werden können, dann aber in den C-Datentyp double konvertiert werden) usw. Die erreichte Genauigkeit von 10^{-14} ist jedoch mehr als zufriedenstellend. Der Vollständigkeit halber ist auch ein Matrixelement des fermionischen M1-Operators angegeben. Wie erwartet gilt

$$\langle \Psi_1 || O1 || \Psi_2 \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} \langle \Psi_1 || O2 || \Psi_2 \rangle \tag{4.91}$$

In [69] ist ein Diagramm mit einem Teil der Energien für $N_b = 4, N_f = 2$ und $\sigma_b = 4$ gegeben. Abbildung 4.8 zeigt das vollständige Spektrum.

Kapitel 5

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden Systeme identischer Teilchen (Bosonen und Fermionen) vor dem Hintergrund der dynamischen Symmetrien allgemein untersucht. Hierfür wurde ein Computerprogramm (mit Namen „ArbModel“) entwickelt, welches dem Benutzer eine möglichst große Freiheit bei der Festlegung des verwendeten Modells lässt. Dabei wird der Formalismus der zweiten Quantisierung verwendet. Beliebige Erzeuger- bzw. Vernichtoperatoren können definiert und somit die Arten der verwendeten Teilchen (Bosonen oder Fermionen) bzw. die Einteilchenzustände angegeben werden. Je nachdem auf welches physikalische System das Modell angewendet wird, kann eine Beschränkung der Basis, in welcher der Hamiltonian aufgestellt wird, sinnvoll sein. Daher sind eine beliebige Anzahl unterschiedlicher Einschränkungen zugelassen. In der so spezifizierten Basis wird ein beliebiger Hamiltonian (mit beliebigen Ein- und Zweiteilchentermen) aufgestellt und diagonalisiert. Alle Ideen, die für die Entwicklung eines solchen Programms notwendig sind, wurden im Detail erklärt. Zwei der schwierigsten Probleme der Algebra, welche bei der Programmierung auftreten, sind die Berechnung von Verzweigungsregeln und isoskalaren Faktoren. Algorithmen hierzu wurden diskutiert. Als wichtigster Punkt soll der *nicht rekursive* Algorithmus zum Berechnen *beliebiger* isoskalarer Faktoren *ohne numerische Fehler* herausgestellt werden.

Mit Hilfe des Programms ArbModel wurden eine Reihe von Vielteilchensystemen untersucht. Recht erschöpfend wurden Systeme identischer Teilchen behandelt. Der allgemeine Hamiltonian eines solchen Systems hat die Form

$$\hat{H}_g = A \cdot \hat{n}_0 + a_J \cdot \hat{V}^{(J)} \quad (5.1)$$

wobei $J = 0, 2, \dots, 2j$ für Bosonen und $J = 0, 2, \dots, 2j - 1$ für Fermionen gilt. Unter bestimmten Bedingungen kann dieser Hamiltonian zu der Casimirform

$$\hat{H}_C = x_1 \cdot \hat{C}_1[U(n)] + x_2 \cdot \hat{C}_2[U(n)] + x_3 \cdot \hat{C}_2[SO(n)] + x_4 \cdot \hat{C}_2[SO(3)] \quad (5.2)$$

bzw.

$$\hat{H}_C = x_1 \cdot \hat{C}_1[U(n)] + x_2 \cdot \hat{C}_2[U(n)] + x_3 \cdot \hat{C}_2[USp(n)] + x_4 \cdot \hat{C}_2[SU(2)] \quad (5.3)$$

umparametrisiert werden. Ist dies der Fall, so liegt eine dynamische Symmetrie vor. Die Bedingungen hierfür sind (mit $b_J := a_J/\sqrt{2J+1}$)

$$\frac{1}{7} \left[\left(\frac{1}{2}J(J+1) - 3 \right) b_4 - \left(\frac{1}{2}J(J+1) - 10 \right) b_2 \right] = b_J \quad , \quad J = 6, 8, \dots \quad (5.4)$$

Zwei Umstände sind an diesem Ergebnis höchst bemerkenswert. Erstens unterscheiden sich diese Bedingungen nicht für Bosonen und Fermionen. Des Weiteren kommt mit steigendem

Spin jeweils eine neue Bedingung hinzu, die anderen bleiben jedoch erhalten.

$$\begin{aligned}
-11b_2 + 18b_4 - 7b_6 &= 0 && \text{für } j = 3, 4, 5, 6, \dots \text{ und } j = 7/2, 9/2, 11/2, 13/2 \\
-26b_2 + 33b_4 - 7b_8 &= 0 && \text{für } j = 4, 5, 6, \dots \text{ und } j = 9/2, 11/2, 13/2 \\
-45b_2 + 52b_4 - 7b_{10} &= 0 && \text{für } j = 5, 6, \dots \text{ und } j = 11/2, 13/2 \\
-68b_2 + 75b_4 - 7b_{12} &= 0 && \text{für } j = 6, \dots \text{ und } j = 13/2
\end{aligned} \tag{5.5}$$

Eine schwächere Forderung ist diejenige nach Erhaltung der Seniorität. Im Kapitel 3.4 wurden konkrete Bedingungen hergeleitet, die gelten müssen, damit der Hamiltonian mit dem zu der Senioritätsquantenzahl gehörenden Casimiroperator vertauscht.

$$[\hat{H}, \hat{C}_2] = 0 \tag{5.6}$$

Die folgende Liste enthält alle Zweikörperterme, welche die Seniorität nicht brechen.

$$\hat{V}_j^{(0)}, \hat{V}_1^{(2)}, \hat{V}_2^{(2)}, \hat{V}_2^{(4)}, \hat{V}_5^{(4)}, \hat{V}_{3/2}^{(2)}, \hat{V}_{5/2}^{(2)}, \hat{V}_{5/2}^{(4)}, \hat{V}_{7/2}^{(2)}, \hat{V}_{7/2}^{(4)}, \hat{V}_{7/2}^{(6)}$$

Erstaunlich an diesem Ergebnis ist, das $\hat{V}_5^{(4)}$ mit \hat{C}_2 vertauscht. Besteht der Hamiltonian aus mehr als einem Term, müssen folgende Gleichungen erfüllt sein:

$$\begin{aligned}
j = 3 : 11b_2 - 18b_4 + 7b_6 &= 0 \\
j = 4 : 65b_2 - 30b_4 - 91b_6 + 56b_8 &= 0 \\
j = 5 : 3230b_2 - 2717b_6 - 3978b_8 + 3465b_{10} &= 0 \\
j = 6 : 22610b_2 + 4788b_4 - 8099b_6 - 24106b_8 - 23793b_{10} + 28600b_{12} &= 0 \wedge \\
&90440b_2 + 156807b_4 - 409136b_6 + \\
&290666b_8 - 275352b_{10} + 146575b_{12} = 0 \\
j = 9/2 : 65b_2 - 315b_4 + 403b_6 - 153b_8 &= 0 \\
j = 11/2 : 1020b_2 - 3519b_4 + 637b_6 + 4403b_8 - 2541b_{10} &= 0 \\
j = 13/2 : 1615b_2 - 4275b_4 - 1456b_6 + 3196b_8 + 5145b_{10} - 4225b_{12} &= 0 \\
j = 15/2 : 1330b_2 - 2835b_4 - 1807b_6 + 612b_8 + \\
&3150b_{10} + 3175b_{12} - 3625b_{14} = 0 \wedge \\
&77805b_2 - 169470b_4 - 85527b_6 - 4743b_8 + \\
&222768b_{10} + 168025b_{12} - 208858b_{14} = 0
\end{aligned} \tag{5.7}$$

Die Seniorität ist für $j = 7/2$ -Teilchen also immer erhalten. Es sind also alle Quantenzahlen erhalten. Trotzdem kann der allgemeine Hamiltonian nicht als Casimirform geschrieben werden. Es liegt im Allgemeinen also keine dynamische Symmetrie vor. Zustände mit guter Seniorität sind also Eigenzustände des allgemeinen Hamiltonians. Da die Teilchenzahl hier maximal $N = 8$ betragen kann, ist die Anzahl der möglichen Zustände sehr begrenzt. Es wäre also ein lohnendes Projekt, die Energien und Wellenfunktionen explizit analytisch zu berechnen.

Aus den Gleichungen (5.5) und (5.7) folgen erstaunliche Querverbindungen. Nehmen wir z.B. die Bedingungen für die Erhaltung der Seniorität für die beiden Fälle $j = 4$ und $j = 9/2$, so sind diese beiden Gleichungen zusammen äquivalent mit den ersten zwei Gleichungen aus (5.5).

$$\begin{aligned}
65b_2 - 30b_4 - 91b_6 + 56b_8 = 0 & \Leftrightarrow && -11b_2 + 18b_4 - 7b_6 = 0 \\
65b_2 - 315b_4 + 403b_6 - 153b_8 = 0 & && -26b_2 + 33b_4 - 7b_8 = 0
\end{aligned} \tag{5.8}$$

Wir nehmen jetzt den Teilchenspin j als Parameter an und betrachten für alle Systeme den gleichen Hamiltonian (5.1) mit den gleichen Parametern. Dann gilt: Ist die Seniorität für $j = 4$ und $j = 9/2$ erhalten, so sind diese beiden Systeme analytisch lösbar, denn es handelt sich um eine dynamische Symmetrie. Es lassen sich leicht mehrere dieser Verbindungen finden. Ein analoges (aber auch triviales) Beispiel ist $j = 3$. Hier stimmt die Bedingung in Gleichung (5.5)

mit derjenigen in Gleichung (5.7) überein. Es besteht also ein enger Zusammenhang zwischen den Bedingungen für gute Seniorität und denen für die dynamische Symmetrie.

Die Forderung nach partieller Erhaltung der Seniorität ist die schwächste hier untersuchte Forderung. Die gefundenen Fälle befinden sich sozusagen am Rande der Senioritätserhaltung. Betrachtet man die Systeme identischer Teilchen mit steigendem Spin beginnend mit $j = 0$, so ergibt sich folgendes Bild (DS = dynamische Symmetrie, GS = gute Seniorität, PS = partielle Erhaltung der Seniorität):

Spin	ν -Erhaltung	Spin	ν -Erhaltung
0	DS	1/2	DS
1	DS	3/2	DS
2	DS	5/2	DS
3	PS	7/2	GS
4	-	9/2	PS
5	-	11/2	-

Die für Bosonen und Fermionen jeweils ersten Fälle, für welche ν im Allgemeinen gebrochen ist, sind also genau die Fälle, bei denen partielle Erhaltung der Seniorität gefunden wurde. Es ist nicht ausgeschlossen, dass diese Art der Erhaltung auch für höheres j auftritt. Nach Betrachtung obiger Tabelle erscheint dies jedoch unwahrscheinlich. Die partielle Erhaltung der Seniorität markiert also den Übergang von der Erhaltung zur Brechung dieser Quantenzahl. Die Ursache kann hier leider nicht angegeben werden. Es ist denkbar, dass die G_2 -Symmetrie, welche bei f-Bosonen auftritt, hierbei eine Rolle spielt. Bisher ist als Erklärung jedoch nur bekannt, dass sich das Gleichungssystem (3.109) für den entsprechenden Fall lösen lässt. Eine weitergehende Untersuchung dieses Sachverhaltes wäre sicher ein interessantes Projekt. Evtl. würde eine solche Untersuchung auch eine befriedigendere Erklärung liefern.

Eine ähnlich umfangreiche Analyse von Modellen mit unterscheidbaren Teilchen würde den Rahmen dieser Arbeit sprengen. Als weitere Anwendungen für ArbModel wurden zwei unterschiedliche Bereiche behandelt. Mit Hilfe des sd-IBM1 wurden Vorhersagen einer neuen Theorie der Quantenphasenübergänge verifiziert. Diese Theorie verbindet die Ordnung des Phasenübergangs mit der Verteilung der Verzweigungspunkte des Hamiltonians. Da es hier auf die Konvergenz zum Limes $N \rightarrow \infty$ ankommt, wurden sehr hohe Teilchenzahlen von bis zu $N = 10^5$ verwendet. Da sich die Konvergenz als zumindest so langsam herausgestellt hat, dass höhere Teilchenzahlen sinnvoll erscheinen, sind hier entsprechende Untersuchungen wünschenswert. Diese sind aufgrund der Dimension der dabei zu diagonalisierenden Matrix allerdings numerisch sehr aufwendig.

Der aufwendigste Test für das Programm bestand darin, die theoretischen Vorhersagen des Interacting-Boson-Fermion-Fermion-Modells in einer bestimmten dynamischen Symmetrie numerisch zu überprüfen. Für diese Bose-Fermi-Symmetrie wurden die Verzweigungsregeln ausgearbeitet sowie die Auswahlregeln für M1-Übergänge hergeleitet. Die Lage der Energieniveaus, welche sich aus den Eigenwerten der Casimiroperatoren berechnen lässt, entspricht exakt den von ArbModel berechneten. Auch die Auswahlregeln konnten numerisch verifiziert werden ebenso wie die M1-Übergangsstärken. Bei der Ausarbeitung der behandelten dynamischen Symmetrie erwies es sich als sehr bequem, analytische Ergebnisse direkt numerisch überprüfen zu können. Durch die Verfügbarkeit eines flexiblen Programms wird es also möglich, eine rein theoretische Analyse von Modellen mit ihren Symmetrien zu vereinfachen und zu beschleunigen sowie weniger fehleranfällig zu machen.

Die Tatsache, dass ArbModel für alle behandelten Modelle alle analytischen Ergebnisse reproduziert, ist als Beweis für die Korrektheit des Programms anzusehen. Damit steht zum ersten mal ein Computercode zur Verfügung, der für numerische Berechnungen mit den unterschiedlichsten Modellen geeignet ist. Die möglichen Anwendungen sind z.B. das Interacting-Boson-Modell mit allen denkbaren Erweiterungen, welches auf Atomkerne ebenso wie auf Moleküle angewendet werden kann. Selbst auf das Schalenmodell kann dieses Programm angewendet werden, allerdings muss angemerkt werden, dass hierfür bessere und spezialisierte Programme existieren. Die große Stärke von ArbModel besteht darin, einen sehr großen Bereich von

Modellen abzudecken. Außerdem kann die interne Rechengenauigkeit - sollte dies notwendig werden - leicht durch die Verwendung entsprechender Datentypen bzw. Strukturen erhöht werden. Beispielsweise existieren Bibliotheken für Fließkommaberechnungen mit beliebig vielen Dezimalstellen. Die dabei benutzte Tabelle der isoskalaren Faktoren muss nicht neu berechnet werden, da diese ohne numerische Fehler vorliegen. Da der Algorithmus zur Berechnung dieser Tabellen den allgemeinen Fall abdeckt, ist sogar die Verwendung einer anderen Basis bzw. dynamischen Symmetrie für das Aufstellen der Hamiltonmatrix in späteren Versionen denkbar.

Anhang A

Manual for the numerical code

This chapter describes how to use the numerical program. The technical details about the methods used by the program are given in other chapters.

A.1 What the code can do

The code ArbModel can calculate eigenvalues and eigenvectors as well as matrix elements of operators according to the previously calculated eigenstates of a systems of identical and distinguishable particles (bosons and/or fermions) with a given spin. The number of particles can be chosen freely. The most general hamiltonian given in the formalism of second quantization including one and two body terms can be diagonalized. The user is bound to seniorities of identical particles for which a table of isoscalar factors exists on the harddisk. Another restriction is simply the calculation time which depends strongly on the size of the hamiltonian matrix.

A.2 A simple example: sd-IBM1 calculations

In this section a simple example for a sd-IBM1 calculation is given. This model is chosen because of its simplicity. It consists only of two distinguishable particles with positive parity and spin zero and two. The general hamiltonian has only six independent terms. An input file for a calculation of 0^+ - and 2^+ -states including the $B(E2; 2_1^+ \rightarrow 0_1^+)$ will now be discussed in detail line by line. This input file is a simple text file and should be given as an argument to the program when it's started from a command line. The first lines of the input file are:

```
# tell the code where to find the isoscalar factors
FolderOfISF          /somefolder/anotherfolder
```

The first line starts with a `#`, which does nothing else than starting a comment line. The user is free to put as many comments as he wants at any position of the file as long as the comment starts with the first character of the line. The parameter *FolderOfISF* is a string which is the pathname of the folder where the isoscalar factors can be found. There is a special name convention for the file containing isoscalar factors. For example “disf_un05_n07.dat” stands for: double precision isoscalar factors for particles with symmetry $U(5)$ (d-bosons) and states with seniority seven. In the present example the highest seniority for s-bosons is one and for d-bosons ten. Thus there have to be the files disf_un05_n01.dat .. disf_un05_n10.dat and disf_un01_n01.dat.

The specification of the model starts with the number of distinguishable particles.

```
# the model:
ParticleTypeNumber    2
```

For spdf-IBM1 or sd-IBM2 this number would be four and for sgd-IBM1 there would be three types of particles. The two particle types of the sd-IBM1 are usually called *s* and *d*.

```
ParticleTypeNames      s      d
```

These names are completely arbitrary strings of arbitrary length. The particle names will be used later to give the hamiltonian and other operators explicitly in terms of creation and annihilatoin operators. The program needs to know the parities as well as the spins of the particles.

```
ParticleTypeParities   1      1
ParticleTypeSymmetries 1      5
```

The parity can be either 1 or -1 . The spin is given by the number of projections, i.e. the number of magnetic substates. An odd number corresponds always to a boson and an even number to a fermion always.

In the next two lines the restrictions of the basis are defined.

```
ParticleTypeMaxNums    -1     -1
ParticleTypeSeniorities -1    -1
```

A -1 means that there is no restriction. For an sgd-IBM1 calculation it can be useful to restrict the number of g-bosons. If the hamiltonian conservs seniority for one or more particle types a restriction of the seniority will result in a much smaller dimension of the hamiltonian which will decrease the calculation time significantly.

In this example the user is interested in 0^+ and 2^+ states with total particle number of 10. Thus the code has to calculate two hamiltonian matrices (one for spin zero and one for spin two). Both sets of states have positive parity.

```
# the states to calculate:
TotalParticleNumber    10
TotalSpin               0  4
TotalParity             1  1
```

There is only one total particle number for all calculations. The angular momenta are given in units of $\hbar/2$. The number of spins determines the number of calculations and the number of parities has to be the same. If the dimension of the hamiltonian is large, one is usually interested in the first low lying states of each spin. Because of this there is the parameter *NumberOfStatesToCalc*. A -1 means, that all eigenvalues will be calculated.

```
NumberOfStatesToCalc  -1  -1
```

It is possible to use a different hamiltonian for each calculation.

```
UseHamiltonian        H1  H1
```

The names of the hamiltonians are strings which can be choosen freely. The explicit form of these hamiltonians has to be given later. Several methods are available to perform the diagonalization. The parameter *DiagMethod* can be used to specify one method for each calculation.

```
# tell the code which diagonalisation it should use
DiagMethod             1  1
```

There are several parameters which control the output on the screen. The parameters are more or less self-explanatory except *VerboseLevel*. If it is set to a value bigger than zero, the user will get additional information during the calculation process which is helpful only for real experts.

```
# tell the code what to print out
PrintBasis             y  y
PrintEigenvalues       y  y
PrintEigenvectors      n  n
PrintInputsummary      n
VerboseLevel           0
```

In this example the user is interested in the $B(E2; 2_1^+ \rightarrow 0_1^+)$ value. A definition of an operator is done by putting an O as the first character of a line.

```
# definition of some operatos
0 E2 s + d ~ 4 1.0 d + s ~ 4 1.0
```

The second string is just a freely chosen name for the operator. The last line defines the E2-operator as $T(E2) := 1.0 \cdot (s^\dagger \times \tilde{d})^{(4/2)} + 1.0 \cdot (d^\dagger \times \tilde{s})^{(4/2)}$. Again all angular momenta are given in units of $\hbar/2$. There is no limit in the number of terms. The next task is to specify which matrix elements of the previously defined operator which will be calculated.

```
M 2 1 E2 1 1
```

The character M at the beginning of a line stands for “matrix element to calculate”. The first two numbers determine the bra-state, the last two numbers the ket-state. A state is specified by giving the number of the calculation and the number of the eigenstate of that calculation. In this example the first calculation is for 0^+ states and the second one for 2^+ states. Thus $2\ 1$ means the 2_1^+ state and $1\ 1$ means the 0_1^+ state. Between the two states the name of the operator is given. The output will be the reduced matrix element which is defined like in [10]. The last thing to do is to define the hamiltonian. This is done by giving one term in each line (one-body or two-body). These terms are added internally to get the final hamiltonian operator. The first character of such a line has to be a H followed by the name of the hamiltonian. These names refer to the ones which were given by the parameter *UseHamiltonian* before.

```
# the hamiltonian
H H1 d + d ~ 0.5
H H1 s + d ~ s + d ~ 4 -2.236e-01
H H1 s + d ~ d + s ~ 4 -2.236e-01
H H1 d + s ~ s + d ~ 4 -2.236e-01
H H1 d + s ~ d + s ~ 4 -2.236e-01
```

This defines the hamilton operator as

$$\begin{aligned}
 H := & 0.5(d^\dagger \times \tilde{d})^{(0)} - 0.2236[(s^\dagger \times \tilde{d})^{(4/2)} \times (s^\dagger \times \tilde{d})^{(4/2)}]^{(0)} - \\
 & 0.2236[(s^\dagger \times \tilde{d})^{(4/2)} \times (d^\dagger \times \tilde{s})^{(4/2)}]^{(0)} - 0.2236[(d^\dagger \times \tilde{s})^{(4/2)} \times (s^\dagger \times \tilde{d})^{(4/2)}]^{(0)} - \\
 & 0.2236[(d^\dagger \times \tilde{s})^{(4/2)} \times (d^\dagger \times \tilde{s})^{(4/2)}]^{(0)} \quad (\text{A.1})
 \end{aligned}$$

It is also possible to give two-body terms where first the two creation operators are coupled together and then two annihilation operators attached. This would be done by a line like:

```
H H1 s + d + s ~ d ~ 4 0.3
```

The user has to ensure by his own that all operators are hermitian. The output of this example would be the two bases for the 0^+ and for the 2^+ calculation and the two sets of eigenvalues (energies). The code gives the absolute energies always, i.e. the pure eigenvalues from the diagonalization.

A.3 Input file reference

Every line of the input file has to be either empty or to start with one of the strings which will be explained in detail now. There must be always least one blank character (space) after one of these command strings. The user may add as many space characters (or tabulators) as he likes after the parameter name or between the arguments.

- `#`
The whole line is treated as a comment.

- *FolderOfISF*
Gives the folder where the tables of isoscalar factors can be found.
Example: `FolderOfISF /somefolder/anotherfolder`
- *ParticleTypeNumber*
The argument to this parameter is one integer bigger than zero which gives the number of distinguishable particles of the model.
Example: `ParticleTypeNumber 2`
- *ParticleTypeNames*
The parameter *ParticleTypeNumber* must be given before the code excepts this parameter. The user has to give as many freely chosen strings here as there are distinguishable particles of the model. These strings will be treated as names for the different particle types. They can be used to give the hamiltonian as well as other operators. The strings for the names can be of any length.
Example: `ParticleTypeNames a b particle3 proton`
- *ParticleTypeParities*
As *ParticleTypeNames* but here integers of either 1 or -1 have to be given.
Example: `ParticleTypeParities 1 -1 1 -1`
- *ParticleTypeSymmetries*
The arguments of this parameter determines the spins of all particles of the model. As the name of the parameter suggests, the spin is given indirectly by the symmetry of the particle. A particle with spin j (integer or half integer) is related to the symmetry $U(n)$ with $n = 2j + 1$. The arguments are exactly the dimension of the symmetry groups which are integer and bigger than zero. The following example declares the first particle as a $j = 3/2$ fermion and the second one as a d-boson.
Example: `ParticleTypeSymmetries 4 5`
- *ParticleTypeMaxNums*
It is possible to restrict the maximum number of each particle with this parameter. The code takes this restriction into account during the construction of the quantum numbers of the basis states. If a -1 for some particle is given, then the maximum number for that particle will be the total particle number of the basis states (see *TotalParticleNumber*). If a (integer) number $k \geq 0$ is given, then the allowed particle number is $0, \dots, k$. The example gives no boundary for the first and third particle, but there can be only 0,1,2 or 3 particles of the second type.
Example: `ParticleTypeMaxNums -1 3 -1`
- *ParticleTypeSeniorities*
As *ParticleTypeMaxNums* but the seniorities given here will fix the seniorities to exactly one value. This is useful for example for seniority conserving hamiltonians. Again a -1 means that there is no restriction. The seniorities are, of course, integer numbers bigger than or equal zero.
Example: `ParticleTypeSeniorities -1 -1 0`
- *BasisLimit*
Using this parameter it is possible to give more specific restrictions to the basis, with this parameter for example one can restrict the sum of the particle numbers of two or more particle types to some integer number. Suppose the model has five distinguishable particles. Then there have to be five integers number as arguments followed by either a “=” or a “<=” followed again by an integer.
Example: `Basislimit 0 1 0 2 1 <= 10`
This example would restrict the basis in the following way:
 $0n_1 + 1n_2 + 0n_3 + 2n_4 + 1n_5 \leq 10$ where n_i is the particle number of the i -th particle

type. For example this is useful to restrict the number of negative parity bosons for a spdf-IBM1 calculation. There can be as many of such restrictions as needed.

- *TotalParticleNumber*
Example: `TotalParticleNumber 12`
This would set the total particle number of the basis vectors to 12. Exactly one particle number must be given. It is possible to do several calculations with one input file. The example calculates all 0^+ and all 2^+ states but the total particle number will be fixed for all calculations.
- *TotalSpin*
Here the user can give a list of angular momenta in units of $\hbar/2$. The hamiltonian matrix will be constructed for each of these angular momenta.
Example: `TotalSpin 0 4`
This would calculate states with angular momenta 0 and 2.
- *TotalParity*
As *TotalSpin* but for the parity of each calculation. All parities must be either 1 or -1 and the number of parities has to be the same as the number of given angular momenta with the parameter *TotalSpin*.
Example: `TotalParity 1 -1`
- *NumberOfStatesToCalc*
See also *TotalSpin* and *TotalParity*. For each calculation, i.e. for each given total spin and parity, a number of states has to be given. The code will calculate for each J^π always the lowest number of states which is specified here. All states can be calculated with a -1 . The number of arguments to this parameter has to be the same as for *TotalSpin* and *TotalParity*.
Example: `NumberOfStatesToCalc -1 5`
- *UseHamiltonian*
See also *TotalSpin*, *TotalParity* and *NumberOfStatesToCalc*. The code expects for each calculation one string as arguments to this parameter. These strings can be chosen freely and are just names of hamiltonians. These names can be the same if only one hamiltonian is used. For each name the user has to give one hamiltonian explicitly in the formalism of second quantization. For a more detailed explanation see *H*.
Example: `UseHamiltonian H1 H2`
- *WriteHamiltToFile*
This parameter is needed to perform a normal calculation. If it is given the arguments are filenames (one for each calculation). The hamilton matrix will be written to these files. The format will be the old Yale Sparse matrix format in ascii (see chapter 2.10 for an introduction)
Example: `WriteHamiltToFile h1.txt h2.txt`
- *DiagMethod*
Different algorithms for diagonalization are available. It depends on several properties of the hamiltonian matrix which one is suited best. The user has to choose one for each calculation by giving either a 1 or a 2.
Example: `DiagMethod 2 1`
- *PrintBasis*
For each calculation it is possible to specify if the corresponding basis will be printed out or not. This is done by using arguments "y" for "yes" and "n" for "no". See also *PrintEigenvalues* and *PrintEigenvectors*.
Example: `PrintBasis y n`

- *PrintEigenvalues*

The same as *PrintBasis* but for the eigenvalues. See also *PrintEigenvectors*.

Example: `PrintEigenvalues y y`

- *PrintEigenvectors*

Like *PrintBasis* and *PrintEigenvalues* but for the eigenvectors.

Example: `PrintEigenvectors n n`

- *PrintInputsummary*

If the argument of this parameter is "y", then an input summary will be printed out. The user has to give a "y" for "yes" or a "n" for "no".

Example: `PrintInputsummary y`

- *VerboseLevel*

There has to be one integer argument which must be 0, 1 or 2. If 0 is given, there will be a low number of additional informations given during the calculations. The verbosity increases for higher numbers. The given informations are helpful for real experts only.

Example: `VerboseLevel 0`

- *O*

Definitions of for example transition operators are done with the parameter "O". The operator may have as many terms as needed but they all must be one body terms. The first argument is an arbitrary string which is just a name. When specifying matrix elements which should be calculated one has to refer these names (see also *M*). The Example defines an operator $T2 := 0.4 \cdot (s^\dagger \times \tilde{d})^{(2)} + 0.4 \cdot (d^\dagger \times \tilde{s})^{(2)}$.

Again, all angular momenta are in units of $\hbar/2$. Example: `O E2 s + d ~ 4 0.4 d + s ~ 4 0.4`

- *M*

A line beginning with an "M" is used to specify a reduced matrix element of a previously defined operator which should be calculated (see also *O*). There can be as many of such lines in the input file as needed. The example tells the program to calculate two reduced matrix elements. The first one is the reduced matrix element of the operator with name "T2" with respect to the third state of the first calculation and the second state of the fourth calculation. The second matrix element is of the same operator but for the second state of the second calculation and the second state of the fourth calculation.

Example:

```
M 1 3 T2 4 2
M 2 2 T2 4 2
```

- *H*

Each line which starts with an "H" gives a one or a two body term of a hamiltonian. All of these terms will be added to get the final hamilton operator(s). The first argument must be the name of the hamiltonian (see also *UseHamiltonian*). The user has to ensure by himself that the hamiltonian is hermitian. The number of arguments differs for one and two body terms.

– one body terms:

The example gives a one body term $0.5 \cdot (d^\dagger \times \tilde{d})^{(0)}$ for the hamiltonian with the name "H3". Example: `H H3 d + d ~ 0.5`

– two body terms:

The first example gives a two body term

$-2.2 \cdot [(s^\dagger \times \tilde{d})^{(2)} \times (s^\dagger \times \tilde{d})^{(2)}]^{(0)}$ for the hamiltonian with the name "name1" and the second one $0.3 \cdot [(s^\dagger \times \tilde{s})^{(2)} \times (d^\dagger \times \tilde{d})^{(2)}]^{(0)}$ for "H1". If the names are the same, the terms will be added.

Example1: H name1 s + d ~ s + d ~ 4 -2.2
Example2: H H1 s + s + d ~ d ~ 0 0.3

Anhang B

Die Berechnung von 3j-, 6j- und 9j-Symbolen

Im Anhang von [72] finden sich FORTRAN Programme zur Berechnung von Wigner 3j-, 6j- und 9j-Symbolen. Das Programm ArbModel berechnet alle benötigten Wigner-Koeffizienten mit diesen Algorithmen. Für die Berechnung der Wigner-Symbole werden folgende Formeln verwendet:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} &= \delta(m_1 + m_2, m_3) \times \\ &(((j_1 + j_2 - j_3)!(j_2 + j_3 - j_1)!(j_3 + j_1 - j_2)!)/(j_1 + j_2 + j_3 + 1)!)^{1/2} \times \\ &((j_1 + m_1)!(j_1 - m_1)!(j_2 + m_2)!(j_2 - m_2)!(j_3 + m_3)!(j_3 - m_3)!)^{1/2} \times \\ &\sum_t (-1)^{j_1 - j_2 - m_3 + t} (t!(j_1 + j_2 - j_3 - t)!(j_3 - j_2 + m_1 + t)! \times \\ &(j_3 - j_1 - m_2 + t)!(j_1 - m_1 - t)!(j_2 + m_2 - t)!)^{-1} \quad (\text{B.1}) \end{aligned}$$

wobei gilt: $(-n)! = \infty$ falls $n > 0$, $t \in \mathbb{N}$, $t \geq 0$, $j_1 + j_2 - j_3 \geq t$, $-j_3 + j_2 - m_1 \leq t$, $-j_3 + j_1 + m_2 \leq t$, $j_1 - m_1 \geq t$ und $j_2 + m_2 \geq t$. Für ein beliebiges 6j-Symbol ist ebenfalls ein geschlossener Ausdruck bekannt.

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{Bmatrix} &= \Delta(j_1, j_2, j_3) \Delta(j_1, j_5, j_6) \Delta(j_4, j_2, j_6) \Delta(j_4, j_5, j_3) \times \\ &\sum_t (-1)^t (t + 1)! [(t - j_1 - j_2 - j_3)!(t - j_1 - j_5 - j_6)! \times \\ &(t - j_4 - j_2 - j_6)!(t - j_4 - j_5 - j_3)!(j_1 + j_2 + j_4 + j_5 - t)! \times \\ &(j_2 + j_3 + j_5 + j_6 - t)!(j_3 + j_1 + j_6 + j_4 - t)!]^{-1} \quad (\text{B.2}) \end{aligned}$$

wobei gilt: $\Delta(a, b, c) = [(a + b - c)!(b + c - a)!(c + a - b)!/(a + b + c + 1)!]^{1/2}$ und die Bedingung, dass die Fakultät keine negativen Argumente enthält. Für Wigner 9j-Symbole existiert ebenfalls ein geschlossener Ausdruck, der aber auf 6j-Symbolen basiert.

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix} &= \\ &\sum_{J'} (-1)^{2J'} (2J' + 1) \begin{Bmatrix} j_1 & j_3 & J_{13} \\ J_{24} & J & J' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_2 & j_4 & J_{24} \\ j_3 & J' & J_{34} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J_{12} & J_{34} & J \\ J' & j_1 & j_2 \end{Bmatrix} \quad (\text{B.3}) \end{aligned}$$

Im Rahmen dieser Arbeit wurden diese FORTRAN Programme in die Programmiersprache C/C++ übersetzt. Außerdem wurden einige Anpassungen an den Algorithmen vorgenommen, so dass eine Berechnung der Wigner-Symbole in der Darstellung $\pm\sqrt{n_1/n_2}$ mit $n_1, n_2 \in \mathbb{N}$ erfolgt. Diese Anpassung war nötig, da diese Koeffizienten für die Berechnung der CFPs (siehe Kapitel 2.7) ohne numerische Fehler ebenfalls ohne numerische Fehler vorliegen müssen.

Anhang C

Nebenrechnungen

C.1 Zweikörperterme identischer Teilchen

Es existieren zwei gebräuchliche Formen, um einen Zweiteilchenoperator im Formalismus der zweiten Quantisierung auszudrücken. Durch Umkoppeln können beide Formen ineinander umgerechnet werden. Da ArbModel intern nur eine der beiden Formen verwendet, ist hier die Umrechnung im Detail gegeben. Im Inputfile des Programms sind beide Möglichkeiten erlaubt. Wir wollen Operatoren der Form

$$\left[(c_j^\dagger \times \tilde{c}_j)^{(k)} \times (c_j^\dagger \times \tilde{c}_j)^{(k)} \right]^{(0)} \quad (\text{C.1})$$

durch solche der Form

$$\left[(c_j^\dagger \times c_j^\dagger)^{(J)} \times (\tilde{c}_j \times \tilde{c}_j)^{(J)} \right]^{(0)} \quad (\text{C.2})$$

ausdrücken, denn diese Form wird vom Programm intern verwendet. Aufgrund der Kommutator- bzw. Antikommutatorrelation der elementaren Erzeuger und Vernichter entsteht außerdem ein Einkörperterm sowie eine Phase vor den Zweikörpertermen.

$$\begin{aligned} & \underbrace{\left[(c_j^\dagger \times \tilde{c}_j)^{(k)} \times (c_j^\dagger \times \tilde{c}_j)^{(k)} \right]^{(0)}}_{=:\hat{O}} = \\ & \underbrace{\sum_J (-)^q \begin{Bmatrix} j & j & k \\ j & j & k \\ J & J & 0 \end{Bmatrix}}_{=:\hat{O}_2} \underbrace{\left[(c_j^\dagger \times c_j^\dagger)^{(J)} \times (\tilde{c}_j \times \tilde{c}_j)^{(J)} \right]^{(0)}}_{=:\hat{V}^{(J)}} + \underbrace{F \cdot (c^\dagger \times \tilde{c})^{(0)}}_{=:\hat{O}_1} \quad (\text{C.3}) \end{aligned}$$

Wir betrachten zunächst nur den Zweikörperterm \hat{O}_2 . Durch Anwendung von (D.23) erhalten wir

$$\hat{O}_2 = (-)^q \sum_J (2k+1)(2J+1) \begin{Bmatrix} j & j & k \\ j & j & k \\ J & J & 0 \end{Bmatrix} \hat{V}^{(J)} \quad (\text{C.4})$$

Das 9j-Symbol lässt sich mit Hilfe von (D.24) zu einem 6j-Symbol reduzieren

$$\hat{O}_2 = (-)^q \sum_J (2k+1)(2J+1) \frac{(-)^{j+k+j+J}}{\sqrt{(2J+1)(2k+1)}} \begin{Bmatrix} j & j & k \\ j & j & J \end{Bmatrix} \hat{V}^{(J)} \quad (\text{C.5})$$

J kann nur gerade ganzzahlige Werte annehmen, denn wir koppeln identische Teilchen bzw. deren Erzeuger und Vernichter. Daher können wir J im Exponenten der Phase weglassen.

$$\hat{O}_2 = (-)^q \sum_J (-)^{2j+k} \sqrt{(2k+1)(2J+1)} \begin{Bmatrix} j & j & k \\ j & j & J \end{Bmatrix} \hat{V}^{(J)} \quad (\text{C.6})$$

Um (D.27) und (D.28) benutzen zu können, wenden wir noch (D.26) an und schreiben das $6j$ -Symbol etwas um.

$$\hat{O}_2 = (-)^q \sum_J (-)^{2j+k} \sqrt{(2k+1)(2J+1)} \begin{Bmatrix} j & j & J \\ j & j & k \end{Bmatrix} \hat{V}^{(J)} \quad (\text{C.7})$$

Mit Hilfe von (D.27) und (D.28) ergibt sich

$$\hat{O}_2 = (-)^q \sum_J \frac{\sqrt{2J+1}}{2j+1} \hat{V}^{(J)} \quad , \text{ für } k=0 \quad (\text{C.8})$$

$$\hat{O}_2 = (-)^q \sum_J \sqrt{3} \sqrt{2J+1} \frac{2j(j+1) - J(J+1)}{2j(j+1)(2j+1)} \hat{V}^{(J)} \quad , \text{ für } k=1 \quad (\text{C.9})$$

Um den Faktor F vor \hat{O}_1 zu berechnen, gehen wir anders vor. Wir entkoppeln \hat{O} und wenden die Antikommutator- bzw. Kommutatorrelation der elementaren Erzeuger und Vernichter an.

$$\hat{O} = \sum_{m_1, m_2} \langle k, m_1, k, m_2 | 00 \rangle (c^\dagger \times \tilde{c})_{m_1}^{(k)} (c^\dagger \times \tilde{c})_{m_2}^{(k)} \quad (\text{C.10})$$

Die Summe enthält nur Terme mit $m_1 + m_2 = 0$. Daher können wir $m_2 = -m_1$ setzen und wir benutzen außerdem (D.33).

$$\hat{O} = \sum_{m_1} \frac{(-)^{k-m_1}}{\sqrt{2k+1}} (c^\dagger \times \tilde{c})_{m_1}^{(k)} (c^\dagger \times \tilde{c})_{-m_1}^{(k)} \quad (\text{C.11})$$

Jetzt entkoppeln wir weiter.

$$\hat{O} = \sum_{\substack{m_1, m_3, m_4 \\ m_5, m_6}} \frac{(-)^{k-m_1}}{\sqrt{2k+1}} \times \langle j, m_3, j, m_4 | k, m_1 \rangle \langle j, m_5, j, m_6 | k, -m_1 \rangle c_{j, m_3}^\dagger \tilde{c}_{j, m_4} c_{j, m_5}^\dagger \tilde{c}_{j, m_6} \quad (\text{C.12})$$

Wir benutzen jetzt (D.4) und interessieren uns im Folgenden nur noch für den Einkörperterm (den Zweikörperterm haben wir weiter oben schon berechnet).

$$\hat{O}_1 = \sum_{\substack{m_1, m_3, m_4 \\ m_5, m_6}} \frac{(-)^{k-m_1+j+m_4}}{\sqrt{2k+1}} \times \langle j, m_3, j, m_4 | k, m_1 \rangle \langle j, m_5, j, m_6 | k, -m_1 \rangle c_{j, m_3}^\dagger \tilde{c}_{j, m_6} \delta_{-m_4, m_5} \quad (\text{C.13})$$

(D.30) erlaubt es uns, die Clebsche als $3j$ -Symbole zu schreiben. Außerdem setzen wir aufgrund der Deltafunktion $m_4 = -m_5$.

$$\hat{O}_1 = \sum_{\substack{m_1, m_3 \\ m_5, m_6}} (-)^{k-m_1+j-m_5} \sqrt{2k+1} \times \begin{pmatrix} j & j & k \\ m_3 & -m_5 & -m_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & j & k \\ m_5 & m_6 & m_1 \end{pmatrix} c_{j, m_3}^\dagger \tilde{c}_{j, m_6} \quad (\text{C.14})$$

Es muss gelten $-m_3 = m_1 - m_5$, alle anderen Terme sind Null. Im Exponenten der Phase könne wir also setzen $-m_1 - m_5 = -m_3 - 2m_1$ und $2m_1$ weglassen, da m_1 hier ganzzahlig ist. Außerdem verwenden wir (D.31) um die $3j$ -Symbole etwas umzuschreiben.

$$\hat{O}_1 = \sum_{\substack{m_1, m_3 \\ m_5, m_6}} (-)^{k+j-m_3} \sqrt{2k+1} \begin{pmatrix} j & k & j \\ m_5 & m_1 & -m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & k & j \\ m_5 & m_1 & m_6 \end{pmatrix} c_{j, m_3}^\dagger \tilde{c}_{j, m_6} \quad (\text{C.15})$$

Die Summe enthält nur Terme mit $-m_3 = m_6$. Dann kommt die Orthogonalitätsrelation (D.32) zum Einsatz.

$$\hat{O}_1 = \sum_{m_3} (-)^{k+j-m_3} \frac{\sqrt{2k+1}}{2j+1} c_{j, m_3}^\dagger \tilde{c}_{j, -m_3} \quad (\text{C.16})$$

Um (D.35) benutzen zu können, müssen wir noch etwas mit der Phase spielen.

$$\hat{O}_1 = \sum_{m_3} (-)^{k+j+m_3+q} \frac{\sqrt{2k+1}}{2j+1} c_{j,m_3}^\dagger \tilde{c}_{j,-m_3} \quad (\text{C.17})$$

Zuletzt wenden wir noch (D.35) an. Im Exponenten der Phase steht dann $k+2j+q$. $2j+q$ ist aber immer gerade und kann daher weggelassen werden.

$$\hat{O}_1 = (-)^k \sqrt{\frac{2k+1}{2j+1}} (c^\dagger \times \tilde{c})^{(0)} \quad (\text{C.18})$$

C.2 Allgemeine Zweikörperterme

Wie schon im Falle der Zweikörperterme für identische Teilchen (siehe Abschnitt C.1) existieren zwei Formen für Zweikörperterme unterscheidbarer Teilchen. ArbModel verwendet intern nur eine der beiden Darstellungen, weshalb hier die Umrechnung im Detail gegeben ist. Im Inputfile sind jedoch beide Möglichkeiten erlaubt. Wir möchten Operatoren der Form

$$\left[(c_{n_1 j_1}^\dagger \times \tilde{c}_{n_2 j_2})^{(k)} \times (c_{n_3 j_3}^\dagger \times \tilde{c}_{n_4 j_4})^{(k)} \right]^{(0)} \quad (\text{C.19})$$

ausdrücken durch solche der Form

$$\hat{V}_{n_1 j_1, n_3 j_3, n_2 j_2, n_4 j_4}^{(J)} := \left[(c_{n_1 j_1}^\dagger \times c_{n_3 j_3}^\dagger)^{(J)} \times (\tilde{c}_{n_2 j_2} \times \tilde{c}_{n_4 j_4})^{(J)} \right]^{(0)} \quad (\text{C.20})$$

Falls $n_2 = n_3$ und $j_1 = j_4$ gilt, ist außerdem noch ein Einkörperterm nötig.

$$\begin{aligned} & \underbrace{\left[(c_{n_1 j_1}^\dagger \times \tilde{c}_{n_2 j_2})^{(k)} \times (c_{n_3 j_3}^\dagger \times \tilde{c}_{n_4 j_4})^{(k)} \right]^{(0)}}_{=: \hat{O}} = \\ & \underbrace{\sum_J (-)^q \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & k \\ j_3 & j_4 & k \\ J & J & 0 \end{bmatrix}}_{=: \hat{O}_2} \hat{V}_{n_1 j_1 n_3 j_3 n_2 j_2 n_4 j_4}^{(J)} + \underbrace{F \cdot (c_{n_1 j_1}^\dagger \times \tilde{c}_{n_4 j_4})^{(0)}}_{=: \hat{O}_1} \delta_{n_2, n_3} \quad (\text{C.21}) \end{aligned}$$

Wir behandeln zuerst den Zweikörperterm. Mittels Gleichung (D.23) erhalten wir

$$\hat{O}_2 = \sum_J (-)^q (2k+1)(2J+1) \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & k \\ j_3 & j_4 & k \\ J & J & 0 \end{Bmatrix} \hat{V}_{n_1 j_2 n_3 j_3 n_2 j_2 n_4 j_4}^{(J)} \quad (\text{C.22})$$

Jetzt benutzen wir (D.24) um das 9j-Symbol durch ein 6j-Symbol auszudrücken.

$$\hat{O}_2 = \sum_J (-)^q (2k+1)(2J+1) \frac{(-)^{j_2+k+j_3+J}}{\sqrt{(2k+1)(2J+1)}} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & k \\ j_4 & j_3 & J \end{Bmatrix} \hat{V}_{n_1 j_2 n_3 j_3 n_2 j_2 n_4 j_4}^{(J)} \quad (\text{C.23})$$

Um z.B. Gleichung (D.27) benutzen zu können, verwenden wir (D.26).

$$\hat{O}_2 = (-)^q \sum_J (-)^{j_2+j_3+k+J} \sqrt{(2k+1)(2J+1)} \begin{Bmatrix} j_4 & j_2 & J \\ j_1 & j_3 & k \end{Bmatrix} \hat{V}_{n_1 j_2 n_3 j_3 n_2 j_2 n_4 j_4}^{(J)} \quad (\text{C.24})$$

Den Einkörperterm zu berechnen ist etwas komplizierter. Zuerst entkoppeln wir den Operator.

$$\begin{aligned} \hat{O} &= \sum_{M_1, M_2} \langle k, M_1, k, M_2 | 0, 0 \rangle (c_{n_1 j_1}^\dagger \times \tilde{c}_{n_2 j_2})_{M_1}^{(k)} (c_{n_3 j_3}^\dagger \times \tilde{c}_{n_4 j_4})_{M_2}^{(k)} \\ &= \sum_{M_1} \frac{(-)^{k-M_1}}{\sqrt{2k+1}} (c_{n_1 j_1}^\dagger \times \tilde{c}_{n_2 j_2})_{M_1}^{(k)} (c_{n_3 j_3}^\dagger \times \tilde{c}_{n_4 j_4})_{-M_1}^{(k)} \quad (\text{C.25}) \end{aligned}$$

Jetzt entkoppeln wir noch den Rest.

$$\hat{O} = \sum_{\substack{M_1, m_1, m_2 \\ m_3, m_4}} \frac{(-)^{k-M_1}}{\sqrt{2k+1}} \times \\ \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | k, M_1 \rangle \langle j_3, m_3, j_4, m_4 | k, -M_1 \rangle c_{n_1 j_1 m_1}^\dagger \tilde{c}_{n_2 j_2 m_2} c_{n_3 j_3 m_3}^\dagger \tilde{c}_{n_4 j_4 m_4} \quad (\text{C.26})$$

Falls $n_2 = n_3$ (falls diese beiden Teilchen identisch sind), so erhalten wir einen Einkörperterm, nachdem wir die Kommutator- bzw. Antikommutatorrelation (D.4) angewendet haben.

$$\hat{O}_1 = \sum_{\substack{M_1, m_2, m_3 \\ m_3, m_4}} \frac{(-)^{k-M_1+j_3+m_2}}{\sqrt{2k+1}} \times \\ \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | k, M_1 \rangle \langle j_3, m_3, j_4, m_4 | k, -M_1 \rangle c_{n_1 j_1 m_1}^\dagger \tilde{c}_{n_4 j_4 m_4} \delta_{-m_2, m_3} \quad (\text{C.27})$$

Wegen der δ -Funktion setzen wir $-m_2 = m_3$. Außerdem drücken wir die Clebsch-Gordan-Koeffizienten durch 3j-Symbole aus und modifizieren die entstehende Phase ein wenig.

$$\hat{O}_1 = \sum_{\substack{M_1, m_1 \\ m_3, m_4}} (-)^{k+j_2-m_1} \sqrt{2k+1} \times \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & k \\ m_1 & -m_3 & -M_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_3 & j_4 & k \\ m_3 & m_4 & M_1 \end{pmatrix} c_{n_1 j_1 m_1}^\dagger \tilde{c}_{n_4 j_4 m_4} \quad (\text{C.28})$$

Jetzt benutzen wir Gleichung (D.31), um die Argumente der 3j-Symbole umzusortieren.

$$\hat{O}_1 = \sum_{\substack{M_1, m_1 \\ m_3, m_4}} (-)^{k+j_2-m_1} \sqrt{2k+1} \times \begin{pmatrix} j_3 & k & j_1 \\ m_3 & M_1 & -m_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_3 & k & j_4 \\ m_3 & M_1 & m_4 \end{pmatrix} c_{n_1 j_1 m_1}^\dagger \tilde{c}_{n_4 j_4 m_4} \quad (\text{C.29})$$

Nun benutzen wir die Orthogonalitätsrelation (D.32). Der gesamte Term ist gleich Null genau dann wenn $j_1 \neq j_4$.

$$\hat{O}_1 = \sum_{m_1} (-)^{k+j_3-m_1} \frac{\sqrt{2k+1}}{2j_1+1} c_{n_1, j_1, m_1}^\dagger \tilde{c}_{n_4, j_4, -m_1} \delta_{j_1, j_4} \\ = \sum_{m_1} (-)^{k+j_3+m_1+q} \frac{\sqrt{2k+1}}{2j_1+1} c_{n_1, j_1, m_1}^\dagger \tilde{c}_{n_4, j_4, -m_1} \delta_{j_1, j_4} \quad (\text{C.30})$$

Aufgrund der δ -Funktion setzen wir $j_1 = j_4$ und benutzen (D.35).

$$\hat{O}_1 = (-)^{k+j_3+q} (-)^{j_1} \sqrt{2j_1+1} \frac{\sqrt{2k+1}}{2j_1+1} (c_{n_1 j_1}^\dagger \times \tilde{c}_{n_4 j_4})^{(0)} \quad (\text{C.31})$$

So erhalten wir das finale Ergebnis, dass der Einkörperterm ungleich Null ist genau dann, wenn $j_1 = j_4$ und $n_2 = n_3$ und seine Form ist:

$$\hat{O}_1 = (-)^{k+j_1+j_3+q} \frac{\sqrt{2k+1}}{\sqrt{2j_1+1}} (c_{n_1 j_1}^\dagger \times \tilde{c}_{n_4 j_4})^{(0)} \quad (\text{C.32})$$

C.3 Der Kommutator $[\hat{V}^{(J)}, \hat{V}^{(0)}]$

Für die Herleitungen in Kapitel 3.4 wird ein Ausdruck für den Kommutator $[\hat{V}^{(J)}, \hat{V}^{(0)}]$ benötigt. Dieser Ausdruck wird in diesem Abschnitt hergeleitet. Bei der Herleitung des Kommutators

taucht ein Term der Form $\tilde{c}_{m_1} \tilde{c}_{m_2} c_{m_3}^\dagger c_{m_4}^\dagger$ auf, welchen wir zunächst durch Anwendung der Kommutatorrelationen für die elementaren Erzeuger- und Vernichtoperatoren umformen.

$$\begin{aligned}
& \tilde{c}_{m_1} \tilde{c}_{m_2} c_{m_3}^\dagger c_{m_4}^\dagger = \tilde{c}_{m_1} [(-)^q c_{m_3}^\dagger \tilde{c}_{m_2} + (-)^{j+m_2} \delta_{-m_2, m_3}] c_{m_4}^\dagger \\
& = (-)^q \tilde{c}_{m_1} c_{m_3}^\dagger \tilde{c}_{m_2} c_{m_4}^\dagger + (-)^{j-m_2} \tilde{c}_{m_1} c_{m_4}^\dagger \\
& = (-)^q [(-)^q c_{m_3}^\dagger \tilde{c}_{m_1} + (-)^{j+m_1} \delta_{-m_1, m_3}] [(-)^q c_{m_4}^\dagger \tilde{c}_{m_2} + (-)^{j+m_2} \delta_{-m_2, m_4}] + \\
& \quad (-)^{j+m_2} \delta_{-m_2, m_3} [(-)^q c_{m_4}^\dagger \tilde{c}_{m_1} + (-)^{j+m_1} \delta_{-m_1, m_4}] \\
& = (-)^q c_{m_3}^\dagger \tilde{c}_{m_1} c_{m_4}^\dagger \tilde{c}_{m_2} + (-)^{j+m_2} \delta_{-m_2, m_4} c_{m_3}^\dagger \tilde{c}_{m_1} + \\
& \quad (-)^{j+m_1} \delta_{-m_1, m_3} c_{m_4}^\dagger \tilde{c}_{m_2} + (-)^{q+j+m_2} \delta_{-m_2, m_3} c_{m_4}^\dagger \tilde{c}_{m_1} + \\
& \quad (-)^{q+2j+m_1+m_2} \delta_{-m_1, m_3} \delta_{-m_2, m_4} + (-)^{2j+m_1+m_2} \delta_{-m_2, m_3} \delta_{-m_1, m_4} \\
& = c_{m_3}^\dagger c_{m_4}^\dagger \tilde{c}_{m_1} \tilde{c}_{m_2} + (-)^{q+j+m_1} \delta_{-m_1, m_4} c_{m_3}^\dagger \tilde{c}_{m_2} + (-)^{j+m_2} \delta_{-m_2, m_4} c_{m_3}^\dagger \tilde{c}_{m_1} + \\
& \quad (-)^{j+m_1} \delta_{-m_1, m_3} c_{m_4}^\dagger \tilde{c}_{m_2} + (-)^{q+j+m_2} \delta_{-m_2, m_3} c_{m_4}^\dagger \tilde{c}_{m_1} + \\
& \quad (-)^{q+2j+m_1+m_2} \delta_{-m_1, m_3} \delta_{-m_2, m_4} + (-)^{2j+m_1+m_2} \delta_{-m_2, m_3} \delta_{-m_1, m_4}
\end{aligned} \tag{C.33}$$

Jetzt beginnen wir mit der eigentlichen Rechnung, wobei wir obiges Ergebnis benutzen.

$$\begin{aligned}
& \left[(c^\dagger \times c^\dagger)_M^{(J)}, (\tilde{c} \times \tilde{c})_0^{(0)} \right] = (c^\dagger \times c^\dagger)_M^{(J)} \cdot (\tilde{c} \times \tilde{c})_0^{(0)} - (\tilde{c} \times \tilde{c})_0^{(0)} \cdot (c^\dagger \times c^\dagger)_M^{(J)} \\
& = \sum_{m_1, m_2, m_3} \langle j, m_1, j, m_2 | J, M \rangle \langle j, m_3, j, -m_3 | 00 \rangle \times \\
& \quad [c_{m_1}^\dagger c_{m_2}^\dagger \tilde{c}_{m_3} \tilde{c}_{-m_3} - \tilde{c}_{m_3} \tilde{c}_{-m_3} c_{m_1}^\dagger c_{m_2}^\dagger] \\
& = \sum_{m_1, m_2, m_3} \langle j, m_1, j, m_2 | J, M \rangle \langle j, m_3, j, -m_3 | 00 \rangle \times \\
& \quad \underbrace{[c_{m_1}^\dagger c_{m_2}^\dagger \tilde{c}_{m_3} \tilde{c}_{-m_3} - c_{m_1}^\dagger c_{m_1}^\dagger \tilde{c}_{m_3} \tilde{c}_{-m_3} - (-)^{q+j+m_3} \delta_{-m_3, m_2} c_{m_1}^\dagger \tilde{c}_{-m_3} -}_{=0} \\
& \quad (-)^{j-m_3} \delta_{m_3, m_2} c_{m_1}^\dagger \tilde{c}_{m_3} - (-)^{j+m_3} \delta_{-m_3, m_1} c_{m_2}^\dagger \tilde{c}_{-m_3} - (-)^{q+j-m_3} \delta_{m_3, m_1} c_{m_2}^\dagger \tilde{c}_{m_3} -} \\
& \quad (-)^{q+2j+m_3-m_3} \delta_{-m_3, m_1} \delta_{m_3, m_2} - (-)^{2j+m_3-m_3} \delta_{m_3, m_1} \delta_{-m_3, m_2}]
\end{aligned} \tag{C.34}$$

Wir betrachten nun die beiden konstanten Terme:

$$\begin{aligned}
& - \sum_{m_1, m_2, m_3} = \langle j, m_1, j, m_2 | J, M \rangle \langle j, m_3, j, -m_3 | 00 \rangle \delta_{-m_3, m_1} \delta_{m_3, m_2} \\
& = - \sum_{m_3} \langle j, m_3, j, -m_3 | J, M \rangle \langle j, m_3, j, -m_3 | 00 \rangle = 0
\end{aligned} \tag{C.35}$$

Hier haben wir die Orthogonalitätsrelation (D.32) benutzt. Eine analoge Rechnung liefert für den zweiten konstanten Term ebenfalls Null. Damit erhalten wir:

$$\begin{aligned}
& \left[(c^\dagger \times c^\dagger)_M^{(J)}, (\tilde{c} \times \tilde{c})_0^{(0)} \right] = \sum_{m_1, m_2, m_3} \langle j, m_1, j, m_2 | J, M \rangle \langle j, m_3, j, -m_3 | 00 \rangle \times \\
& \quad [-(-)^{q+j+m_3} \delta_{-m_3, m_2} c_{m_1}^\dagger \tilde{c}_{-m_3} - (-)^{j-m_3} \delta_{m_3, m_2} c_{m_1}^\dagger \tilde{c}_{m_3} - \\
& \quad (-)^{j+m_3} \delta_{-m_3, m_1} c_{m_2}^\dagger \tilde{c}_{-m_3} - (-)^{q+j-m_3} \delta_{m_3, m_1} c_{m_2}^\dagger \tilde{c}_{m_3}]
\end{aligned} \tag{C.36}$$

Die vier Einkörperterme geben alle den gleichen Beitrag. Als Beispiel führen wir hier die Ableitung eines dieser Terme auf. Die Rechnung für die anderen drei Terme verläuft sehr ähnlich.

$$\begin{aligned}
& - \sum_{m_1, m_2, m_3} \langle j, m_1, j, m_2 | J, M \rangle \langle j, m_3, j, -m_3 | 0, 0 \rangle (-)^{q+j+m_3} \delta_{-m_3, m_2} c_{m_1}^\dagger \tilde{c}_{-m_3} \\
& = - \sum_{m_1, m_2, m_3} \langle j, m_1, j, m_2 | J, M \rangle \frac{(-)^{j-m_3}}{\sqrt{2j+1}} (-)^{q+j+m_3} \delta_{-m_3, m_2} c_{m_1}^\dagger \tilde{c}_{-m_3} \\
& = - \sum_{m_1, m_2} \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \langle j, m_1, j, m_2 | J, M \rangle c_{m_1}^\dagger \tilde{c}_{m_2} \\
& = \frac{-1}{\sqrt{2j+1}} [c^\dagger \times \tilde{c}]_M^{(J)}
\end{aligned} \tag{C.37}$$

Da die anderen Terme den gleichen Beitrag liefern, erhalten wir:

$$[c^\dagger \times c^\dagger]_M^{(J)}, (\tilde{c} \times \tilde{c})_0^{(0)} = \frac{-4}{\sqrt{2j+1}} [c^\dagger \times \tilde{c}]_M^{(J)} \tag{C.38}$$

Auf analoge Weise folgt:

$$[c^\dagger \times c^\dagger]_0^{(0)}, (\tilde{c} \times \tilde{c})_M^{(J)} = \frac{-4}{\sqrt{2j+1}} [c^\dagger \times \tilde{c}]_M^{(J)} \tag{C.39}$$

Damit ist es möglich einen Ausdruck für den Kommutator $[\hat{V}^{(J)}, \hat{V}^{(0)}]$ anzugeben.

$$\begin{aligned}
[\hat{V}^{(J)}, \hat{V}^{(0)}] & = \left[[(c^\dagger \times c^\dagger)^{(J)} \times (\tilde{c} \times \tilde{c})^{(J)}]_0^{(0)}, [(c^\dagger \times c^\dagger)^{(0)} \times (\tilde{c} \times \tilde{c})^{(0)}]_0^{(0)} \right] \\
& = \sum_M \frac{(-)^{J-M}}{\sqrt{2j+1}} \left[(c^\dagger \times c^\dagger)_M^{(J)} (\tilde{c} \times \tilde{c})_{-M}^{(J)}, (c^\dagger \times c^\dagger)_0^{(0)} (\tilde{c} \times \tilde{c})_0^{(0)} \right]
\end{aligned} \tag{C.40}$$

Jetzt benutzen wir Gleichung (D.50). und erhalten:

$$\begin{aligned}
& [\hat{V}^{(J)}, \hat{V}^{(0)}] \\
& = \sum_M \frac{(-)^{J-M}}{2j+1} ((c^\dagger \times c^\dagger)_M^{(J)} [(\tilde{c} \times \tilde{c})_{-M}^{(J)}, (c^\dagger \times c^\dagger)_0^{(0)}] (\tilde{c} \times \tilde{c})_0^{(0)} + \\
& \quad (c^\dagger \times c^\dagger)_0^{(0)} [(c^\dagger \times c^\dagger)_M^{(J)}, (\tilde{c} \times \tilde{c})_0^{(0)}] (\tilde{c} \times \tilde{c})_{-M}^{(J)}) \\
& = \sum_M \frac{(-)^{J-M}}{2j+1} \frac{4}{\sqrt{2j+1}} [(c^\dagger \times c^\dagger)_M^{(J)} (c^\dagger \times \tilde{c})_{-M}^{(J)} (\tilde{c} \times \tilde{c})_0^{(0)} - \\
& \quad (c^\dagger \times c^\dagger)_0^{(0)} (c^\dagger \times \tilde{c})_M^{(J)} (\tilde{c} \times \tilde{c})_{-M}^{(J)}] \\
& = \frac{4}{\sqrt{2j+1}} ([((c^\dagger \times c^\dagger)^{(J)} \times (c^\dagger \times \tilde{c})^{(J)})^{(0)} \times (\tilde{c} \times \tilde{c})^{(0)}]_0^{(0)} - \\
& \quad [(c^\dagger \times c^\dagger)^{(0)} \times ((c^\dagger \times \tilde{c})^{(J)} \times (\tilde{c} \times \tilde{c})^{(J)})_0^{(0)}]^{(0)}) \\
& = \frac{4}{\sqrt{2j+1}} ([((c^\dagger \times c^\dagger)^{(J)} \times c^\dagger)^{(j)} \times ((\tilde{c} \times \tilde{c})^{(0)} \times \tilde{c})^{(j)}]_0^{(0)} - \\
& \quad [((c^\dagger \times c^\dagger)^{(0)} \times c^\dagger)^{(j)} \times ((\tilde{c} \times \tilde{c})^{(J)} \times \tilde{c})^{(j)}]_0^{(0)})
\end{aligned} \tag{C.41}$$

Für den letzten Schritt entkoppeln wir den Dreikörperoperator teilweise und ändern die Reihenfolge der Kopplung des Clebsch-Gordan-Koeffizienten.

C.4 Multiplizitäten

Dieser Abschnitt enthält die Herleitungen aller Formeln für die Multiplizität in der Reduktion $SO(n) \supset SO(3)$ bzw. $USp(n) \supset SU(2)$, welche in den entsprechenden Kapiteln verwendet

wurden. Die Herleitungen basieren auf der in Kapitel 3.1 vorgestellten rekursiv definierten Formel. Die Rechnungen sind nicht sehr erhellend und sind hier lediglich der Vollständigkeit halber aufgeführt. Da die analytischen Ausdrücke numerisch überprüft werden können, ist dieser Abschnitt auch der Beweis für Korrektheit der rekursiven Beziehung.

C.4.1 $C(3, 0, j)$ und $C(3, 1, j)$ für Bosonen

Durch wiederholte Anwendung der rekursiven Beziehung für $A(N, M, j)$ ergeben sich folgende Gleichungen:

$$A(3, 0, j) = 1 + \sum_{a=1}^j 2a + 1 - 2 \left\lfloor \frac{a+1}{2} \right\rfloor \quad (\text{C.42})$$

$$A(3, 1, j) = \sum_{a=1}^j 2a - 2 \left\lfloor \frac{a}{2} \right\rfloor \quad (\text{C.43})$$

$$A(3, 2, j) = \sum_{a=1}^j 2a - 1 - 2 \left\lfloor \frac{a-1}{2} \right\rfloor \quad (\text{C.44})$$

Nun ist es einfach, $B(3, 0, j)$ und $B(3, 1, j)$ zu berechnen.

$$\begin{aligned} B(3, 0, j) &= A(3, 0, j) - A(3, 1, j) \\ &= 1 + j - 2 \sum_{a=1}^j \delta_{a \bmod 2, 1} \\ &= \begin{cases} 0 & \text{für } j \text{ ungerade} \\ 1 & \text{für } j \text{ gerade} \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{C.45})$$

$$\begin{aligned} B(3, 1, j) &= A(3, 1, j) - A(3, 2, j) \\ &= j - 2 \sum_{a=1}^j \delta_{a \bmod 2, 0} \\ &= \begin{cases} 1 & \text{für } j \text{ ungerade} \\ 0 & \text{für } j \text{ gerade} \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{C.46})$$

Und daher gilt für die gesuchten Multiplizitäten:

$$\begin{aligned} C(3, 0, j) &= B(3, 0, j) - B(1, 0, j) \\ &= \begin{cases} 0 & \text{für } j = 0 \\ 0 & \text{für } j \text{ ungerade} \\ 1 & \text{für } j \text{ gerade mit } j > 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{C.47})$$

$$\begin{aligned} C(3, 1, j) &= B(3, 1, j) - B(1, 1, j) \\ &= \begin{cases} 0 & \text{für } j = 0, 1 \\ 0 & \text{für } j \text{ gerade mit } j > 1 \\ 1 & \text{für } j \text{ ungerade mit } j > 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{C.48})$$

C.4.2 $C(3, j, j)$ für Fermionen

Die in Kapitel 3.1 angegebene Formel ist zwar allgemein gültig, eine konkrete Anwendung kann jedoch aufwendig sein, wie das hier im Detail vorgestellte Beispiel zeigt. Für die $A(N, M, j)$,

$B(N, J, j)$ und $C(\nu, J, j)$ gelten nach (3.1) folgende rekursive Beziehungen:

$$A(N, M, j) = A(N, M, j-1) + A(N-1, M+j, j-1) + A(N-1, M-j, j-1) + A(N-2, M, j-1) \quad (\text{C.49})$$

$$B(N, J, j) = B(N, J, j-1) + B(N-1, J+j, j-1) + B(N-1, J-j, j-1) + B(N-2, J, j-1) \quad (\text{C.50})$$

$$C(\nu, J, j) = C(\nu, J, j-1) + C(\nu-1, J+j, j-1) + C(\nu-1, J-j, j-1) + C(\nu-2, J, j-1) \quad (\text{C.51})$$

Wir benutzen nun die Rekursionsformel für $A(N, M, j)$, um einen Ausdruck für $C(3, j, j)$ herzuleiten.

$$C(3, j, j) = B(3, j, j) - B(1, j, j) \quad (\text{C.52})$$

$B(1, j, j)$ ist leicht anzugeben.

$$B(1, j, j) = \underbrace{A(1, j, j)}_{=1} - \underbrace{A(1, j+1, j)}_{=0} = 1 \quad (\text{C.53})$$

Also gilt:

$$C(3, j, j) = A(3, j, j) - A(3, j+1, j) - 1 \quad (\text{C.54})$$

Für die Berechnung von $A(3, j, j)$ und $A(3, j+1, j)$ brauchen wir einen Ausdruck für $A(2, M, j)$. Wir behandeln also zunächst $A(2, M, j)$, danach $A(3, j, j)$ und $A(3, j+1, j)$ und schließlich das gesuchte $C(3, j, j)$.

C.4.2.1 $A(2, M, j)$

Für Fermionen gilt:

$$A(2, M, j) = \begin{cases} 0 & \text{für } 2j-1 < |M| \\ 0 & \text{für } 2j+1 < N \\ j + \frac{1}{2} - \lfloor \frac{M+1}{2} \rfloor & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{C.55})$$

Dies folgt leicht aus elementaren Überlegungen, wie die folgende Tabelle zeigt.

M	mögliche Konfigurationen	Anzahl
0	$(1/2, -1/2), (3/2, -3/2), (5/2, -5/2), \dots, (j, -j)$	$j + 1/2$
1	$(3/2, -1/2), (5/2, -3/2), (7/2, -5/2), \dots, (j, -j+1)$	$j + 1/2 - 1$
2	$(3/2, 1/2), (5/2, -1/2), (7/2, -3/2), \dots, (j, -j+2)$	$j + 1/2 - 1$
3	$(5/2, 1/2), (7/2, -1/2), (9/2, -3/2), \dots, (j, -j+3)$	$j + 1/2 - 2$
4	$(5/2, 3/2), (7/2, 1/2), (9/2, -1/2), \dots, (j, -j+4)$	$j + 1/2 - 2$
5	$(7/2, 3/2), (9/2, 1/2), (11/2, -1/2), \dots, (j, -j+4)$	$j + 1/2 - 3$

C.4.2.2 $A(3, j, j)$

Es sei $a \in \mathbb{N}$. Dann gilt:

$$A(3, j, j-a) = A(3, j, j-a-1) + A(2, k, j-a-1) + A(2, 2j-a, j-k-1) + A(1, j, j-a-1) \quad (\text{C.56})$$

Zwei der vier Terme sind gleich Null und einen weiteren können wir direkt angeben.

$$\begin{aligned} A(1, j, j - a - 1) &= 0, \text{ denn } j - a - 1 < j \\ A(2, 2j - a, j - a - 1) &= 0, \text{ denn } j - a - 1 + j - a - 2 < 2j - a \\ A(2, a, j - a - 1) &= j - a - 1 + \frac{1}{2} - \lfloor \frac{a+1}{2} \rfloor \end{aligned}$$

Also erhalten wir:

$$A(3, j, j - a) = A(3, j, j - a - 1) + j - \frac{1}{2} - a - \lfloor \frac{a+1}{2} \rfloor \quad (\text{C.57})$$

Und rekursiv folgt für $A(3, j, j)$:

$$A(3, j, j) = A(3, j, j - a) + \sum_{b=0}^{a-1} \left(j - \frac{1}{2} - b - \lfloor \frac{b+1}{2} \rfloor \right) \quad (\text{C.58})$$

Wir suchen jetzt das kleinste $a \in \mathbb{N}$, für das $A(3, j, j - a) = 0$ gilt. $A(3, j, j - a)$ ist ungleich Null für $3j - 3a - 3 \geq j \wedge 2j - 2a + 1 \geq 3$. Wir formen die beiden Bedingungen um und erhalten $a \leq j - 1 \wedge a \leq (2j - 3)/3$. Da jedoch $(2j - 3)/3 < j - 1$ sowie $a \in \mathbb{N}$ gilt, ist dies äquivalent zu der Bedingung $a \leq \lfloor (2j - 3)/3 \rfloor$. Das kleinste a , für das $A(3, j, j - a) = 0$ gilt, ist also $a = \lfloor (2j - 3)/3 \rfloor + 1$.

$$A(3, j, j) = \sum_{b=0}^{\lfloor (2j-3)/3 \rfloor} \left(j - \frac{1}{2} - b - \lfloor \frac{b+1}{2} \rfloor \right) \quad (\text{C.59})$$

C.4.2.3 $A(3, j + 1, j)$

Es sei $a \in \mathbb{N}$. Dann gilt:

$$\begin{aligned} A(3, j + 1, j - a) &= A(3, j + 1, j - a - 1) + A(2, k + 1, j - k - 1) + \\ &A(2, 2j - k + 1, j - k - 1) + A(1, j + 1, j - a - 1) \end{aligned} \quad (\text{C.60})$$

Zwei der vier Terme sind gleich Null und einen weiteren können wir direkt angeben.

$$\begin{aligned} A(1, j + 1, j - a - 1) &= 0, \text{ denn } j - a - 1 < j + 1 \\ A(2, 2j - a + 1, j - a - 1) &= 0, \text{ denn } j - a - 1 + j - a - 2 < 2j - a + 1 \\ A(2, a + 1, j - a - 1) &= j - a - \frac{3}{2} - \lfloor \frac{a}{2} \rfloor, \text{ nach Kasten} \end{aligned}$$

Also erhalten wir:

$$A(3, j + 1, j - a) = A(3, j + 1, j - a - 1) + j - a - \frac{3}{2} - \lfloor \frac{a}{2} \rfloor \quad (\text{C.61})$$

Und rekursiv folgt für $A(3, j + 1, j)$:

$$A(3, j + 1, j) = A(3, j + 1, j - a) + \sum_{b=0}^{a-1} \left(j - \frac{3}{2} - b - \lfloor \frac{b}{2} \rfloor \right) \quad (\text{C.62})$$

Wir suchen jetzt das kleinste $a \in \mathbb{N}$, für das $A(3, j + 1, j - a) = 0$ gilt. $A(3, j + 1, j - a)$ ist ungleich Null für $3j - 3a - 3 \geq j + 1 \wedge 2j - 2a \geq 3$. Dies ist äquivalent zu der Bedingung $a \leq \lfloor (2j - 4)/3 \rfloor$. $A(3, j + 1, j - a)$ wird also gleich Null für $a = \lfloor (2j - 4)/3 \rfloor + 1$.

$$A(3, j + 1, j) = \sum_{b=0}^{\lfloor (2j-4)/3 \rfloor} \left(j - \frac{3}{2} - b - \lfloor \frac{b}{2} \rfloor \right) \quad (\text{C.63})$$

C.4.2.4 $B(3, j, j)$ und $C(3, j, j)$

$$B(3, j, j) = A(3, j, j) - A(3, j + 1, j) \quad (\text{C.64})$$

$$= \sum_{b=0}^{\lfloor (2j-3)/3 \rfloor} \left(j - \frac{1}{2} - b - \left\lfloor \frac{b+1}{2} \right\rfloor \right) - \sum_{b=0}^{\lfloor (2j-4)/3 \rfloor} \left(j - \frac{3}{2} - b - \left\lfloor \frac{b}{2} \right\rfloor \right) \quad (\text{C.65})$$

Die Indexgrenze der zweiten Summe können wir nach Gleichung (D.51) umformen: $\lfloor (2j-4)/3 \rfloor = \lfloor (2j-3)/3 \rfloor - \delta_{(2j-3) \bmod 3, 0}$. Somit gilt:

$$B(3, j, j) = \sum_{b=0}^{\lfloor (2j-3)/3 \rfloor} \left(j - \frac{1}{2} - b - \left\lfloor \frac{b+1}{2} \right\rfloor \right) - \sum_{b=0}^{\lfloor (2j-3)/3 \rfloor} \left(j - \frac{3}{2} - b - \left\lfloor \frac{b}{2} \right\rfloor \right) + \underbrace{\delta_{(2j-3) \bmod 3, 0} \cdot \left(j - \frac{3}{2} - \left\lfloor \frac{2j-3}{3} \right\rfloor - \left\lfloor \frac{\lfloor (2j-3)/3 \rfloor}{2} \right\rfloor \right)}_{=: R} \quad (\text{C.66})$$

Zunächst berechnen wir R . Wir betrachten den Fall $(2j-3) \bmod 3 = 0$, denn in allen anderen Fällen gilt wegen der Deltafunktion $R = 0$. Wegen $(2j-3) \bmod 3 = 0$ gilt $\lfloor (2j-3)/3 \rfloor = 2j/3 - 1$ und $\lfloor \lfloor (2j-3)/3 \rfloor / 2 \rfloor = \lfloor (2j/3 - 1)/2 \rfloor$. Da $2j$ eine ungerade ganze Zahl ist, die durch drei teilbar ist, ist $2j/3$ ebenfalls eine ungerade Zahl. Daher gilt $\lfloor (2j/3 - 1)/2 \rfloor = 2j/6 - 1/2$.

$$R = j - \frac{3}{2} - \frac{2j}{3} + 1 - \frac{2j}{6} + \frac{1}{2} = 0 \quad (\text{C.67})$$

Da also immer $R = 0$ gilt, erhalten wir

$$B(3, j, j) = \sum_{b=0}^{\lfloor (2j-3)/3 \rfloor} \left(1 - \left\lfloor \frac{b+1}{2} \right\rfloor + \left\lfloor \frac{b}{2} \right\rfloor \right) = 1 + 0 + 1 + 0 + 1 + \dots = \left\lfloor \frac{\lfloor (2j-3)/3 \rfloor}{2} \right\rfloor + 1 = \left\lfloor \frac{2j-3}{6} \right\rfloor + 1 \quad (\text{C.68})$$

und

$$C(3, j, j) = B(3, j, j) - B(1, j, j) = \left\lfloor \frac{2j-3}{6} \right\rfloor + 1 - \underbrace{A(1, j, j)}_{=1} + \underbrace{A(1, j+1, j)}_{=0} = \left\lfloor \frac{2j-3}{6} \right\rfloor \quad (\text{C.69})$$

C.4.3 $C(3, j, j)$ für Bosonen

Für die $A(N, M, j)$, $B(N, J, j)$ und $C(\nu, J, j)$ gelten nach (3.2) folgende rekursive Beziehungen:

$$A(N, M, m) = \sum_{a=0}^N \sum_{b=0}^a A(N-a, M+bm - (a-b)m, m-1) \quad (\text{C.70})$$

$$B(N, J, j) = \sum_{a=0}^N \sum_{b=0}^a B(N-a, J+bj - (a-b)j, j-1) \quad (\text{C.71})$$

$$C(\nu = N, J, j) = \sum_{a=0}^{\nu-2} \sum_{b=0}^a C(\nu-a, J+bj - (a-b)j, j-1) + \sum_{a=\nu-1}^{\nu} \sum_{b=0}^a B(\nu-a, J+bj - (a-b)j, j-1) \quad (\text{C.72})$$

Die Herleitung für $C(3, j, j)$ verläuft analog zu der für Fermionen. Für Bosonen gilt:

$$A(2, M, m) = \begin{cases} 0 & \text{für } 2m < M \\ 0 & \text{für } m < 0 \\ m + 1 - \lfloor \frac{M+1}{2} \rfloor & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{C.73})$$

Dies folgt aus elementaren Überlegungen, wie die folgende Tabelle zeigt.

M	mögliche Konfigurationen	Anzahl
0	$(0, 0), (1, -1), (2, -2), \dots, (m, -m)$	$m + 1$
1	$(1, 0), (2, -1), (3, -2), \dots, (m, -m + 1)$	$m + 1 - 1$
2	$(1, 1), (2, 0), (3, -1), \dots, (m, -m + 2)$	$m + 1 - 1$
3	$(2, 1), (3, 0), (4, -1), \dots, (m, -m + 3)$	$m + 1 - 2$
4	$(2, 2), (3, 1), (4, 0), \dots, (m, -m + 4)$	$m + 1 - 2$
5	$(3, 2), (4, 1), (5, 0), \dots, (m, -m + 5)$	$m + 1 - 3$

Wie schon im Fall der Fermionen, können wir dies mit Hilfe der weiter oben in diesem Abschnitt angegebenen Gleichungen benutzen, um einen Ausdruck für $C(3, j, j)$ abzuleiten. Nach zum Fermionenfall analoger Rechnung ergibt sich

$$C(3, j, j) = \left\lfloor \frac{j}{3} \right\rfloor \quad (\text{C.74})$$

C.4.4 Die Multiplizität der Reduktion $SO(2j + 1) \supset SO(3)$ numerisch

Im Abschnitt 3.5 wurde das Grundzustandsphasendiagramm von Bose-Einstein-Kondensaten mit Spin $j > 2$ aufgestellt. Dabei wurde davon ausgegangen, dass für eine Teilchenzahl von $N > 17$ immer mindestens ein Zustand mit Drehimpuls $J = 0$ und maximaler Seniorität $\nu = N$ existiert. Diese Annahme wird hier numerisch begründet. Wir benutzen dafür den in Kapitel 2.5.2 vorgestellten Algorithmus zur Berechnung der Multiplizitäten Δ^j eines Zustandes identischer Teilchen mit intrinsischem Spin j , Seniorität ν und Drehimpuls $J = 0$.

ν	Δ^3	Δ^4	Δ^5	Δ^6	Δ^7
0	1	1	1	1	1
1	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0
3	0	1	0	1	0
4	1	1	1	2	2
5	0	1	0	2	0
6	1	2	4	5	7
7	0	2	0	7	4
8	1	3	6	12	21
9	0	4	5	18	23
10	2	5	12	32	66
11	0	5	8	45	83
12	2	8	28	75	194
13	0	9	20	108	265
14	2	11	45	164	511
15	1	14	47	237	736
16	3	16	80	348	1275
17	0	18	80	484	1819
18	3	24	142	691	2957
19	1	26	141	946	4190
20	4	31	221	1304	6429
21	1	37	246	1755	9013
22	4	42	347	2364	13274
23	1	47	379	3115	18302

Die obige Tabelle lässt keinen Zweifel daran, dass für Senioritäten $\nu > 17$ immer mindestens ein $J = 0$ -Zustand existiert. Der Fall $j = 3$ ist als einziger nicht völlig eindeutig. Daher wurde dieser gesondert bis zu $\nu = 100$ untersucht. Die auftretenden Multiplizitäten nehmen auch hier immer weiter zu und $\Delta^3 = 0$ wurde für $\nu > 17$ nicht gefunden.

C.5 Verzweigungsregeln

Dieser Abschnitt enthält detaillierte Herleitungen der Verzweigungsregeln für die im Kapitel 4.2 behandelte Bose-Fermi-Symmetrie. Für die Berechnung der Verzweigungsregeln werden hier anstatt der in der Literatur üblichen Quantenzahlen (siehe (4.64)) folgende Bezeichnungen verwendet.

$$\begin{array}{ccccccc} U^B(6) \otimes U^F(4) \supset SO^B(6) \otimes SU^F(4) \supset SU^{BF}(4) \supset USp^{BF}(4) \supset SU^{BF}(2) & & & & & & \\ [N_b] & [1^{N_f}] & (\sigma_b) & [\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3] & [\beta_1, \beta_2, \beta_3] & \langle \gamma_1, \gamma_2 \rangle & J \end{array} \quad (C.75)$$

Aufgrund der Isomorphismen $SO(6) \simeq SU(4)$ und $SO(5) \simeq USp(4)$ reduziert sich das Modell für den Fall $N_f = 0$ zu der $SO(6)$ -Symmetrie des gewöhnlichen sd-IBM1. Die Verzweigungsregeln für dieses Modell finden sich in der entsprechenden Literatur. Eine Ausarbeitung für $N_f = 1$ ist in [11, 5] nachzulesen während [69] den Fall $N_f = 2$ behandelt. Eine Herleitung für eine beliebige Fermionenzahl ist jedoch nicht zu finden. Daher werden hier die Verzweigungsregeln für den allgemeinen Fall $N_f = 0, 1, 2, 3, 4$ (eine höhere Teilchenzahl ist aufgrund des Pauliprinzips in einer $j = 3/2$ -Schale nicht möglich) abgeleitet. Nachzulesen sind die verwendeten Methoden z.B. in [73]. Die Multiplikation der S-Funktionen spielt hierbei eine zentrale Rolle. Das Produkt zweier S-Funktionen $\{\rho\}$ und $\{\sigma\}$ vom Grad m und n kann als Summe ganzzahliger Vielfacher von S-Funktionen $\{\nu\}$ mit Grad $m + n$ dargestellt werden.

$$\{\rho\} \cdot \{\sigma\} = \sum_{\nu} \Gamma_{\rho\sigma\nu} \{\nu\} \quad (C.76)$$

Da ein Isomorphismus zwischen der Multiplikation von S-Funktionen und der Bildung des äußeren Produkts von irreduziblen Darstellungen der symmetrischen Gruppe existiert [74], ist dies von großer Bedeutung.

C.5.1 $U^B(6) \otimes U^F(4) \supset SO^B(6) \otimes SU^F(4)$

Das Problem besteht aus zwei Teilen. Es werden die beiden Verzweigungsregeln zu $U^B(6) \supset SO^B(6)$ und $U^F(4) \supset SU^F(4)$ gesucht.

C.5.1.1 $U^B(6) \supset SO^B(6)$:

Die Zerlegung der irreduziblen Darstellungen $[\lambda]$ der $U(n)$ in irreduzible Darstellungen (η) der Untergruppe $O(n)$ ist durch folgende Regel gegeben:

$$[\lambda] = (\lambda) + \sum_{\{\delta\}} \Gamma_{\delta\eta\lambda}(\eta) \quad (C.77)$$

wobei über alle S-Funktionen $\{\delta\}$ summiert wird, deren Partitionen nur gerade Anteile besitzen (also $\{\delta\} = \{2\}, \{4\}, \{2^2\}, \{6\}, \{42\}, \{2^3\}, \{8\}, \dots$). Bei dem hier diskutierten Fall handelt es sich nur um total symmetrische Darstellungen $[N_b, 0, 0, 0, 0, 0] \equiv [N_b]$ der $U(6)$. Aufgrund der Definition von $\Gamma_{\delta\eta\lambda}$ (siehe Gleichung (C.76)) können in der Summe nur Terme bezüglich total symmetrischen S-Funktionen $\{\delta\}$ vorkommen. Da diese nur gerade Anteile besitzen dürfen gilt $\{\delta\} = \{2\}, \{4\}, \{6\}, \dots, \{N_b\}$ oder $\{N_b - 1\}$. Somit erhalten wir $(\eta) = (N_b - 2), (N_b - 4), \dots, 0$ oder 1. Außerdem sind in diesem Fall alle $\Gamma_{\delta\eta\lambda} = 1$. Die Verzweigungsregel für $U^B(6) \supset SO^B(6)$ bezüglich der hier auftretenden Darstellungen lautet daher:

$$[N_b] \rightarrow (N_b), (N_b - 2), \dots, 0 \text{ oder } 1 \quad (C.78)$$

C.5.1.2 $U^F(4) \supset SU^F(4)$:

Für $SU(n)$ existiert eine Äquivalenz zwischen der Darstellung $[1^n]$ und der trivialen Darstellung $[0]$ (siehe z.B. [9]). Daher gilt für eine beliebige irreduzible Darstellung der $SU(4)$:

$$\begin{aligned} [\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4] &= [\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4] \otimes [0] = \\ &[\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4] \otimes [1, 1, 1, 1] = [\lambda_1 + 1, \lambda_2 + 1, \lambda_3 + 1, \lambda_4 + 1] \end{aligned} \quad (\text{C.79})$$

Iterativ folgt dann für die gesuchte Verzweigungsregel:

$$[\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_4] \rightarrow [\lambda_1 - \lambda_4, \lambda_2 - \lambda_4, \lambda_3 - \lambda_4] \quad (\text{C.80})$$

C.5.2 $SO^B(6) \otimes SU^F(4) \supset SU^{BF}(4)$

Die $SO(6)$ -Algebra ist isomorph zur $SU(4)$ -Algebra. Daher kann die hier gesuchte Verzweigungsregel einfach gefunden werden, indem ein äußeres Produkt gebildet wird. Die im Abschnitt C.5.1.1 dargelegte Verzweigungsregel gibt die in einer total symmetrischen irreduziblen Darstellung der $U(6)$ enthaltenen irreduziblen Darstellungen der $SO(6)$ an. Jede dieser $SO(6)$ -Darstellungen entspricht also einer $SU(4)$ -Darstellung. Das Problem besteht nun darin, die Labels bezüglich der speziellen orthogonalen Gruppe in solche der speziellen unitären Gruppe zu übersetzen. Erst dann kann das äußere Produkt z.B. durch Multiplikation von Young-Diagrammen ausgeführt werden. Ein einfacher Weg, um die Relation zwischen beiden Notationen zu finden, besteht darin, die Dimensionen der Darstellungen zu vergleichen [5]. Die Dimension $D(\sigma, \sigma', \sigma'')$ einer allgemeinen irreduziblen Darstellung $(\sigma, \sigma', \sigma'')$ der $SO(6)$ ist

$$D(\sigma, \sigma', \sigma'') = \frac{1}{12}(\sigma + \sigma' + 3)(\sigma + \sigma'' + 2)(\sigma' + \sigma'' + 1)(\sigma - \sigma' + 1)(\sigma - \sigma'' + 2)(\sigma' - \sigma'' + 1) \quad (\text{C.81})$$

und die Dimension $D[h, h', h'']$ einer allgemeinen irreduziblen Darstellung $[h, h', h'']$ der $SU(4)$ ist

$$D[h, h', h''] = \frac{1}{12}(h + 3)(h' + 2)(h'' + 1)(h - h' + 1)(h - h'' + 2)(h' - h'' + 1) \quad (\text{C.82})$$

Durch Vergleich ergibt sich die gesuchte Relation:

$$h = \sigma + \sigma' \quad \wedge \quad h' = \sigma \pm \sigma'' \quad \wedge \quad h'' = \sigma' \pm \sigma'' \quad (\text{C.83})$$

bzw.

$$\sigma = \frac{1}{2}(h + h' - h'') \quad \wedge \quad \sigma' = \frac{1}{2}(h - h' + h'') \quad \wedge \quad \sigma'' = \pm \frac{1}{2}(-h + h' + h'') \quad (\text{C.84})$$

Die Wahl des Vorzeichens spielt in dem hier diskutierten Fall keine Rolle, da gilt $\sigma' = \sigma'' = 0$ (siehe Abschnitt C.5.1.1). Das äußere Produkt wird also zwischen $[\sigma_b, \sigma_b, 0, 0]$ und $[1^{N_f}]$ gebildet. Für $\sigma_b \neq 0$ ergibt sich

$$[\sigma_b, \sigma_b, 0, 0] \otimes [1^{N_f}] = \begin{cases} [\sigma_b, \sigma_b, 0, 0] & \text{für } N_f = 0 \\ [\sigma_b + 1, \sigma_b, 0, 0] + [\sigma_b, \sigma_b, 1, 0] & \text{für } N_f = 1 \\ [\sigma_b + 1, \sigma_b + 1, 0, 0] + [\sigma_b + 1, \sigma_b, 1, 0] + [\sigma_b, \sigma_b, 1, 1] & \text{für } N_f = 2 \\ [\sigma_b + 1, \sigma_b + 1, 1, 0] + [\sigma_b + 1, \sigma_b, 1, 1] & \text{für } N_f = 3 \\ [\sigma_b + 1, \sigma_b + 1, 1, 1] & \text{für } N_f = 4 \end{cases} \quad (\text{C.85})$$

Das Ergebnis liegt in Form von Labels bezüglich irreduzibler Darstellungen der $U(4)$ vor. Dies muss mittels der in Abschnitt C.5.1.2 beschriebenen Regel wieder zu $SU(4)$ -Labels konvertiert

werden. Das Ergebnis lautet dann

$$[\sigma_b, \sigma_b, 0, 0] \otimes [1^{N_f}] \rightarrow \begin{cases} [\sigma_b, \sigma_b, 0] \text{ f\"ur } N_f = 0 \\ [\sigma_b + 1, \sigma_b, 0] + [\sigma_b, \sigma_b, 1] \text{ f\"ur } N_f = 1 \\ [\sigma_b + 1, \sigma_b + 1, 0] + [\sigma_b + 1, \sigma_b, 1] + [\sigma_b - 1, \sigma_b - 1, 0] \text{ f\"ur } N_f = 2 \\ [\sigma_b + 1, \sigma_b + 1, 1] + [\sigma_b, \sigma_b - 1, 0] \text{ f\"ur } N_f = 3 \\ [\sigma_b, \sigma_b, 0] \text{ f\"ur } N_f = 4 \end{cases} \quad (\text{C.86})$$

C.5.3 $SU^{BF}(4) \supset USp^{BF}(4)$

Die irreduziblen Darstellungen $[\lambda]$ der $U(n)$ lassen sich entsprechend folgender Gleichung in irreduzible Darstellungen $\langle \lambda \rangle$ der $USp(n)$ zerlegen [75]:

$$[\lambda] = \langle \lambda \rangle + \sum_{\{\beta\}} \sum_{\mu} \Gamma_{\beta\mu\lambda} \langle \mu \rangle \quad (\text{C.87})$$

Summiert wird über alle Partitionen $\{\beta\}$, bei denen alle Anteile eine gerade Anzahl oft vorkommen ($\{\beta\} = \{1^2\}, \{2^2\}, \{1^4\}, \{2^2 1^2\}, \{3^2\}, \dots$). Wie in Abschnitt C.5.2 gezeigt, sind hier nur vier Fälle von Interesse: $[\lambda] = [\alpha, \alpha], [\alpha, \alpha, 1], [\alpha + 1, \alpha, 0], [\alpha + 1, \alpha, 1]$. Eine allgemeine irreduzible Darstellung $\langle \lambda \rangle$ der $USp(4)$ wird durch zwei Symbole $\langle \lambda_1, \lambda_2 \rangle$ gekennzeichnet. Bei der Anwendung von Gleichung (C.87) können jedoch Symbole $\langle \lambda \rangle$ mit mehr als zwei Anteilen auftreten. Diese müssen zu den zwei-komponentigen Standardsymbolen konvertiert werden. Dabei gilt [76]: Alle $\langle \lambda \rangle$ mit mehr als zwei Anteilen verschwinden, es sei denn $\langle \lambda \rangle$ kann als $\langle \lambda_1, \lambda_2, (\delta) \rangle$ geschrieben werden, wobei die Partition (δ) in der Notation nach Frobenius gegeben ist als:

$$(\delta) = \begin{pmatrix} a \\ a+1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} a & b \\ a+1 & b+1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} a & b & c \\ a+1 & b+1 & c+1 \end{pmatrix}, \dots \quad (\text{C.88})$$

also $(\delta) = (1^2), (2, 1^2), (3, 1^3), (2^3), (3, 2^2, 1), \dots$

C.5.3.1 $[\lambda] = [\alpha, \alpha] :$

Die möglichen Partitionen für $\{\beta\}$ sind $\{\beta\} = \{1^2\}, \{2^2\}, \{3^2\}, \dots$. Dann gilt $\{\mu\} = \{\alpha - 1, \alpha - 1\}, \{\alpha - 2, \alpha - 2\}, \dots, \{0, 0\}$ und $\Gamma_{\{n^2\}\{\alpha-n, \alpha-n\}\{\alpha, \alpha\}} = 1$. Daher lautet die gesuchte Verzweigungsregel

$$[\alpha, \alpha] \rightarrow \langle \alpha, \alpha \rangle, \langle \alpha - 1, \alpha - 1 \rangle, \langle \alpha - 2, \alpha - 2 \rangle, \dots, \langle 0, 0 \rangle \quad (\text{C.89})$$

C.5.3.2 $[\lambda] = [\alpha, \alpha, 1] :$

Da $[\lambda]$ einem drei-reihigen Young-Diagramm entspricht, kommen für $\{\beta\}$ nur die S-Funktionen $\{n^2\}$ mit $n = 1, 2, 3, \dots, \alpha$ in Frage.

$$[\alpha, \alpha, 1] = \langle \alpha, \alpha, 1 \rangle + \sum_{n=1}^{\alpha} \sum_{\mu} \Gamma_{\{n^2\}\mu\{\alpha, \alpha, 1\}} \langle \mu \rangle \quad (\text{C.90})$$

Für $\{\beta\} = \{n^2\}$ gilt $\{\mu\} = \{\alpha - n + 1, \alpha - n\}$ und $\Gamma_{\{n^2\}\{\alpha-n+1, \alpha-n\}\{\alpha, \alpha, 1\}} = 1$. Nach obiger Regel verschwinden alle Symbole mit mehr als zwei Komponenten. Die Verzweigungsregel ist also

$$[\alpha, \alpha, 1] \rightarrow \langle \alpha, \alpha - 1 \rangle, \langle \alpha - 1, \alpha - 2 \rangle, \langle \alpha - 2, \alpha - 3 \rangle, \dots, \langle 1, 0 \rangle \quad (\text{C.91})$$

C.5.3.3 $[\lambda] = [\alpha + 1, \alpha]$:

Da $[\lambda]$ einem zwei reihigen Young-Diagramm entspricht, kommen für $\{\beta\}$ nur die S-Funktionen $\{n^2\}$ mit $n = 1, 2, 3, \dots, \alpha$ in Frage.

$$[\alpha + 1, \alpha] = \langle \alpha + 1, \alpha \rangle + \sum_{n=1}^{\alpha} \sum_{\mu} \Gamma_{\{n^2\}\mu\{\alpha+1,\alpha\}} \langle \mu \rangle \quad (\text{C.92})$$

Für $\{\beta\} = \{n^2\}$ gilt $\{\mu\} = \{\alpha - n + 1, \alpha - n\}$. Alle mehr als zwei-komponentigen Symbole verschwinden. Somit gilt:

$$[\alpha + 1, \alpha] \rightarrow \langle \alpha + 1, \alpha \rangle, \langle \alpha, \alpha - 1 \rangle, \langle \alpha - 1, \alpha - 2 \rangle, \dots, \langle 1, 0 \rangle \quad (\text{C.93})$$

C.5.3.4 $[\lambda] = [\alpha + 1, \alpha, 1]$:

Da $[\lambda]$ einem drei reihigen Young-Diagramm entspricht, kommen für $\{\beta\}$ wieder nur die S-Funktionen $\{n^2\}$ mit $n = 1, 2, 3, \dots, \alpha$ in Frage.

$$[\alpha + 1, \alpha, 1] = \langle \alpha + 1, \alpha, 1 \rangle + \sum_{n=1}^{\alpha} \sum_{\mu} \Gamma_{\{n^2\}\mu\{\alpha+1,\alpha,1\}} \langle \mu \rangle \quad (\text{C.94})$$

Nach der oben angegebenen Regel verschwinden alle mehr als zwei komponentigen Symbole auf der rechten Seite und das Ergebnis lautet

$$[\alpha + 1, \alpha, 1] \rightarrow \langle \alpha + 1, \alpha - 1 \rangle, \langle \alpha, \alpha - 2 \rangle, \dots, \langle 2, 0 \rangle, \\ \langle \alpha, \alpha \rangle, \langle \alpha - 1, \alpha - 1 \rangle, \dots, \langle 1, 1 \rangle \quad (\text{C.95})$$

C.5.4 $USp^{BF}(4) \supset SU^{BF}(2)$

Die Verzweigungsregel für $USp(4) \supset SU(2)$ kann durch ein rekursives Verfahren gefunden werden. Bezüglich $SU(4) \supset USp(4) \supset SU(2)$ gilt $[0]_{SU(4)} \rightarrow \langle 0 \rangle_{USp(4)} \rightarrow [0]_{SU(2)}$. Angenommen die Verzweigungsregeln für $SU(4) \supset USp(4)$ sowie $SU(4) \supset SU(2)$ sind bekannt, dann folgt die Verzweigungsregel für $USp(4) \supset SU(2)$ durch Differenzbildung. Es sei z.B. $[1, 1]_{SU(4)} \rightarrow [0]_{SU(2)}, [\kappa]_{SU(2)}$ und aus Abschnitt C.5.3 ist $[1, 1]_{SU(4)} \rightarrow \langle 1, 1 \rangle_{USp(4)}, \langle 0, 0 \rangle_{USp(4)}$ bekannt. Dann folgt durch Differenzbildung $\langle 1, 1 \rangle_{USp(4)} \rightarrow [\kappa]_{SU(2)}$. Iterativ können so die Regeln für andere Darstellungen gefunden werden. Das Problem reduziert sich daher auf das Finden der Verzweigungsregel für $SU(4) \rightarrow SU(2)$. Dieses Problem kann mit Hilfe des allgemeinen Konzepts des „Plethysmus“ gelöst werden [77].

C.5.4.1 Plethysmus

Die Bedeutung der Operation des Plethysmus wird hier zunächst an einem Beispiel erklärt. Man betrachte die Darstellungen $[\lambda]_{SU(2)} = [4]_{SU(2)}$ der $SU(2)$. Dies entspricht einem Drehimpuls von $J = 2$. Die Dimension $D_{[\underline{\alpha}]}$ einer allgemeinen Darstellung $[\underline{\alpha}] = [\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n]$ von $U(n)$ ist

$$D_{[\underline{\alpha}]} = \prod_{h < j}^n \frac{h - j + \alpha_j - \alpha_h}{h - j} \quad (\text{C.96})$$

und daher ist die Dimension der Darstellung $[\lambda]_{SU(2)}$

$$D_{[\lambda]}^{SU(2)} = 1 + \lambda \quad (\text{C.97})$$

Die Dimension der Darstellung $[4]_{SU(2)}$ zum Drehimpuls $J = 2$ ist also $D_{[4]}^{SU(2)} = 5$. Es sei ϕ_M mit $M = -2, -1, 0, 1, 2$ eine Basis für diese Darstellung. Die Dimension der Darstellung

$[1]$ der $U(m)$ hat nach Gleichung (C.96) die Dimension m . Die ϕ_M sind also auch Basis der $[1]_{U(5)}$ -Darstellung der $U(5)$. Für das äußere Produkt der beiden Darstellungen $[4]_{SU(2)}$ und $[1]_{U(5)}$ mit sich selbst gilt

$$\begin{aligned} [4]_{U(2)}^2 &= [4]_{U(2)} \otimes [4]_{U(2)} = [8]_{U(2)} \oplus [7, 1]_{U(2)} \oplus [6, 2]_{U(2)} \oplus [5, 3]_{U(2)} \oplus [4, 4]_{U(2)} \\ &= [8]_{SU(2)} \oplus [6]_{SU(2)} \oplus [4]_{SU(2)} \oplus [2]_{SU(2)} \oplus [0]_{SU(2)} \end{aligned} \quad (\text{C.98})$$

und

$$[1]_{U(5)}^2 = [1]_{U(5)} \otimes [1]_{U(5)} = [2]_{U(5)} \oplus [1, 1]_{U(5)} \quad (\text{C.99})$$

Die 25 Funktionen $\Phi_{M_1, M_2} := \phi_{M_1} \phi_{M_2}$ bilden eine Basis sowohl für die Darstellung $[4]_{U(2)}^2$ als auch für $[1]_{U(5)}^2$. Die Dimensionen der oben auftretenden Darstellungen sind nach Gleichung (C.96):

Darstellung	Dimension	Darstellung	Dimension
$[8]_{U(2)}$	9	$[2]_{U(5)}$	15
$[7, 1]_{U(2)}$	7	$[1, 1]_{U(5)}$	10
$[6, 2]_{U(2)}$	5		
$[5, 3]_{U(2)}$	3		
$[4, 4]_{U(2)}$	1		

$[2]_{U(5)}$ entspricht der total symmetrischen Darstellung eines Systems zweier d-Bosonen oder auch der dynamischen Symmetrie $U(6) \supset U(5) \supset SO(5) \supset SO(3)$ für $n_d = 2$ wie sie im sd-IBM1 auftritt. Da zwei identische d-Bosonen nur zu den geraden Spins 0, 2 und 4 koppeln können (was den Darstellungen $[8]_{U(2)}$, $[6, 2]_{U(2)}$ und $[4, 4]_{U(2)}$ bzw. $[8]_{SU(2)}$, $[4]_{SU(2)}$ und $[0]_{SU(2)}$ entspricht), muss es in dem 25-dimensionalen Raum, der durch die Φ_{M_1, M_2} aufgespannt wird, einen 15-dimensionalen Unterraum geben, dessen Basis $\Phi_{M_1, M_2}^{[2]}$ sowohl Basis von $[2]_{U(5)}$ als auch von $[8]_{SU(2)} \oplus [4]_{SU(2)} \oplus [0]_{SU(2)}$ ist. Die Basis des Raums mit den übrigen 10 Dimensionen sei $\Phi_{M_1, M_2}^{[1,1]}$. Für den durch die Φ_{M_1, M_2} aufgespannten Raum lässt sich also eine Basis finden, deren 25 Vektoren genau wie die Darstellungen in disjunkte Mengen entsprechend ihrer Symmetrie zerfallen. Die Idee der Verknüpfung des Plethysmus (hier durch $\underline{\otimes}$ symbolisiert) ist es nun, aus einem Produkt von Darstellungen bzw. Funktionen diejenigen einer bestimmten Symmetrie auszuwählen.

$$\begin{aligned} [4]_{U(2)} \underline{\otimes} [2] &= [8]_{U(2)} + [6, 2]_{U(2)} + [4, 4]_{U(2)} \\ [4]_{U(2)} \underline{\otimes} [1, 1] &= [7, 1]_{U(2)} + [5, 3]_{U(2)} \end{aligned} \quad (\text{C.100})$$

Es gelten also die Verzweigungsregeln

$$\begin{aligned} [2]_{U(5)} &\rightarrow [8]_{U(2)}, [6, 2]_{U(2)}, [4, 4]_{U(2)} \\ [1, 1]_{U(5)} &\rightarrow [7, 1]_{U(2)}, [5, 3]_{U(2)} \end{aligned} \quad (\text{C.101})$$

Das Konzept lässt sich leicht verallgemeinern. Es gelte $[1]_{U(a)} \rightarrow [\underline{\beta}]_{U(b)}$. Dann gilt

$$[\underline{\gamma}]_{U(a)} \rightarrow [\underline{\beta}]_{U(b)} \underline{\otimes} [\underline{\gamma}] \quad (\text{C.102})$$

Es existieren eine Reihe von Regeln, die bei der Berechnung eines Plethysmus helfen [73].

C.5.4.2 Plethysmus für $SU(4) \supset SU(2)$ und $USp^{BF}(4) \supset SU^{BF}(2)$:

Es gilt $[1]_{U(4)} \rightarrow [3]_{U(2)}$ und daher

$$[\underline{\gamma}]_{U(4)} \rightarrow [3]_{SU(2)} \underline{\otimes} [\underline{\gamma}] \quad (\text{C.103})$$

Wie aus Abschnitt C.5.2 hervorgeht, sind hier die Fälle $[\alpha, \alpha, 0]$, $[\alpha, \alpha, 1]$, $[\alpha + 1, \alpha, 0]$ und $[\alpha + 1, \alpha, 1]$ interessant. Eine symbolische Lösung für den Plethysmus zu berechnen ist sehr

schwierig, weshalb hier jeder Fall einzeln betrachtet wird. Es sei daher z.B. $N_b = 4$. Dann gilt nach Abschnitt C.5.1.1 $\sigma_b = 0, 2, 4$. Daher werden die Verzweigungsregeln aller Darstellungen der $SU(4)$ gebraucht, die in der folgenden Tabelle aufgeführt sind.

N_f	0	1	2	3	4
σ_b	[0]	[1]	[1, 1]	[1, 1, 1]	[0]
0	[0]	[1]	[1, 1]	[1, 1, 1]	[0]
2	[2, 2]	[3, 2], [2, 2, 1]	[3, 3], [3, 2, 1], [1, 1]	[3, 3, 1], [2, 1]	[2, 2]
4	[4, 4]	[5, 4], [4, 4, 1]	[5, 5], [5, 4, 1], [3, 3]	[5, 5, 1], [4, 3]	[4, 4]

Es werden also zunächst alle Plethysmen $[3]_{U(2)} \otimes [\alpha, \alpha]$ mit $\alpha = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ benötigt.

$$\begin{aligned}
[3]_{U(2)} \otimes [0, 0] &= [0] \\
[3]_{U(2)} \otimes [1, 1] &= [0] + [4] \\
[3]_{U(2)} \otimes [2, 2] &= [0] + 2[4] + [8] \\
[3]_{U(2)} \otimes [3, 3] &= 2[0] + 2[4] + [6] + 2[8] + [12] \\
[3]_{U(2)} \otimes [4, 4] &= 2[0] + 3[4] + [6] + 3[8] + [10] + 2[12] + [16] \\
[3]_{U(2)} \otimes [5, 5] &= 2[0] + 4[4] + [6] + 4[8] + 2[10] + 3[12] + [14] + 2[16] + [20]
\end{aligned} \tag{C.104}$$

Der Übersichtlichkeit halber werden die Gruppenbezeichnungen von nun an weggelassen, da aus dem Kontext heraus klar ist, um welche Gruppen es sich handelt. Es gilt

$$\langle 0, 0 \rangle \rightarrow [0] \tag{C.105}$$

und

$$[\alpha, \alpha] \rightarrow \langle \alpha, \alpha \rangle, \langle \alpha - 1, \alpha - 1 \rangle, \dots, \langle 0, 0 \rangle \tag{C.106}$$

Daher ergibt sich durch Differenzbildung:

$$\begin{aligned}
\langle 1, 1 \rangle &\rightarrow [4] \\
\langle 2, 2 \rangle &\rightarrow [4] + [8] \\
\langle 3, 3 \rangle &\rightarrow [0] + [6] + [8] + [12] \\
\langle 4, 4 \rangle &\rightarrow [4] + [8] + [10] + [12] + [16] \\
\langle 5, 5 \rangle &\rightarrow [4] + [8] + [10] + [12] + [14] + [16] + [20]
\end{aligned} \tag{C.107}$$

Der nächste Fall ist $[3]_{U(2)} \otimes [\alpha, \alpha - 1]$ mit $\alpha = 1, 2, 3, 4, 5$.

$$\begin{aligned}
[3]_{U(2)} \otimes [1, 0] &= [3] \\
[3]_{U(2)} \otimes [2, 1] &= [1] + [3] + [5] + [7] \\
[3]_{U(2)} \otimes [3, 2] &= [1] + 2[3] + 2[5] + 2[7] + [9] + [11] \\
[3]_{U(2)} \otimes [4, 3] &= [1] + 3[3] + 3[5] + 3[7] + 3[9] + 2[11] + [13] + [15] \\
[3]_{U(2)} \otimes [5, 4] &= 2[1] + 3[3] + 4[5] + 5[7] + 4[9] + 4[11] + 3[13] + 2[15] + [17] + [19]
\end{aligned} \tag{C.108}$$

Mit

$$[\alpha + 1, \alpha] \rightarrow \langle \alpha + 1, \alpha \rangle, \langle \alpha, \alpha - 1 \rangle, \dots, \langle 1, 0 \rangle \tag{C.109}$$

folgt

$$\begin{aligned}
\langle 1, 0 \rangle &\rightarrow [3] \\
\langle 2, 1 \rangle &\rightarrow [1] + [5] + [7] \\
\langle 3, 2 \rangle &\rightarrow [3] + [5] + [7] + [9] + [11] \\
\langle 4, 3 \rangle &\rightarrow [3] + [5] + [7] + 2[9] + [11] + [13] + [15] \\
\langle 5, 4 \rangle &\rightarrow [1] + [5] + 2[7] + [9] + 2[11] + 2[13] + [15] + [17] + [19]
\end{aligned} \tag{C.110}$$

Der Fall $[\alpha, \alpha, 1]$ ist wegen

$$[\alpha, \alpha, 1] \rightarrow \langle \alpha, \alpha - 1 \rangle, \langle \alpha - 1, \alpha - 2 \rangle, \dots, \langle 1, 0 \rangle \quad (\text{C.111})$$

durch obige Gleichungen abgedeckt. Die letzten benötigten Plethysmen sind $[3]_{U(2)} \underline{\otimes} [\alpha, \alpha - 1, 1]$ mit $\alpha = 2, 3, 4, 5$.

$$\begin{aligned} [3]_{U(2)} \underline{\otimes} [2, 1, 1] &= [2] + [4] + [6] \\ [3]_{U(2)} \underline{\otimes} [3, 2, 1] &= 2[2] + 3[4] + 2[6] + 2[8] + [10] \\ [3]_{U(2)} \underline{\otimes} [4, 3, 1] &= [0] + 3[2] + 4[4] + 5[6] + 4[8] + 3[10] + 2[12] + [14] \\ [3]_{U(2)} \underline{\otimes} [5, 4, 1] &= [0] + 4[2] + 6[4] + 7[6] + 7[8] + 6[10] + 5[12] + 3[14] + 2[16] + [18] \end{aligned} \quad (\text{C.112})$$

Es gilt

$$\begin{aligned} [\alpha + 1, \alpha, 1] &\rightarrow \langle \alpha + 1, \alpha - 1 \rangle, \langle \alpha, \alpha - 2 \rangle, \dots, \langle 2, 0 \rangle, \\ &\quad \langle \alpha, \alpha \rangle, \langle \alpha - 1, \alpha - 1 \rangle, \dots, \langle 1, 1 \rangle \end{aligned} \quad (\text{C.113})$$

Also folgt durch Differenzbildung unter Verwendung der früheren Ergebnisse für die Verzweigung von $\langle \alpha, \alpha - 2 \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle 2, 0 \rangle &\rightarrow [2] + [6] \\ \langle 3, 1 \rangle &\rightarrow [2] + [4] + [6] + [8] + [10] \\ \langle 4, 2 \rangle &\rightarrow [2] + [4] + 2[6] + [8] + 2[10] + [12] + [14] \\ \langle 5, 3 \rangle &\rightarrow [2] + [4] + 2[6] + 2[8] + 2[10] + 2[12] + 2[14] + [16] + [18] \end{aligned} \quad (\text{C.114})$$

Damit sind alle benötigten Verzweigungsregeln berechnet und für $N_b = 4$ können alle Quantenzahlen bestimmt werden. Da die $USp(4)$ isomorph zur $SO(5)$ ist, werden in der Literatur häufig Quantenzahlen bezüglich den Darstellungen der orthogonalen Gruppe benutzt. Die Umrechnung folgt durch Dimensionsargumente. Die Dimension $D(\nu, \nu')$ einer Darstellung (ν, ν') der $SO(5)$ ist

$$D(\nu, \nu') = \frac{1}{6}(2\nu + 3)(2\nu' + 1)(\nu + \nu' + 1)(\nu - \nu' + 1) \quad (\text{C.115})$$

und die Dimension $D\langle q, q' \rangle$ einer Darstellung $\langle q, q' \rangle$ der $USp(4)$ ist

$$D\langle q, q' \rangle = \frac{1}{6}(q + 2)(q' + 1)(q - q' + 1)(q + q' + 3) \quad (\text{C.116})$$

Die führt zu den Relationen

$$q = \nu + \nu' \quad \wedge \quad q' = \nu - \nu' \quad (\text{C.117})$$

sowie

$$\nu = \frac{1}{2}(q + q') \quad \wedge \quad \nu' = \frac{1}{2}(q - q') \quad (\text{C.118})$$

Anhang D

Formelsammlung und Konventionen

Dieses Kapitel enthält einige Konventionen sowie die wichtigsten Formeln und Gleichungen, welche in den Herleitungen in den entsprechenden Kapiteln sowie in dem numerischen Code Verwendung finden. Diese Gleichungen finden sich in verschiedenen Quellen wie z.B. [1, 10, 11, 5, 72].

D.1 Erzeuger- und Vernichterooperatoren

Für Fermionen werden die Operatoren $a_{j,m}^\dagger, a_{j,m}, \tilde{a}_{j,m}$ und für Bosonen die Operatoren $b_{j,m}^\dagger, b_{j,m}$ und $\tilde{b}_{j,m}$ verwendet. Wird statt dessen $c_{j,m}^\dagger, c_{j,m}$ und $\tilde{c}_{j,m}$ benutzt, so gilt der entsprechende Ausdruck sowohl für Bosonen als auch für Fermionen.

Mit der Phasenkonvention (D.1) gibt es keine weitere Phase beim Teilchenzahloperator. Sie bestimmt außerdem den Zusammenhang der reduzierten Matrixelemente von \tilde{c} mit denen von c^\dagger . Die gleiche Konvention wird auch in [1, 10] benutzt, jedoch nicht in [11] (ACHTUNG!).

$$\tilde{c}_{j,m} := (-1)^{j+m} c_{j,-m} \quad (\text{D.1})$$

Die Kommutator- bzw. Antikommutatorrelationen lauten damit

$$[\tilde{b}_{l_1, m_1}, b_{l_2, m_2}^\dagger] = (-1)^{l_1+m_1} \delta_{l_1, l_2} \delta_{-m_1, m_2} \quad (\text{D.2})$$

und

$$\{\tilde{a}_{j_1, m_1}, a_{j_2, m_2}^\dagger\} = (-1)^{j_1+m_1} \delta_{j_1, j_2} \delta_{-m_1, m_2} \quad (\text{D.3})$$

Mit der Konvention $q = 0$ für Bosonen und $q = 1$ für Fermionen gilt also

$$\tilde{c}_{j_1, m_1} c_{j_2, m_2}^\dagger = (-1)^q c_{j_2, m_2}^\dagger \tilde{c}_{j_1, m_1} + (-1)^{j_1+m_1} \delta_{j_1, j_2} \delta_{-m_1, m_2} \quad (\text{D.4})$$

$$a_{j,m}^\dagger a_{j',m'}^\dagger + a_{j',m'}^\dagger a_{j,m}^\dagger = \{a_{j,m}^\dagger, a_{j',m'}^\dagger\} = 0 \quad (\text{D.5})$$

$$a_{j,m} a_{j',m'} + a_{j',m'} a_{j,m} = \{a_{j,m}, a_{j',m'}\} = 0 \quad (\text{D.6})$$

$$a_{j',m'} a_{j,m}^\dagger + a_{j,m}^\dagger a_{j',m'} = \{a_{j',m'}, a_{j,m}^\dagger\} = \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \quad (\text{D.7})$$

$$b_{j,m}^\dagger b_{j',m'}^\dagger - b_{j',m'}^\dagger b_{j,m}^\dagger = [b_{j,m}^\dagger, b_{j',m'}^\dagger] = 0 \quad (\text{D.8})$$

$$b_{j,m} b_{j',m'} - b_{j',m'} b_{j,m} = [b_{j,m}, b_{j',m'}] = 0 \quad (\text{D.9})$$

$$b_{j',m'} b_{j,m}^\dagger - b_{j,m}^\dagger b_{j',m'} = [b_{j',m'}, b_{j,m}^\dagger] = \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \quad (\text{D.10})$$

D.2 Reduzierte Matrixelemente

Das sog. reduzierte Matrixelement ist in der Literatur auf unterschiedliche Weise definiert. Aus mathematischer Sicht ist folgende Definition logisch:

$$\langle \alpha_1, j_1, m_1 | \hat{O}_m^{(j)} | \alpha_2, j_2, m_2 \rangle = \langle j_2, m_2, j, m | j_1, m_1 \rangle \langle \alpha_1, j_1 | \hat{O}^{(j)} | \alpha_2, j_2 \rangle_M \quad (\text{D.11})$$

Aus Sicht des Physikers kann jedoch auch eine etwas andere Definition, wie sie z.B. im Buch von I. Talmi [10] verwendet wird, sinnvoll sein.

$$\langle \alpha_1, j_1, m_1 | \hat{O}_m^{(j)} | \alpha_2, j_2, m_2 \rangle = (-)^{j_1 - m_1} \begin{pmatrix} j_1 & j & j_2 \\ -m_1 & m & m_2 \end{pmatrix} \langle \alpha_1, j_1 | \hat{O}^{(j)} | \alpha_2, j_2 \rangle_T \quad (\text{D.12})$$

Die Indizes "M" und "T" stehen hierbei für "mathematisch" und "Talmi". Wird kein Index angegeben, so ist ersteres gemeint.

$$\langle \alpha_1, j_1 | \hat{O}^{(j)} | \alpha_2, j_2 \rangle := \langle \alpha_1, j_1 | \hat{O}^{(j)} | \alpha_2, j_2 \rangle_M \quad (\text{D.13})$$

Mit der Relation (D.30) folgt:

$$\begin{aligned} \langle j_2, m_2, j, m | j_1, m_1 \rangle \langle \alpha_1, j_1 | \hat{O}^{(j)} | \alpha_2, j_2 \rangle_M = \\ (-)^{j_1 - m_1} \begin{pmatrix} j_1 & j & j_2 \\ -m_1 & m & m_2 \end{pmatrix} \langle \alpha_1, j_1 | \hat{O}^{(j)} | \alpha_2, j_2 \rangle_T \end{aligned} \quad (\text{D.14})$$

Mit Hilfe von (D.31) lässt sich das 3j-Symbol etwas umschreiben, dann wenden wir (D.30) an und erhalten

$$\begin{aligned} \langle j_2, m_2, j, m | j_1, m_1 \rangle \langle \alpha_1, j_1 | \hat{O}^{(j)} | \alpha_2, j_2 \rangle_M = \\ (-)^{j_1 - m_1} (-)^{j_1 + j + j_2} (-)^{j_2 - j + m_1} \frac{1}{\sqrt{2j_1 + 1}} \times \\ \langle j_2, m_2, j, m | j_1, m_1 \rangle \langle \alpha_1, j_1 | \hat{O}^{(j)} | \alpha_2, j_2 \rangle_T \end{aligned} \quad (\text{D.15})$$

Da sich der Clebsch-Gordan-Koeffizient aus der Gleichung herauskürzt, erhalten wir die einfache Beziehung:

$$\langle \alpha_1, j_1 | \hat{O}^{(j)} | \alpha_2, j_2 \rangle_M = \frac{(-)^{2j_1 + 2j_2}}{\sqrt{2j_1 + 1}} \langle \alpha_1, j_1 | \hat{O}^{(j)} | \alpha_2, j_2 \rangle_T \quad (\text{D.16})$$

Mit den Konventionen (D.1) und (D.12) gilt folgende Relation zwischen den reduzierten Matrixelementen von c^\dagger und \tilde{c} :

$$\langle \alpha_1, j_1 | c_j^\dagger | \alpha_2, j_2 \rangle_T = (-)^{-j_1 + j + j_2} \langle \alpha_2, j_2 | \tilde{c}_j | \alpha_1, j_1 \rangle_T \quad (\text{D.17})$$

D.3 Zweiteilchenoperatoren

Die Notation für Zweiteilchenoperatoren ist wie folgt:

$$\hat{V}_{n_1 j_1, n_2 j_2, n_3 j_3, n_4 j_4}^{(J)} := \left[(c_{n_1 j_1}^\dagger \times c_{n_2 j_2}^\dagger)^{(J)} \times (\tilde{c}_{n_3 j_3} \times \tilde{c}_{n_4 j_4})^{(J)} \right]^{(0)} \quad (\text{D.18})$$

Die im Sinne der Quantenmechanik unterscheidbaren Teilchen werden mit den Indizes n_1, n_2, \dots bezeichnet. Unterscheidbare Teilchen mit dem gleichen Spin erhalten so eine unterschiedliche Bezeichnung. In dieser Notation haben z.B. die Bosonen des sd-IBM2 die Indizes 1, 2, 3, 4 und nicht nur (wie sonst in der Literatur üblich) 1 und 2 bzw. π und ν . Haben die Teilchen paarweise unterschiedlichen Spin, so kann dieser Index weggelassen werden.

$$\hat{V}_{j_1, j_2, j_3, j_4}^{(J)} := \left[(c_{j_1}^\dagger \times c_{j_2}^\dagger)^{(J)} \times (\tilde{c}_{j_3} \times \tilde{c}_{j_4})^{(J)} \right]^{(0)} \quad (\text{D.19})$$

Handelt es sich um identische Teilchen, so kann eine noch einfachere Notation verwendet werden.

$$\hat{V}^{(J)} \equiv \hat{V}_j^{(J)} := \left[(c_j^\dagger \times c_j^\dagger)^{(J)} \times (\tilde{c}_j \times \tilde{c}_j)^{(J)} \right]^{(0)} \quad (\text{D.20})$$

In der Literatur werden die Zweiteilchenoperatoren häufig anders definiert.

$$\langle j^2; J' | \hat{V}_J | j^2; J'' \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{JJ''} \quad (\text{D.21})$$

wobei $|j^2; J\rangle$ ein normalisierter Zweiteilchenzustand ist. Damit gilt:

$$\hat{V}_J = \frac{(-)^q \cdot \sqrt{2J+1}}{2} \hat{V}^{(J)} \quad (\text{D.22})$$

D.4 Drehimpulskopplung

In dieser Arbeit wurde das sog. J -Schema vielfach verwendet. Dies trifft sowohl auf die analytischen Rechnungen sowie auf den numerischen Code zu. Dieser Abschnitt enthält eine Sammlung aller diesbezüglich verwendeten Gleichungen.

$$\begin{Bmatrix} J_1 & J_2 & J_{12} \\ J_3 & J_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix} := \sqrt{(2J_{12}+1)(2J_{34}+1)(2J_{13}+1)(2J_{24}+1)} \begin{Bmatrix} J_1 & J_2 & J_{12} \\ J_3 & J_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix} \quad (\text{D.23})$$

$$\begin{Bmatrix} J_1 & J_2 & J \\ J_4 & J_3 & J' \end{Bmatrix} = (-1)^{J_2+J+J_3+J'} \sqrt{(2J+1)(2J'+1)} \begin{Bmatrix} J_1 & J_2 & J \\ J_3 & J_4 & J \\ J' & J' & 0 \end{Bmatrix} \quad (\text{D.24})$$

$$\begin{aligned} & \langle j_1 j_3(J_{13}), j_2 j_4(J_{24}); J | j_1 j_2(J_{12}), j_3 j_4(J_{34}); J \rangle = \\ & \sqrt{(2J_{13}+1)(2J_{24}+1)(2J_{12}+1)(2J_{34}+1)} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J_{12} \\ j_3 & j_4 & J_{34} \\ J_{13} & J_{24} & J \end{Bmatrix} \quad (\text{D.25}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ J_4 & J_5 & J_6 \end{Bmatrix} &= \begin{Bmatrix} J_2 & J_1 & J_3 \\ J_5 & J_4 & J_6 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} J_3 & J_2 & J_1 \\ J_6 & J_5 & J_4 \end{Bmatrix} = \\ & \begin{Bmatrix} J_1 & J_3 & J_2 \\ J_4 & J_6 & J_5 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} J_4 & J_5 & J_3 \\ J_1 & J_2 & J_6 \end{Bmatrix} \quad (\text{D.26}) \end{aligned}$$

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & 0 \end{Bmatrix} = \frac{(-1)^{j_1+j_2+j_3}}{\sqrt{(2j_1+1)(2j_2+1)}} \delta_{j_1 j_5} \delta_{j_2 j_4} \quad (\text{D.27})$$

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_2 & j_1 & 1 \end{Bmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3+1} \frac{j_1(j_1+1) + j_2(j_2+1) - j_3(j_3+1)}{2\sqrt{j_1(j_1+1)(2j_1+1)j_2(j_2+1)(2j_2+1)}} \quad (\text{D.28})$$

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_2 & j_1 & 2 \end{Bmatrix} &= (-1)^{j_1+j_2+j_3} \times \\ & \frac{3X(X-1) - 4j_1(j_1+1)j_2(j_2+1)}{2\sqrt{(2j_1-1)j_1(j_1+1)(2j_1+1)(2j_1+3)(2j_2-1)j_2(j_2+1)(2j_2+1)(2j_2+3)}} \quad (\text{D.29}) \end{aligned}$$

mit $X := j_1(j_1+1) + j_2(j_2+1) - j_3(j_3+1)$.

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{Bmatrix} = \frac{(-1)^{j_1-j_2-m_3}}{\sqrt{2j_3+1}} \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j_3, -m_3 \rangle \quad (\text{D.30})$$

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} j_2 & j_3 & j_1 \\ m_2 & m_3 & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_3 & j_1 & j_2 \\ m_3 & m_1 & m_2 \end{pmatrix} = \\
(-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix} &= (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_3 & j_2 & j_1 \\ m_3 & m_2 & m_1 \end{pmatrix} = \\
(-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & j_2 \\ m_1 & m_3 & m_2 \end{pmatrix} &= (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} \quad (D.31)
\end{aligned}$$

$$\sum_{m_1, m_2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_4 \\ m_1 & m_2 & m_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{2j_3+1} \delta_{j_3, j_4} \delta_{m_3, m_4} \quad (D.32)$$

$$\langle j, m_1, j, m_2 | 0, 0 \rangle = \frac{(-1)^{j-m_1}}{\sqrt{2j+1}} \delta_{m_2, -m_1} \quad (D.33)$$

$$\begin{aligned}
\sum_{M_3} \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ M_1 & M_2 & M_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_4 & J_5 & J_3 \\ M_4 & M_5 & -M_3 \end{pmatrix} = \\
\sum_{J_6 M_6} (-1)^{J_3+J_6+M_1+M_4} (2J_6+1) \begin{Bmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ J_4 & J_5 & J_6 \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} J_4 & J_2 & J_6 \\ M_4 & M_2 & M_6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_1 & J_5 & J_6 \\ M_1 & M_5 & -M_6 \end{pmatrix} \quad (D.34)
\end{aligned}$$

$$(U^{(J)} \cdot V^{(J)}) = (-)^J \sqrt{2J+1} [U^{(J)} \times V^{(J)}]^{(0)} = \sum_M (-)^M U_M^{(J)} V_{-M}^{(J)} \quad (D.35)$$

D.5 CFPs

Für die Herleitungen in Kapitel 3.4 werden explizite Ausdrücke für Drei- und Vier-Teilchen-CFPs benötigt. Des Weiteren werden Skalarprodukte von Zuständen im J -Schema verwendet. In diesem Abschnitt sind alle verwendeten Gleichungen aufgeführt.

$$[j^2(J_1)jJ] \{j^3[J_0]J\} = \frac{\delta_{J_1, J_0} + 2\sqrt{(2J_0+1)(2J_1+1)} \begin{Bmatrix} j & j & J_0 \\ J & j & J_1 \end{Bmatrix}}{\sqrt{3+6(2J_0+1)} \begin{Bmatrix} j & j & J_0 \\ J & j & J_0 \end{Bmatrix}} \quad (D.36)$$

Wir definieren auch den nicht normalisierten CFP:

$$[j^2(J_1)jJ] \{j^3[J_0]J\}_u := \delta_{J_1, J_0} + 2\sqrt{(2J_0+1)(2J_1+1)} \begin{Bmatrix} j & j & J_0 \\ J & j & J_1 \end{Bmatrix} \quad (D.37)$$

$$[j^{n-1}(\alpha_1 J_1)jJ] \{j^n \alpha J\} = \frac{1}{\sqrt{n}} \langle j^n \alpha J | |c_j^\dagger| |j^{n-1} \alpha_1 J_1 \rangle \quad (D.38)$$

Es sei \mathcal{N}_1 und \mathcal{N}_2 die Norm von $[[c_j^\dagger \times c_j^\dagger]^{(J_0)} \times c_j^\dagger]^{(J)}$ und $[[c_j^\dagger \times c_j^\dagger]_{m_1}^{(J_1)}]$.

$$\begin{aligned}
[j^2(J_1)jJ] \{j^3[J_0]J\} &= \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}_1 \mathcal{N}_2}} \langle ([c_j^\dagger \times c_j^\dagger]^{(J_0)} \times c_j^\dagger]^{(J)} \rangle^\dagger |c_j^\dagger| | [c_j^\dagger \times c_j^\dagger]^{(J_1)} \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{3}} \cdot \langle J_1, m_1, j, m | J, M \rangle \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}_1 \mathcal{N}_2}} \langle ([c_j^\dagger \times c_j^\dagger]^{(J_0)} \times c_j^\dagger]_M^{(J)} \rangle^\dagger |c_{j, m}^\dagger| | [c_j^\dagger \times c_j^\dagger]_{m_1}^{(J_1)} \rangle \quad (D.39)
\end{aligned}$$

$$\mathcal{N}_1 \mathcal{N}_2 = \frac{4}{3} \left(3 + 6(2J_0+1) \begin{Bmatrix} j & j & J_0 \\ J & j & J_0 \end{Bmatrix} \right) \quad (D.40)$$

$$\begin{aligned}
\langle ([c_j^\dagger \times c_j^\dagger]^{(J_0)} \times c_j^\dagger]_M^{(J)} \rangle^\dagger |c_{j, m}^\dagger| | [c_j^\dagger \times c_j^\dagger]_{m_1}^{(J_1)} \rangle = \\
2 \cdot \langle J_1, m_1, j, m | J, M \rangle \cdot \left(\delta_{J_1, J_0} + 2\sqrt{(2J_0+1)(2J_1+1)} \begin{Bmatrix} j & j & J_0 \\ J & j & J_1 \end{Bmatrix} \right) \quad (D.41)
\end{aligned}$$

$$|j^2, J, M\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}} [[c^\dagger \times c^\dagger]_M^{(J)} |0\rangle \quad (\text{D.42})$$

$$|j^3, J_0, J, M\rangle_u := \left[[c^\dagger \times c^\dagger]^{(J_0)} \times c^\dagger \right]_M^{(J)} |0\rangle \quad (\text{D.43})$$

$$\langle j^2 J_1 | \hat{V}^{(J_2)} | j^2 J_1 \rangle = \frac{(-)^{q_2}}{\sqrt{2J_2+1}} \delta_{J_1, J_2} \quad (\text{D.44})$$

$$\langle j^3, J_0, J | j^3, J_1, J \rangle = 2 [j^2(J_0) j J] \{ j^3 [J_1] J \}_u \quad (\text{D.45})$$

$$|j^4, [J_1, J_2], J, M\rangle_u = [[c^\dagger \times c^\dagger]^{(J_1)} \times [c^\dagger \times c^\dagger]^{(J_2)}]_M^{(J)} |0\rangle \quad (\text{D.46})$$

$$[j^2(J_1) j^2(J_2); J] \{ j^4 [J_3, J_4] J \}_u := \begin{pmatrix} j & j & J_1 \\ j & j & J_2 \\ J_3 & J_4 & J \end{pmatrix} \quad (\text{D.47})$$

$${}_u \langle j^4, [J_1, J_2], J, M | j^4, [J_3, J_4], J, M \rangle_u = 4 [j^2(J_1) j^2(J_2); J] \{ j^4 [J_3, J_4] J \}_u \quad (\text{D.48})$$

D.6 Sonstiges

$$[A, BC] = [A, B] C + B [A, C] \quad (\text{D.49})$$

$$[AB, CD] = A [B, C] D + C [A, D] B \quad (\text{D.50})$$

$$\begin{aligned} \left\lfloor \frac{n}{m} \right\rfloor &= \left\lfloor \frac{n+1}{m} \right\rfloor - \delta_{n \bmod m, m-1} = \left\lfloor \frac{n+1}{m} \right\rfloor - \delta_{(n+1) \bmod m, 0} = \\ &= \left\lfloor \frac{n-1}{m} \right\rfloor + \delta_{n \bmod m, 0} = \left\lfloor \frac{n-1}{m} \right\rfloor + \delta_{(n+1) \bmod m, m-1} \end{aligned} \quad (\text{D.51})$$

Anhang E

Eigene Veröffentlichungen

Während meiner Tätigkeit am Institut für Kernphysik der Universität zu Köln sind die folgenden Veröffentlichungen entstanden, größtenteils in enger Zusammenarbeit mit Pavel Cejnar in Prag und Piet Van Isacker in Caen sowie selbstverständlich meinem Betreuer Jan Jolie.

Experimentalphysikalische Veröffentlichungen:

- P.Petkov, A.Dewald, O.Moller, B.Saha, A.Fitzler, K.Jessen, D.Tonev, T.Klug, S.Heinze, J.Jolie, P.von Brentano, D.Bazzacco, C.Ur, E.Farnea, M.Axiotis, S.Lunardi, C.Rossi-Alvarez, G.de Angelis, D.R.Napoli, N.Marginean, T.Martinez, M.Caprio, R.F.Casten, *Collectivity at high spins in ^{156}Dy* , Phys.Rev. C 68, 034328 (2003)
- D.Tonev, A.Dewald, T.Klug, P.Petkov, J.Jolie, A.Fitzler, O.Moller, S.Heinze, P.von Brentano, R.F.Casten, *Transition probabilities in ^{154}Gd : Evidence of $X(5)$ critical point symmetry*, Phys.Rev. C 69, 034334 (2004)
- A.Dewald, O.Moller, D.Tonev, A.Fitzler, B.Saha, K. Jessen, S. Heinze, A. Linnemann, J.Jolie, K.O.Zell, P.von Brentano, P. Petkov, R.F. Casten, M. Caprio, J.R. Cooper, R. Krucken, N.V.Zamfir, D. Bazzacco, S. Lunardi, C. Rossi Alvarez, F.Brandolini, C.Ur, G.De Angelis, D.R. Napoli, E. Farnea, N. Marginean, T. Martinez, M. Axiotis, *Shape changes and test of the critical-point symmetry $X(5)$ in $N = 90$ nuclei*, Eur.Phys.J. A 20, 173 (2004)
- D.A.Meyer, G.Graw, R. Hertenberg, H.-F.Wirth, R.F. Casten, P.von Brentano, D. Bucurescu, S. Heinze, J.L. Jerke, J. Jolie, R. Krucken, M. Mahgoub, P. Pejovic, O.Moller, D.Mucher, C.Scholl, *Systematic exploration of 0^+ states in structurally diverse nuclei*, J.Phys.(London) G31, S1399 (2005)
- A.Dewald, O.Moller, B.Saha, K.Jessen, A.Fitzler, B.Melon, T.Pissulla, S.Heinze, J.Jolie, K.O.Zell, P.von Brentano, P.Petkov, S.Harissopoulos, G.De Angelis, T.Martinez, D.R.Napoli, N.Marginean, M.Axiotis, C.Rusu, D.Tonev, A.Gadea, Y.H.Zhang, D.Bazzacco, S.Lunardi, C.A.Ur, R.Menegazzo, E.Farnea, *Test of the critical point symmetry $X(5)$ in the mass $A = 180$ region*, J.Phys.(London) G31, S1427 (2005)
- O.Moller, A.Dewald, P.Petkov, B.Saha, A.Fitzler, K.Jessen, D.Tonev, T.Klug, S.Heinze, J.Jolie, P.von Brentano, D.Bazzacco, C.A.Ur, E.Farnea, M.Axiotis, S.Lunardi, G.de Angelis, D.R.Napoli, N.Marginean, T.Martinez, M.A.Caprio, R.F.Casten, *Electromagnetic transition strengths in ^{156}Dy* , Phys.Rev. C 74, 024313 (2006)
- D.A.Meyer, V.Wood, R.F.Casten, C.R.Fitzpatrick, G.Graw, D.Bucurescu, J.Jolie, P.von Brentano, R.Hertenberg, H.-F.Wirth, N.Braun, T.Faestermann, S.Heinze, J.L.Jerke, R.Krucken, M.Mahgoub, O.Moller, D.Mucher, C.Scholl, *Extensive investigation of 0^+ states in rare earth region nuclei*, Phys.Rev. C 74, 044309 (2006)

- D.A.Meyer, V.Wood, R.F.Casten, C.R.Fitzpatrick, G.Graw, D.Bucurescu, J.Jolie, P.von Brentano, R.Hertenberger, H.-F.Wirth, N.Braun, T.Faestermann, S.Heinze, J.L.Jerke, R.Krucken, M.Mahgoub, O.Moller, D.Mucher, C.Scholl, *Enhanced density of low-lying 0^+ states: A corroboration of shape phase transitional behavior*, Phys.Lett. B **638**, 44 (2006)
- D.Bucurescu, G.Graw, R.Hertenberger, H.-F.Wirth, N.Lo Iudice, A.V.Sushkov, N. Yu. Shirikova, Y.Sun, T.Faestermann, R. Krucken, M. Mahgoub, J. Jolie, P.von Brentano, N. Braun, S.Heinze, O.Moller, D.Mucher, C.Scholl, R.F.Casten, D.A.Meyer, *High-resolution study of 0^+ and 2^+ excitations in ^{168}Er with the (p, t) reaction*, Phys.Rev. C **73**, 064309 (2006)
- P.Petkov, J.Jolie, S.Heinze, S.E.Drissi, M.Dorthe, J.Groger, J.L.Schenker, *Nanosecond lifetimes and electromagnetic transition strengths in ^{196}Au* , Nucl.Phys. A **796**, 1 (2007)
- D.Bucurescu, R.F.Casten, G.Graw, J.Jolie, N.Braun, P.von Brentano, T.Faestermann, S.Heinze, R.Hertenberger, N.Lo Iudice, R.Krucken, M.Mahgoub, D.A.Meyer, O.Moller, D.Mucher, C.Scholl, N.Yu.Shirikova, Y.Sun, A.V.Sushkov, H.-F.Wirth, *High-resolution study of 0^+ and 2^+ excitations in ^{168}Er with the (p, t) reaction*, Phys.Atomic Nuclei **70**, 1336 (2007)

Theoretische Veröffentlichungen:

- J. Jolie, P. Cejnar, R. F. Casten, S. Heinze, A. Linnemann und V. Werner, *Triple Point of Nuclear Deformations*, Phys. Rev. Lett. **89**, 182502 (2002)
- J. Jolie, S. Heinze, P. Cejnar, *Triple point of nuclear deformations and Landau theory*, Revista Mexicana de Fisica **49**: 29-33 (2003)
- P. Cejnar, S. Heinze und J. Jolie, *Ground-state shape phase transitions in nuclei: Thermodynamik analogy and finite- N effects*, Phys. Rev. C **68**, 034326 (2003)
- P. Cejnar, S. Heinze und J. Dobes, *Thermodynamic analogy for quantum phase transitions at zero temperature*, arXiv:nucl-th/0406060v1, (2004)
- J. Jolie, S. Heinze, P. Van Isacker und R. F. Casten, *Shape phase transitions in odd-mass nuclei using a supersymmetric approach*, Phys. Rev. C **70**, 011305 (2004)
- J. Jolie, R. F. Casten, P. Cejnar, S. Heinze, E. A. McCutchan und N. V. Zamfir, *Experimental Confirmation of the Alhassid.Whelan Arc of Regularity*, Phys. Rev. Lett. **93**, 132501 (2004)
- P. Cejnar, S. Heinze und J. Dobes, *Thermodynamic analogy for quantum phase transitions at zero temperature*, Phys. Rev. C **71**, 011304 (2005)
- S. Heinze, P. Cejnar, J. Jolie und M. Macek, *Evolution of spectral properties along the $O(6) - U(5)$ transition in the interacting boson model. I. Level dynamics*, Phys. Rev. C **73**, 014306 (2006)
- M. Macek, P. Cejnar, J. Jolie und S. Heinze, *Evolution of spectral properties along the $O(6) - U(5)$ transition in the interacting boson model. II. Classical trajectories*, Phys. Rev. C **73**, 014307 (2006)
- P. Cejnar, M. Macek, S. Heinze, J. Jolie und J. Dobes, *Monodromy and excited-state quantum phase transition in integrable systems: collective vibrations of nuclei*, J. Phys. A: Math. Gen. **39**, L515-L521 (2006)
- M. Macek, P. Stransky, P. Cejnar, S. Heinze, J. Jolie und J. Dobes, *Classical and quantum properties of the semiregular arc inside the Casten triangle*, Phys. Rev. C **75**, 064318 (2007)

- P. Cejnar, S. Heinze und M. Macek, *Coulomb Analogy for Non-Hermitian Degenaricies near Quantum Phase Transitions*, Phys. Rev. Lett. **99**, 100601 (2007)
- P. Van Isacker und S. Heinze, *Bose-Einstein condensates of atoms with arbitrary spin*, J. Phys. A: Math. Theor. **40**, 14811-14817 (2007)
- P. Van Isacker und S. Heinze, *Partial conservation of seniority and nuclear isomerism*, Phys. Rev. Lett. accepted for publication in the February 8 2008 issue

Des weiteren sind folgende Veröffentlichungen in Vorbereitung.

- S. Heinze und P. Van Isacker, *Seniority-conserving interactions*

Literaturverzeichnis

- [1] F. Iachello und A. Arima, *The interacting boson model*, Cambridge University Press (1987)
- [2] B. A. Brown, A. Etchegoyen, W. D. M. Rae, N. S. Godevin, W. A. Richter, Ch. Zimmerman, W. E. Ormand und J. S. Winfried, Computer Code OXBASH, MSU-NSCL Report no. 524 (1985 unpublished)
- [3] B. A. Brown, A. Etchegoyen, N. S. Godevin, W. D. M. Rae, W. A. Richter, W. E. Ormand, E. K. Warburton, J. S. Winfried, L. Zhao und Ch. Zimmerman MSU-NSCL report no. 1289 (2004)
- [4] O. Scholten, Programmpaket Phint (unpublished)
- [5] A. Frank und P. Van Isacker *Algebraic Methods in Molecular and Nuclear structure Physics*, John Wiley and Sons (1994)
- [6] E. T. Jaynes und F. W. Cumming, Proc. IEEE **51** 89 (1963)
- [7] F. Iachello and R. D. Levine, *Algebraic Theory of Molecules*, Oxford University Press, (1995)
- [8] H. Suhl, B. T. Matthias und L. Walker, Phys. Rev. Lett. **3** 552 (1959)
- [9] J. P. Elliott und P. G. Dawber, *Symmetry In Physics*, Oxford University Press (1979)
- [10] I. Talmi, *Simple Models of Complex Nuclei*, Harwood Academic Publishers (1993)
- [11] F. Iachello und P.V. Isacker, *The interacting boson fermion model*, Cambridge University Press (1991)
- [12] G. Racah, Phys. Rev **63**, 367 (1943)
- [13] G. Racah, in L. Farkas Memorial Volume, (Research council of Israel, Jerusalem, 1952) p. 294
- [14] B. H. Flowers, Proc. Roy. Soc. (London) A **212**, 248 (1952)
- [15] P.J. Redmond, Proc. Roy. Soc. **A222**(1954) 84
- [16] A. de-Shalit und I. Talmi *Nuclear Shell Theory*, Clarendon Press Oxford (1980)
- [17] B. F. Bayman und A. Lande, Nucl. Phys. **77**(1966) 1-80
- [18] X. Ji und M. Vallieres, Phys. Rev. C **77**(1987) 1583
- [19] A. Novoselsky, Katrief und R. Gilmore J. Math. Phys. **29**(1988) 1368
- [20] A. Novoselsky, M. Vallieres und R. Gilmore Phys. Rev. C **38**(1988) 1440
- [21] L. B. Hubbard, code JJCFP, Comput. Phys. Comm. **1**(1970) 225

- [22] D. Zwart, code GENESIS
- [23] H. Sun et al., Commun. Theor. Phys. **11**(1989) 441-447
- [24] H. Sun et al., J. Phys. A **22**(1989) 4769-4775
- [25] Y. Liu, H. Sun und E. Zhao, Comp. Phys. Comm. **70**(1992) 154-166
- [26] Y. Liu, Q. Han und J. Wang, Comp. Phys. Comm. **85**(1995) 89-98
- [27] J. Wang, Q. Han und Y. Liu, Comp. Phys. Comm. **85**(1995) 99-109
- [28] F. Iachello *Lie Algebras and Applications*, Springer-Verlag (2006)
- [29] T. Ottmann und P. Widmayer *Algorithmen und Datenstrukturen*, Spektrum Akademischer Verlag (1996)
- [30] Sergio Pissanetzky, *Sparse Matrix Technologie*
- [31] Y. Alhassid und A. Leviatan, J. Phys. A **25** (1992) L1265
- [32] A. Leviatan, Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 818
- [33] A. Leviatan, A. Novoselsky und I. Talmi, Phys. Lett. B **172** (1986) 144
- [34] P. Van Isacker, Phys. Rev. Lett. **83** (1999) 4269
- [35] A. Leviatan und P. Van Isacker, Phys. Rev. Lett. **89** (2002) 222501
- [36] S. G. Rohozinski, J. Phys. G **4** (1978) 1075
- [37] D. J. Rowe und G. Rosensteel, Phys. Rev. Lett. **87** (2001) 172501
- [38] G. Rosensteel und D. J. Rowe, Phys. Rev. C **67** (2003) 014303
- [39] S. Heinze und P. Van Isacker, Seniority-conserving interactions, *to be published*
- [40] P. Van Isacker und S. Heinze, Partial conservation of seniority and nuclear isomerism, Phys. Rev. Lett. accepted for publication
- [41] A. Escuderos und L. Zamick, Phys. Rev. C **73** (2006) 044302
- [42] W. J. Mills et al., Phys. Rev. C **75** 047302 (2007)
- [43] R. D. Lawson *Theory of the nuclear shell model*, Academic Press New York and London (1963)
- [44] C. K. Law, H. Pu und N. P. Bigelow, Phys. Rev. Lett. **81** 5257 (1998)
- [45] P. Van Isacker und S. Heinze, J. Phys. A: Math. Theor. **40** 14811 (2007)
- [46] A. Gheorghe und A. A. Raduta, J. Phys. A: Math. Gen. **37** 10951 (2004)
- [47] P. Cejnar, S. Heinze und M. Macek, Phys. Rev. Lett. **99**, 100601 (2007)
- [48] A. E. L. Diepering, O. Scholten und F. Iachello, Phys. Rev. Lett. **44** (1980) 1747
- [49] F. Iachello und N. V. Zamfir, Phys. Rev. Lett. **92** 212501 (2004)
- [50] C. Emary und T. Brandes, Phys. Rev. Lett. **90** 044101 (2003)
- [51] D. J. Rowe, C. Bahri und W. Wijesundera, Phys. Rev. Lett. **80** 4394 (1997)
- [52] M. Caprio, P. Cejnar und F. Iachello, arXiv:0707.0325v1 [quant-ph]

- [53] P. Cejnar, M. Macek, S. Heinze, J. Jolie und J. Dobes, J. Phys. A **39** L515 (2006)
- [54] P. Cejnar, S. Heinze und J. Jolie, Phys. Rev. C **68** (2003) 034326
- [55] S. Dusuel, J. Vidal, J. M. Arias, J. Dukelsky and J.E. Garcia-Ramos, Phys. Rev. C **72** 064332 (2005)
- [56] J. Jolie, P. Cejnar, R. F. Casten, S. Heinze, A. Linnemann und V. Werner, Phys. Rev. Lett. **89** (2002) 182502
- [57] N. V. Zamfir, P. von Brentano, R. F. Casten und J. Jolie, Phys. Rev. C **66**, 021304 (2002)
- [58] J. Dukelsky, C. Esebbag und P. Schuck, Phys. Rev. Lett. **87**, 066403 (2001)
- [59] J. Dukelsky, J. M. Arias, J. E. Garcia-Ramos und S. Pittel, arXiv:0310031v1 [nucl-th] (2003)
- [60] S. Heinze, P. Cejnar, J. Jolie und M. Macek, Phys. Rev. C **73**, 014306 (2006)
- [61] M. Macek, P. Cejnar, J. Jolie und S. Heinze, Phys. Rev. C **73**, 014307 (2006)
- [62] M. Zirnbauer, J. J. M. Verbaschroot und H. A. Weidenmüller, Nucl. Phys. A **411** 161-180 (1983)
- [63] M. V. Berry und M. Wilkinson, Proc. R. Soc. A **392** 15 (1984)
- [64] T. Kato *Perturbation Theory of Linear Operators* (Springer, New York, 1966)
- [65] U. Günther, I. Rotter und B. F. Samsonov, J. Phys. A **40** 8815 (2007)
- [66] I. Rotter, Phys. Rev. C **64** 034301 (2001)
- [67] W. D. Heiss und A. L. Sannino, Phys. Rev. A **43** 4159 (1990)
- [68] P. Cejnar, S. Heinze und J. Dobes, Phys. Rev. C **71**, 011304 (2005)
- [69] J. Jolie, Doktorarbeit an der Universität Gent (1986)
- [70] P. Van Isacker, J. Jolie und K. Heyde, Phys. Rev. Lett. **54**, 653 (1985)
- [71] J. Jolie, private communication
- [72] K. L. G. Heyde *The Nuclear Shell Model*, Springer-Verlag (1990)
- [73] Brian G. Wybourne, *Symmetry Principles and Atomic Spectroscopy*, John Wiley and Sons (1970)
- [74] D. E. Littlewood und A. R. Richardsen, Phil. Trans. Roy. Soc. (London) **A233** 99 (1934)
- [75] D. E. Littlewood, Trans. Roy. Soc. (London), **A239** 387 (1943)
- [76] M. J. Newell, Proc. Roy. Irish Acad, **54A**, 153 (1951)
- [77] D. E. Littlewood, J. London Math. Soc. **11**, 49 (1936)
- [78] P. Van Isacker, K. Heyde, J. Jolie und A. Severin, Annals of Physics, **171** 253 (1986)

Erklärung

Ich versichere, dass ich die von mir vorgelegte Dissertation selbständig angefertigt, die benutzten Quellen und Hilfsmittel vollständig angegeben und die Stellen der Arbeit – einschließlich Tabellen, Karten und Abbildungen –, die anderen Werken im Wortlaut oder dem Sinn nach entnommen sind, in jedem Einzelfall als Entlehnung kenntlich gemacht habe; dass diese Dissertation noch keiner anderen Fakultät oder Universität zur Prüfung vorgelegen hat; dass sie – abgesehen von unten angegebenen Teilpublikationen – noch nicht veröffentlicht worden ist sowie, dass ich eine solche Veröffentlichung vor Abschluss des Promotionsverfahrens nicht vornehmen werde. Die Bestimmungen dieser Promotionsordnung sind mir bekannt. Die von mir vorgelegte Dissertation ist von Prof. Dr. Jan Jolie betreut worden.

Teilpublikationen:

Teile des Kapitels 3.4 wurden veröffentlicht in:

- P. Van Isacker und S. Heinze, *Bose-Einstein condensates of atoms with arbitrary spin*, J. Phys. A: Math. Theor. **40**, 14811-14817 (2007)
- P. Van Isacker und S. Heinze, *Partial conservation of seniority and nuclear isomerism*, Phys. Rev. Lett. accepted for publication in the February 8 2008 issue

Eine weitere Veröffentlichung zu diesem Thema ist in Vorbereitung:

- S. Heinze und P. Van Isacker, *Seniority-conserving interactions*

Teile des Kapitels 4.1 wurden veröffentlicht in:

- S. Heinze, P. Cejnar, J. Jolie und M. Macek, *Evolution of spectral properties along the $O(6) - U(5)$ transition in the interacting boson model. I. Level dynamics*, Phys. Rev. C **73**, 014306 (2006)
- P. Cejnar, S. Heinze und M. Macek, *Coulomb Analogy for Non-Hermitian Degeneracies near Quantum Phase Transitions*, Phys. Rev. Lett. **99**, 100601 (2007)

Lebenslauf

Name: Stefan Heinze
Geburtsdatum: 23.07.1976
Geburtsort: Köln
Mutter: Christa Prudlo geb. Krawetzke
Vater: Ludwig Heinze
Staatsangehörigkeit: deutsch
Familienstand: ledig
Adresse: Vellbrückstr. 17, 50226 Frechen

Schulausbildung:

08/1983 - 07/1987 Grundschule Edith-Stein in Frechen-Buschbell
08/1987 - 07/1989 Realschule Frechen
08/1989 - 05/1996 Gymnasium Frechen
05/1996 Abitur

Zivildienst:

06/1996 - 07/1997 Krankenhaus Frechen

Hochschulstudium:

07/1997 Immatrikulation an der Universität zu Köln für das Studienfach Physik/Diplom
09/2004 Diplom im Fach Physik mit dem Thema: „Form-Quantenphasenübergänge in Atomkernen“
seit 09/2004 Promotionsstudium im Fach Physik

Arbeitsverhältnisse am Institut für Kernphysik der Universität zu Köln:

11/2001 - 09/2004 Studentische Hilfskraft
seit 09/2004 Wissenschaftlicher Mitarbeiter