

$\int \Phi_s^* (1) \Phi_{ij} (1\ 2) \, dq_1 = 0$ [for $s = 1, 2, \dots, A$, with $(i\ j)$ included] is introduced⁴. In this case one gets⁴

$$(H_{ij} + P_{12} O_{ij}) \Phi_{ij} = \bar{\epsilon}_{ij} \Phi_{ij} - P_{12} O_{ij} \mu_{ij} \quad (7)$$

⁴ O. SINANOGLU, J. Chem. Phys. **36**, 706, 3198 [1962].

The Variational Solution of the Schrödinger Equation of Finite Fermion Systems

II. Three-Particle Correlations and Higher Order Effects

LEVENTE SZASZ and JOHN SCHROEDER

Department of Physics, Fordham University, New York, USA

(Z. Naturforsch. **24 a**, 1856—1857 [1969]; received 14 September 1969)

In the preceding note¹ we outlined a method for obtaining the variational solution of the Schrödinger equation of finite Fermion systems². The energy of the system was written in the form $E_V = E_F + \sum_{n=2}^A \tilde{E}^{(n)}$ where

E_F is the Hartree-Fock energy and $\tilde{E}^{(n)}$ is the correlation energy of the n -particle approximation ($2 \leq n \leq A$). In the preceding note¹ (referred to as I) we outlined the calculation of E_F and $\tilde{E}^{(2)}$. In order to get the 3-rd order correlation energy we minimize the energy of the system using the trial function

$$\psi = \psi_F + f^{(3)}(i\ j\ k) \quad (1)$$

where the notation is the same as in I. This method may be called the method of “independent triplets”³; the results again depend on the subsidiary conditions. If the 3-particle functions Φ_{ijk} satisfy the non-restrictive *partial orthogonality* condition² (strong-orthogonal to all HF orbitals except Φ_i, Φ_j, Φ_k) we get the equation

$$[H_{ijk} + P_{123} O_{ijk}] \Phi_{ijk} = \bar{\epsilon}_{ijk} \Phi_{ijk} + [\bar{\epsilon}_{ijk} - P_{123} O_{ijk}] \mu_{ijk} \quad (2)$$

where $\bar{\epsilon}_{ijk}$ is the correlation energy of one triplet (relative to E_F) and the symbols are the logical generalizations of the symbols used in Eq. (5), of I. Using the Φ_{ijk} 's computed from (2), one at a time, one gets

$$\tilde{E}^{(3)} = \sum_{i < j < k} \frac{\bar{\epsilon}_{ijk} N_{ijk}}{N_3} + \frac{\chi_3}{N_3} - \tilde{E}^{(2)} \left(\frac{N_3 - N_2}{N_3} \right) \quad (3)$$

where N_{ijk} is the normalization constant if only the triplet (ijk) is correlated, N_2 and N_3 are the full normalization constants in the two- and three-particle approximations; χ_3 contains the off-diagonal matrix components of the Hamiltonian between 2- and 3-particle functions.

Reprint requests to Dr. L. SZASZ, Department of Physics, Fordham University, New York, N. Y. 10 458, U.S.A.

¹ L. SZASZ and J. SCHROEDER, Z. Naturforsch. **24 a**, 1855 [1969].

² The method is an improved generalization of a theory previously developed for Coulomb forces: L. SZASZ, Z. Natur-

forsch. **14 a**, 1014 [1959]; **15 a**, 909 [1960]; Phys. Rev. **126**, 163 [1962]; **132**, 936 [1963]; J. Math. Phys. **3**, 1147 [1962].

If Φ_{ijk} in (1) is subjected to the slightly restrictive *total orthogonality* (strong orthogonal to all HF orbitals) then we obtain an equation similar to (2) but a closer investigation shows that it has only the trivial solutions $\bar{\epsilon}_{ijk} = 0$. Therefore, in the case of total orthogonality the energy has to be minimized with respect to the trial function

$$\psi = \psi_F + \sum_{i < j} f^{(2)}(ij) + f^{(3)}(ijk), \quad (4)$$

and we get, assuming that ψ_F and the $f^{(2)}$'s are known from the preceding step the equation for Φ_{ijk} :

$$[H_{ijk} + P_{123} O_{ijk}] \Phi_{ijk} = (\bar{\epsilon}_{ijk} + \tilde{E}^{(2)}) \Phi_{ijk} - P_{123} L_{ijk}, \quad (5)$$

where the symbols are the same as in (2) except the projection operators now remove all HF orbitals; the function L_{ijk} contains the Φ_{ij} 's which are present in the equation because of (4). Using the Φ_{ijk} 's, computed from (5), one at a time, we get

$$\tilde{E}^{(3)} = \sum_{i < j < k} \frac{\bar{\epsilon}_{ijk} N_{ijk}}{N_3} + \frac{\chi_3}{N_3}, \quad (6)$$

where N_{ijk} is the normalization constant of (4), N_3 is the full normalization constant in the three-particle approximation and χ_3 contains the off-diagonal matrix components of the Hamiltonian with respect to Φ_{ijk} 's with different orbital indices.

Beginning with the 4-particle approximation the correlation function has to be written as the sum of real n -particle collisions (“linked clusters”) plus simultaneous 2-, 3-, etc. particle collisions (“unlinked clusters”). We put $\Phi_{ijkl} = \Phi_{ijkl}^L + \Phi_{ijkl}^U$ where the first is the “real” 4-particle collision, the second is the product of simultaneous two-particle collisions. By putting $\Phi^U = 0$ first, one gets Φ^L in the same way as in the 3-particle case; then adding Φ^U one gets the complete $\tilde{E}^{(4)}$. (One can assume that Φ^U is built from 2-particle Φ_{ij} 's). Using total orthogonality we get

$$\tilde{E}^{(4)} = \sum_{i, j, k, l} \frac{\bar{\epsilon}_{ijkl} N_{ijkl}}{N_4} + \sum_{i, j, k, l} \frac{A_{ijkl}^U + A_{ijkl}^L}{N_4} + \frac{X_4^L + X_4^{LU} + X_4^U}{N_4}, \quad (7)$$

where $\bar{\epsilon}_{ijkl}$, N_{ijkl} , N_4 and X_4^L are similar to the corresponding symbols in (6); A_{ijkl}^U and X_4^U are the dia-

forsch. **14 a**, 1014 [1959]; **15 a**, 909 [1960]; Phys. Rev. **126**, 163 [1962]; **132**, 936 [1963]; J. Math. Phys. **3**, 1147 [1962].

³ Generalization of the “independent pair” model. See Ref. ³ in I.



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitalized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition “no derivative works”). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

gonal- and off-diagonal matrix components with respect to Φ_{ijkl}^U and A_{ijkl}^{LU} and X_4^{LU} are the matrix components connecting linked and unlinked correlation functions.

Summarizing, we approach the exact solution of the Schrödinger equation in steps where at each step we calculate the 2-, 3-, ..., n -th order correlation functions ($2 \leq n \leq A$) from independent equations but we do not neglect anything in the energy expression. The calculation of the n -th order function requires the knowledge only of the lower order functions. The energy is obtained as the finite sum

$$E_V = E_F + \sum_{n=2}^A \tilde{E}^{(n)}.$$

For $\tilde{E}^{(2)}$, $\tilde{E}^{(3)}$ and $\tilde{E}^{(4)}$ we gave explicit expressions; the rest can be constructed similarly. Depending on the orthogonality condition, two different formalisms can be developed. The partial orthogonality gives simpler equations but more complex energy expressions; the total orthogonality gives more complex equations but simpler energy expressions. The computed energies converge toward the exact in both cases.

Bemerkung über nicht abgeschlossene Systeme von Massenpunkten

K. O. THIELHEIM

Institut für Reine und Angewandte Kernphysik
der Universität Kiel

(Z. Naturforsch. **24 a**, 1857 [1969]; eingegangen am 19. September 1969)

Wir gehen davon aus, daß ein (nicht relativistisches) System von Massenpunkten vorliegt, von dem jedoch nur ein (nicht abgeschlossenes) Teilsystem betrachtet wird. Wir wollen Energie, Impuls und Drehimpuls des Gesamtsystems berechnen, wobei wir uns nur auf das dynamische Verhalten des Teilsystems beziehen.

Dazu wird das Gesamtsystem durch eine Lagrange-Funktion L charakterisiert, die von den das Teilsystem kennzeichnenden Ortsvektoren $\mathbf{r}_\alpha(t)$, $\alpha = 1, \dots, n$, und deren Ableitungen nach der Zeit bis zur N -ten Ordnung abhängt. Die Lagrange-Funktion wird so gewählt, daß die aus dem Hamiltonschen Prinzip resultierenden Bewegungsgleichungen

$$[L]_\alpha \equiv \sum_{j=0}^N (-1)^j \frac{d^j}{dt^j} \frac{\partial L}{\partial (d^j \mathbf{r}_\alpha / dt^j)} = 0 \quad (1)$$

das dynamische Verhalten des Teilsystems beschreiben.

Bei Symmetrietransformationen wird nun in Analogie zur Theorie klassischer Felder höherer Ordnung¹ von der numerischen Invarianz des Wirkungsintegrals für beliebige Grenzen ausgegangen, so daß sich die infinitesimale Änderung von L infolge der Änderung der funktionalen Abhängigkeit von $\mathbf{r}_\alpha$ von t wie folgt ergibt.

$$\delta_F L = - \frac{d}{dt} (L \delta t). \quad (2)$$

Wenn also eine r -dimensionale Liesche Symmetriegruppe mit der Parametrisierung ε_l , $l = 1, \dots, r$ gegeben ist, dann wird

$$\delta t = \sum_{l=1}^r (\delta t)_l \varepsilon_l \quad \text{und} \quad \delta_F \mathbf{r}_\alpha = \sum_{l=1}^r (\delta_F \mathbf{r}_\alpha)_l \varepsilon_l.$$

Sonderdruckanforderungen erbeten an Univ.-Doz. Dr. K. O. THIELHEIM, Institut für Reine und Angewandte Kernphysik der Universität Kiel, D-2300 Kiel, Olshausenstr. 40/60.

Für die Lösungen von (1) ergeben sich damit aus (2) nach Umformung der linken Seite die Erhaltungssätze

$$0 = \frac{d}{dt} \left\{ L(\delta t)_l + \sum_{\substack{\alpha=1, n \\ j=0, N-1 \\ i=0, j}} (-1)^i \frac{d^{j-i} \delta_F \mathbf{r}_\alpha}{dt^{j-i}} \frac{d^i}{dt^i} \frac{\partial L}{\partial (d^{j+1} \mathbf{r}_\alpha / dt^{j+1})} \right\}, \quad (3)$$

oder anders geschrieben

$$0 = \frac{d}{dt} \left\{ L(\delta t)_l - \sum_{\substack{\alpha=1, n \\ j=1, N \\ i=0, N-j}} (-1)^j \left(\frac{j}{i+j} \right) \frac{d^{j-1}}{dt^{j-1}} \cdot \left(\frac{d^i \delta_F \mathbf{r}_\alpha}{dt^i} \frac{\partial L}{\partial (d^{j+i} \mathbf{r}_\alpha / dt^{j+i})} \right) \right\}. \quad (3')$$

So ergibt sich z. B. aus der Invarianz gegen zeitliche Translation, also $\delta \mathbf{r}_\alpha = 0$ und $\delta_F \mathbf{r}_\alpha = -\mathbf{r}_\alpha \delta t$, die Gesamtenergie

$$H = \sum_{\substack{\alpha=1, n \\ j=0, N-1 \\ i=0, j}} (-1)^i \frac{d^{j-i+1} \mathbf{r}_\alpha}{dt^{j-i+1}} \frac{d^i}{dt^i} \frac{\partial L}{\partial (d^{j+1} \mathbf{r}_\alpha / dt^{j+1})} - L, \quad (4)$$

ferner aus der Invarianz gegen räumliche Translation, also $\delta t = 0$ und $\delta_F \mathbf{r}_\alpha = \delta \mathbf{r}_\alpha$, der Gesamtimpuls

$$\mathfrak{P} = \sum_{\substack{\alpha=1, n \\ j=0, N-1}} (-1)^j \frac{d^j}{dt^j} \frac{\partial L}{\partial (d^{j+1} \mathbf{r}_\alpha / dt^{j+1})} \quad (5)$$

und schließlich aus der Invarianz gegen räumliche Drehung, also $\delta t = 0$ und $\delta_F \mathbf{r}_\alpha = [\boldsymbol{\epsilon}, \mathbf{r}_\alpha]$ der Gesamtdrehimpuls

$$\mathfrak{M} = \sum_{\substack{\alpha=1, n \\ j=0, N-1 \\ i=0, j}} (-1)^i \left[\frac{d^{j-i} \mathbf{r}_\alpha}{dt^{j-i}} \frac{d^i}{dt^i} \frac{\partial L}{\partial (d^{j+1} \mathbf{r}_\alpha / dt^{j+1})} \right]. \quad (6)$$

¹ K. O. THIELHEIM, Proc. Phys. Soc. London **91**, 798 [1967].