langt man also zusätzlich von den Lösungen von (49), (50), daß der Mittelwert der Lösung über jede feste Fläche $x^1 = \text{const}$ Null ist, erhält man eindeutige Lösungen. Damit ist der Beweis von (S2) abgeschlossen.

Die Beziehungen (19) und (39), die beim Beweis von (S2) neben dem Operator Λ^* (Graßmannsche Ergänzung des Nabla-Operators der Flächenschar) eine hervorragende Rolle spielen, sind interessanterweise auch sehr wichtig in der statistischen Mechanik, wenn man ein invariantes Maß auf den Flächen konstanter Energie definieren will (vgl. z. B. CHINTSCHIN [12]).

Ich danke der Deutschen Forschungsgemeinschaft für finanzielle Unterstützung und dem Referenten für den Hinweis, der zur vorliegenden verallgemeinerten Form von (S7) geführt hat. Herrn Prof. Dr. E. RICHTER danke ich sehr herzlich für die vielen anregenden Gespräche.

1 W. M. ELSASSER, Phys. Rev. **69**, 106 [1946].
2 G. BACKUS, A Class of Self-Sustaining Dissipative Dynamos, Annals of Physics **4**, 372 [1958].
3 P. M. MORSE u. H. FESHBACH, Methods of Theoretical Physics II, McGraw-Hill, New York 1953, S. 1766.
4 A. A. BLANK, K. O. FRIEDRICHS u. H. GRAD, Theory of Maxwell's Equations Without Displacement Current, New York University, Courant Institute of Mathematical Sciences Report NYO-6486-V [1957].
5 G. GERLICH, Tensorpotentiale in der Magnetohydrodynamik und das Dynamoproblem, Diss., Technische Universität Braunschweig 1970.
6 E. KAMKE, Differentialgleichungen I, 4. Aufl., Akad. Verlagsges. Geest & Portig, Leipzig 1962, S. 124.
7 H. GRAUERT u. W. FISCHER, Differential- und Integralrechnung II, Heidelberger TB, Bd. 36, Springer-Verlag, Berlin 1968, S. 92.
8 H. GRAD u. H. RUBIN, Hydromagnetic Equilibrium and Force-free Fields, Proceedings of the Second United Nations Intern. Conf. on the Peaceful Uses of Atomic Energy, Geneva 1958, Vol. 31, S. 195.
9 L. D. PICHAKCHI, Sov. Phys. JETP **23**, 542 [1966].
10 S. I. BRAGINSKII, Sov. Phys. JETP **20**, 726 [1965].
11 G. HELLWIG, Differentialoperatoren der mathematischen Physik, Springer-Verlag, Berlin 1964, S. 185.
12 A. J. CHINTSCHIN, Mathematische Grundlagen der statistischen Mechanik, BI, Mannheim 1964, Bd. 58/58a, S. 41 ff.

Algebraische Lösung des Eigenwertproblems im $N\Theta\Theta$-Sektor des Lee-Modells

K. HELMERS † und H. v. DEWITZ

(Z. Naturforsch. **27 a**, 1172—1176 [1972]; eingegangen am 12. Juni 1972)

An Algebraic Solution of the Eigenvalue Problem in the $N\Theta\Theta$-Sector of the Lee-Model

Trying to write the $N\Theta$-eigenstates of the Lee-model in a more compact way, we define operators containing the $N\Theta$-scattering-amplitudes. With these operators, the structure of the Hamiltonian can be strongly simplified. — It is now possible to solve the eigenvalue-problem in the $N\Theta\Theta$-sector with few simple, pure algebraic, calculations.

1. Einleitung

Es ist bekannt, daß die stationären Zustände im $N\Theta\Theta$-Sektor des LEE-Modells [1] aus der Lösung der KÄLLÉN-PAULIschen Integralgleichung [2] bestimmt werden können. Sie wurde von verschiedenen Autoren [3–8] unter Benützung der Theorie der analytischen Funktionen berechnet und in geschlossener Form dargestellt. — Andererseits hat FIVEL [9] gezeigt, daß man das Eigenwertproblem im $N\Theta\Theta$-Sektor auch auf rein algebraischem Wege lösen kann. Seine Methode besteht darin, den Hamilton-Operator so zu transformieren, daß ein Problem mit separablem Potential entsteht, das auf ein System linearer Gleichungen reduziert werden kann. Die erforderlichen Rechnungen sind aber sehr kompliziert; insbesondere ist es schwierig, seine Lösung mit der der vorher erwähnten Autoren zu vergleichen. — BOLSTERLI [10] verwendet die ladungserhöhenden Operatoren a_k^* und $v^* N$, um vom $N\Theta$- in den $N\Theta\Theta$-Sektor zu gelangen.

Ähnlich verfahren v. DEWITZ-HELMERS [11], um die Resolvente in diesem Sektor zu berechnen, mit der man über die Lippmann-Schwinger-Gleichungen das Eigenwertproblem lösen kann.

In der vorliegenden Arbeit soll der Hamilton-Operator auf die Form $H = \int \mathrm{d}q \; q_0 \, c_q^* \, c_q$ gebracht werden. Die Operatoren c_q^*, c_q enthalten die α- und β-Amplituden der Eigenzustände des $N\Theta$-Sektors. Durch diese vereinfachte Struktur von H kann das Eigenwertproblem im $N\Theta\Theta$-Sektor sehr leicht und auf rein algebraischem Wege gelöst werden.

Sonderdruckanforderungen an H. v. DEWITZ, Lehrstuhl Prof. Dr. G. SÜSSMANN, Sektion Physik der Universität München (Theoret. Physik), *D-8000 München 13*, Schellingstr. 4/III.

2. Grundlagen

Der übliche Hamilton-Operator des Lee-Modells

$$H := H_0 + H_1 \tag{1}$$

zerfällt in einen „ungestörten" Term:

$$H_0 := M_0\, V^* V + m\, N^* N + \int \mathrm{d}k\, k_0\, a^k\, a_k \tag{2}$$

und einen „Wechselwirkungsterm":

$$H_1 := V^* N A + N^* V A^*. \tag{3}$$

Hierbei sind: V, N, a_k die Vernichtungsoperatoren der V-, N-, Θ-Teilchen und V^*, N^*, a^k die entsprechenden Erzeugungsoperatoren.

Ihre Vertauschungsrelationen sind:

$$\{V^*, V\} = \{N^*, N\} = 1; \tag{4}$$

$$[a_k, a^l] = \delta\,(k-l) =: \delta_l{}^k. \tag{5}$$

Alle anderen Kommutatoren bzw. Antikommutatoren verschwinden.

In (2) hat M_0 die Bedeutung der „nackten" Masse des V-Teilchens; m bedeutet die nackte (und physikalische) Masse des N-Teilchens. k_0 ist die relativistische Masse (Energie)

$$k_0 := \underset{+}{\sqrt{\mu^2 + k^2}} \tag{6}$$

des Θ-Teilchens.

Gleichung (6) stellt das einzige relativistische Rudiment der Theorie dar; μ ist in ihr die Ruhemasse des Θ-Teilchens. – k, k', l usw. sind Dreierimpulse; die relativistischen Energien werden analog zu (6) als k_0, k_0', l_0 usw. geschrieben. Volumenelemente im dreidimensionalen Raum schreiben wir einfach als $\mathrm{d}k$, $\mathrm{d}k'$, $\mathrm{d}l$ usw. –

In (3) ist:

$$A := \int \mathrm{d}k\, v^k\, a_k; \quad A^* = \mathrm{d}k\, v_k\, a^k; \quad v_k := (v^k)^*; \quad (a^k)^* := a_k. \tag{7}$$

Das Sternchen * hat hierbei die übliche Bedeutung der komplex konjugierten c-Zahl oder des hermitesch adjungierten Operators. – Bei allen Größen, die sich auf das Θ-Teilchen beziehen, kann man diese Schreibweise vereinfachen, indem man wie in (7) den Stern durch Übergang von oberer zu unterer Indizierung ersetzt. Von „Summationskonventionen" soll zunächst abgesehen werden.

Die Funktion v^k des Dreierimpulses k ist in weitem Ausmaß beliebig. Sie soll bloß so glatt sein und für $|k| \to \infty$ so rasch abfallen, daß alle im folgenden auftretenden Größen existieren, in denen sie vorkommt. – Mit dieser Forderung vermeiden wir von Anfang an alle Schwierigkeiten mit sogenannten Geistern und indefiniter Metrik.

Für das Fock-Raum-Vakuum ω gilt:

$$V\,\omega = N\,\omega = a_k\,\omega = 0; \quad \langle \omega \,|\, \omega \rangle = 1. \tag{8}$$

Man verifiziert leicht, daß

$$B := V^* V + N^* N \tag{9}$$

und

$$Q := V^* V + \int \mathrm{d}k\, a^k\, a_k \tag{10}$$

miteinander und mit H kommutieren. Man identifiziert B mit dem Baryonenzahl- und Q mit dem Ladungszahloperator.

3. Der neue Hamilton-Operator

Im folgenden beschränken wir uns auf den Fall: V instabil. Es gibt dann nur Lösungen des zu H gehörenden Eigenwertproblems, die „Streuzuständen" entsprechen. Ist ein V-Bindungszustand vorhanden, so können die angestellten Überlegungen leicht auf diesen Fall verallgemeinert werden.

Die Lösungen der Schrödinger-Gleichung

$$H\,\psi = E\,\psi \tag{11}$$

im $N\Theta$-Sektor zu den Eigenwerten $E = m + q_0$ (q ist der Impuls des freien Θ-Teilchens, das am N-Teilchen gestreut wird) haben die Gestalt

$$\psi^q = \alpha^q\, V^*\, \omega + \int \mathrm{d}k\, \beta^q{}_k\, a^k\, N^*\, \omega\,. \tag{12}$$

Für die Amplituden α^q, $\beta^q{}_k$ ergeben sich durch Einsetzen in (11):

$$(m + q_0 - M_0)\; \alpha^q = \int \mathrm{d}l\, v^l\, \beta^q{}_l\,, \tag{13 a}$$

$$(q_0 - k_0)\; \beta^q{}_k = \alpha^q\, v_k\,. \tag{13 b}$$

Das System der ψ^q ist vollständig und orthonormiert [12]. Es sei nun

$$c^q := \beta^q + \alpha^q\, V^* N\,, \tag{14}$$

mit

$$\beta^q := \int \mathrm{d}k\, \beta^q{}_k\, a^k\,. \tag{15}$$

Es interessieren die Kommutatoreigenschaften der c^q:

$$[c^{q_1}, c^{q_2}] = 0\,, \tag{16}$$

$$[c_r, c^q] = [\beta_r, \beta^q] + \alpha_r\, \alpha^q [N^* V, V^* N]. \tag{17}$$

Wegen der Orthonormiertheit von (12) ist

$$[\beta_r, \beta^q] = \delta_r{}^q - \alpha_r\, \alpha^q\,. \tag{18}$$

Für den zweiten Term von (17) ergibt sich [vgl. (9)]:

$$[N^* V, V^* N] = B - 2\, V^* V; \tag{19}$$

also insgesamt:

$$[c_r, c^q] = \delta_r{}^q + \alpha_r\, \alpha^q\, (B - 1 - 2\, V^*\, V)\,. \tag{20}$$

Wichtig ist nun, daß die in H auftretenden Operatoren a^k und $V^*\, N$ sich wegen der Vollständigkeit der ψ^q, also (nach Parseval) wegen

$$\int \mathrm{d}q\, \beta^q{}_k\, \beta_q{}^l = \delta_k{}^l; \quad \int \mathrm{d}q\, \alpha^q\, \beta_q{}^l = 0; \\ \int \mathrm{d}q\, \alpha^q\, \alpha_q = 1 \tag{21}$$

durch die c^q ausdrücken lassen:

$$\int \mathrm{d}q\, c^q\, \beta_q{}^l = \int \mathrm{d}k\, a^k \int \mathrm{d}q\, \beta^q{}_k\, \beta_q{}^l \\ + V^*\, N \int \mathrm{d}q\, \alpha^q\, \beta_q{}^l = a^l; \tag{22}$$

$$\int \mathrm{d}q\, c^q\, \alpha_q = \int \mathrm{d}k\, a^k \int \mathrm{d}q\, \beta^q{}_k\, \alpha_q \\ + V^*\, N \int \mathrm{d}q\, \alpha^q\, \alpha_q = V^*\, N\,. \tag{23}$$

Aus dem letzten Term von H_0 [vgl. (2)] wird daher:

$$H_0{}' := \int \mathrm{d}k\, k_0\, a^k\, a_k = \int \mathrm{d}k\, \mathrm{d}q\, c^q (k_0\, \beta_q{}^k)\, a_k\,. \tag{24}$$

Mit Gl. (13 b) folgt:

$$H_0{}' = \int \mathrm{d}q\, c^q\, q_0 \int \mathrm{d}k\, \beta_q{}^k\, a_k - A \int \mathrm{d}q\, c^q\, \alpha_q\,. \tag{25}$$

Wegen (14) und (23) wird

$$H_0{}' = \int \mathrm{d}q\, q_0\, c^q\, c_q - \int \mathrm{d}q\, q_0\, c^q\, \alpha_q\, N^*\, V - V^*\, N\, A\,. \tag{26}$$

So ergibt sich für H [vgl. (9)]:

$$H = m\, B + (M_0 - m)\, V^*\, V + \int \mathrm{d}q\, q_0\, c^q\, c_q \\ + (A^* - \int \mathrm{d}q\, q_0\, c^q\, \alpha_q)\, N^*\, V. \tag{27}$$

Es ist

$$A^* = \int \mathrm{d}k\, v_k\, a^k = \int \mathrm{d}q\, c^q \int \mathrm{d}k\, v_k\, \beta_q{}^k \\ = \int \mathrm{d}q\, c^q (q_0 + m - M_0)\, \alpha_q\,, \tag{28}$$

[vgl. (13 a)].

Für den letzten Term in (27) ergibt sich damit

$$(A^* - \int \mathrm{d}q\, q_0\, c^q\, \alpha_q)\, N^*\, V = (m - M_0) \int \mathrm{d}q\, c^q\, \alpha_q\, N^*\, V \\ = (m - M_0)\, V^*\, N\, N^*\, V, \tag{29}$$

[vgl. (23)].

Nun gilt:

$$V^*\, N\, N^*\, V = V^*\, V\, (2 - B)\,. \tag{30}$$

So erhalten wir

$$H = (M_0 - m)\, V^*\, V\, (B - 1) + m\, B + \int \mathrm{d}q\, q_0\, c^q\, c_q\,. \tag{31}$$

Im Unterraum $B = 1$ kann man die Summe der ersten beiden Terme durch m ersetzen.

In H kommt für $B = 1$ die „nackte Masse" M_0 des V-Teilchens nicht mehr vor. Die Operatoren c^q, c_q genügen zwar nicht denselben Vertauschungsrelationen wie die a^q, a_q, jedoch sind in den Kommutatoren nur physikalisch relevante Größen enthalten.

Für $B = 1$ ersetzen wir H durch den „effektiven" Hamilton-Operator

$$\overline{H} = \int \mathrm{d}q\, q_0\, c^q\, c_q; \tag{32}$$

die Subtraktion des trivialen Terms $m\, B = m$ ist offenbar bequem.

4. Das Eigenwertproblem im $N\Theta\Theta$-Sektor

Mit den neuen Operatoren c^q, c_q gewinnen die Eigenzustände des $N\Theta$-Sektors die einfache Form:

$$\psi^q = c^q\, N^*\, \omega \tag{33}$$

[vgl. (12)].

Gleichung (32) suggeriert nun für die Eigenzustände im $N\Theta\Theta$-Sektor die Gestalt

$$\chi^{q_1 q_2} := c^{q_1}\, c^{q_2}\, N^*\, \omega\,. \tag{34}$$

Man sieht jedoch sofort, daß die $\chi^{q_1 q_2}$ wegen den Vertauschungsrelationen (16) und (20) leider die Schrödinger-Gl. (11) nicht erfüllen. – Auf jeden Fall gehört $\chi^{q_1 q_2}$ jedoch zum $N\Theta\Theta$-Sektor. Das System $\{\chi^{q_1 q_2}\}$ ist sogar vollständig. Die orthonormierte Basis $\{a^{k_1}\, a^{k_2}\, N^*\, \omega,\ a^k\, V^*\, \omega\}$ läßt sich nämlich wegen Gln. (22) und (23) durch die $\chi^{q_1 q_2}$ ausdrücken. [Im folgenden soll die Integrationskonvention $s_q\, t^q = \int \mathrm{d}q\, s(q)\, t^*(q)$ gelten]:

$$a^{k_1}\, a^{k_2}\, N^*\, \omega = \beta_{q_1}{}^{k_1}\, \beta_{q_2}{}^{k_2}\, c^{q_1}\, c^{q_2}\, N^*\, \omega \\ = \beta_{q_1}{}^{k_1}\, \beta_{q_2}{}^{k_2}\, \chi^{q_1 q_2} \tag{35}$$

$$a^k\, V^*\, \omega = a^k (V^*\, N)\, N^*\, \omega \\ = \beta_{q_1}{}^k\, \alpha_{q_2}\, c^{q_1}\, c^{q_2}\, N^*\, \omega \\ = \beta_{q_1}{}^k\, \alpha_{q_2} \chi^{q_1 q_2}\,. \tag{36}$$

Die $\chi^{q_1 q_2}$ sind jedoch nicht linear unabhängig. Sei nämlich:

$$\lambda_{q_1 q_2} := \alpha_{q_1}\, \alpha_{q_2} \cdot \Gamma; \quad \Gamma \in \boldsymbol{C}\,. \tag{37}$$

Dann gilt:

$$\lambda_{q_1 q_2}\, \chi^{q_1 q_2} = \Gamma\, \alpha_{q_1}\, c^{q_1}\, \alpha_{q_2}\, c^{q_2}\, N^*\, \omega \\ = \Gamma\ V^*\, N\, V^*\, N\, N^*\, \omega = 0\,. \tag{38}$$

Man kann sogar zeigen, daß zwischen den $\chi^{q_1 q_2}$ nur die eine Relation

$$\Gamma\, \alpha_{q_1}\, \alpha_{q_2}\, \chi^{q_1 q_2} = 0 \tag{39}$$

besteht.

Sei nämlich

$$0 = \lambda_{q_1 q_2}\, \chi^{q_1 q_2}\,, \tag{40}$$

mit

$$\lambda_{q_1 q_2} = \lambda_{q_2 q_1} \,. \tag{41}$$

Dann ist

$$0 = \lambda_{q_1 q_2} c_r \chi^{q_1 q_2} \tag{42}$$

für alle r. — Nun ist wegen

$$c_r N^* \omega = 0: \tag{43}$$

$$c_r \chi^{q_1 q_2} = [c_r, c^{q_1}] c^{q_2} N^* \omega + c^{q_1} [c_r, c^{q_2}] N^* \omega \,. \tag{44}$$

Unter Berücksichtigung der Kommutatorregel (20) ergibt sich:

$$c_r \chi^{q_1 q_2} = \delta_r{}^{q_1} \psi^{q_2} + \delta_r{}^{q_2} \psi^{q_1} - 2\, a_r\, a^{q_1} a^{q_2} V^* \omega \,. \tag{45}$$

Eingesetzt in (42):

$$0 = 2\, \lambda_{r q_2} \psi^{q_2} - 2\, a_r\, \lambda_{q_1 q_2} a^{q_1} a^{q_2} V^* \omega \,. \tag{46}$$

Diese Gleichung wird mit c_p multipliziert:

$$0 = 2\, \lambda_{r q_2} c_p c^{q_2} N^* \omega - 2\, a_r \lambda_{q_1 q_2} a^{q_1} a^{q_2} c_p V^* \omega \tag{47}$$

$$\begin{aligned} &= 2\, \lambda_{r q_2} c^{q_2} c_p N^* \omega + 2\, \lambda_{r q_2} [\delta_p{}^{q_2} + a_p\, a^{q_2} \\ &\qquad (B - 1 - 2\, V^* V)]\, N^* \omega \\ &\quad - 2\, a_r\, \lambda_{q_1 q_2} a^{q_1} a^{q_2} a_p N^* \omega \,. \end{aligned} \tag{48}$$

Wegen (43) ist dann

$$0 = (\lambda_{rp} - a_r\, a_p\, \lambda_{q_1 q_2} a^{q_1} a^{q_2})\, N^* \omega \,. \tag{49}$$

Es folgt:

$$\lambda_{rp} = \Gamma\, a_r\, a_p; \qquad \Gamma \in \boldsymbol{C} \,. \tag{50}$$

Die möglichen nicht-trivialen linearen Relationen zwischen den $\chi^{q_1 q_2}$ bilden also die 1-parametrige Schar (39). —

Da das System $\{\chi^{q_1 q_2}\}$ im $N\Theta\Theta$-Sektor vollständig ist, läßt sich die Lösung ψ des Eigenwertproblems

$$\overline{H}\, \psi = \varepsilon\, \psi \tag{51}$$

in diesem Sektor als Linearkombination der $\chi^{q_1 q_2}$ ansetzen:

$$\psi = \lambda_{q_1 q_2} \chi^{q_1 q_2}; \qquad \lambda_{q_1 q_2} = \lambda_{q_2 q_1} \,. \tag{52}$$

Unter Berücksichtigung von (45) folgt mit (32):

$$\begin{aligned} \overline{H}\, \psi = \int \mathrm{d}q\, q_0\, c^q \lambda_{q_1 q_2} \{ &\delta_q{}^{q_1} \psi^{q_2} + \delta_q{}^{q_2} \psi^{q_1} \\ &- 2\, a_q\, a^{q_1} a^{q_2} a_{q'}\, c^{q'} N^* \omega \} \,, \end{aligned} \tag{53}$$

denn

$$V^* \omega = V^* N N^* \omega = c^{q'} a_{q'} N^* \omega \,. \tag{54}$$

Heben wir jetzt die Integrationskonvention wieder auf, so wird:

$$\begin{aligned} \overline{H}\, \psi &= \int \mathrm{d}q_1\, \mathrm{d}q_2\, \lambda_{q_1 q_2} (q_{10} + q_{20})\, \chi^{q_1 q_2} \\ &\quad - 2 \int \mathrm{d}q_1\, \mathrm{d}q_2\, \lambda_{q_1 q_2} a^{q_1} a^{q_2} \int \mathrm{d}q\, \mathrm{d}q'\, q_0\, a_q\, a_{q'}\, \chi^{q q'} . \end{aligned} \tag{55}$$

Wir ersetzen q_0 durch $2^{-1}(q_0 + q_0')$:

$$\begin{aligned} \overline{H}\, \psi = \int \mathrm{d}q_1\, \mathrm{d}q_2\, \chi^{q_1 q_2} [\, &(q_{10} + q_{20})\, \lambda_{q_1 q_2} \\ &- \gamma\, a_{q_1} a_{q_2} (q_{10} + q_{20})] \,; \end{aligned} \tag{56}$$

wobei

$$\gamma := \int \mathrm{d}q_1\, \mathrm{d}q_2\, \lambda_{q_1 q_2} a^{q_1} a^{q_2} . \tag{57}$$

Einsetzen in (51) führt zu dem gekoppelten Gleichungssystem (wir ersetzen q durch p):

$$(p_{10} + p_{20} - \varepsilon)\, \lambda_{p_1 p_2} = a_{p_1} a_{p_2} [\gamma (p_{10} + p_{20}) + \Gamma], \tag{58 a}$$

$$\gamma = \int \mathrm{d}p_1\, \mathrm{d}p_2\, a^{p_1 p_2} \lambda_{p_1 p_2} . \tag{58 b}$$

Die willkürliche Konstante Γ tritt wegen der linearen Abhängigkeit der $\chi^{q_1 q_2}$ auf.

Wir wollen uns im folgenden auf $N\Theta\Theta$-„ein"-Zustände spezialisieren, d. h. Zustände mit zwei einlaufenden Θ-Teilchen der Impulse q_1 und q_2, die an einem N-Teilchen gestreut werden (auslaufende $N\Theta\Theta$-Streuwelle).

Ansatz:

$$\lambda_{p_1 p_2} = 2^{-1} (\delta_{p_1}^{q_1}\, \delta_{p_2}^{q_2} + \delta_{p_1}^{q_2}\, \delta_{p_2}^{q_1}) + \overline{\lambda}_{p_1 p_2}; \tag{59}$$

$$\varepsilon = q_{10} + q_{20} \,. \tag{60}$$

$\overline{\lambda}_{p_1 p_2}$ soll frei von doppelten Delta-Funktionen sein. Für γ ergibt sich dann [vgl. (57)]:

$$\gamma = a^{q_1} a^{q_2} + \overline{\gamma} \,, \tag{61}$$

mit

$$\overline{\gamma} := \int \mathrm{d}p_1\, \mathrm{d}p_2\, a^{p_1} a^{p_2}\, \overline{\lambda}_{p_1 p_2} . \tag{62}$$

Nun ist

$$\overline{\lambda}_{p_1 p_2} = a_{p_1} a_{p_2} [\gamma (p_{10} + p_{20}) + \Gamma]\, (p_{10} + p_{20} - \varepsilon - i\, o)^{-1}. \tag{63}$$

Einsetzen in (62):

$$\begin{aligned} \overline{\gamma} = \int \mathrm{d}p_1\, \mathrm{d}p_2\, | a_{p_1} a_{p_2} |^2 [&\gamma (p_{10} + p_{20}) \\ &+ \Gamma]\, (p_{10} + p_{20} - \varepsilon - i\, o)^{-1}. \end{aligned} \tag{64}$$

Über Γ können wir frei verfügen. Wir wählen

$$\Gamma := a^{q_1} a^{q_2} D^{-1} (\varepsilon + i\, o), \tag{65}$$

mit

$$D(x) := \int \mathrm{d}p_1\, \mathrm{d}p_2\, | a_{p_1} a_{p_2} |^2\, (x - p_{10} - p_{20})^{-1}. \tag{66}$$

Dann geht (64) über in

$$\begin{aligned} \overline{\gamma} = - \Gamma \cdot D(\varepsilon + i\, o) + \gamma \int \mathrm{d}p_1\, \mathrm{d}p_2\, &| a_{p_1} a_{p_2} |^2 \\ (p_{10} + p_{20})\, &(p_{10} + p_{20} - \varepsilon - i\, o)^{-1}. \end{aligned} \tag{67}$$

Nach (61) ist hinreichend für (67):

$$\gamma = 0 \,, \tag{68}$$

also

$$\bar{\gamma} = -a^{q_1} a^{q_2}. \tag{69}$$

In (63) eingesetzt:

$$\bar{\lambda}_{p_1 p_2} = a_{p_1} a_{p_2} a^{q_1} a^{q_2} D^{-1}(\varepsilon + i\,o)$$
$$(p_{10} + p_{20} - \varepsilon - i\,o)^{-1}. \tag{70}$$

In der Tat ist dann wegen (62) die Gl. (69) erfüllt. Damit ist λ völlig bestimmt. Es folgt:

$$\psi^{q_1 q_2} = \chi^{q_1 q_2} + a^{q_1} a^{q_2} D^{-1}(q_{10} + q_{20} + i\,o)$$
$$\int \mathrm{d}p_1\, \mathrm{d}p_2\, a_{p_1} a_{p_2} \chi^{p_1 p_2} (p_{10} + p_{20} - q_{10} - q_{20} - i\,o)^{-1}. \tag{71}$$

Wie in [12] gezeigt wird, ist $\psi^{q_1 q_2}$ tatsächlich eine Lösung der Schrödinger-Gleichung. Im Falle eines instabilen V-Teilchens stellen die $\psi^{q_1 q_2}$ ein vollständiges orthonormiertes System im $N\Theta\Theta$-Sektor dar.

[1] T. D. Lee, Phys. Rev. **95**, 1329 [1954].
[2] G. Källén u. W. Pauli, Kgl. Danske Vidensk. Selskab, Mat.-Fys. Medd. **30**, 7 [1955].
[3] R. D. Amado u. R. P. Kenschaft, J. Math. Phys. **5**, 1340 [1964].
[4] A. Pagnamenta, J. Math. Phys. **6**, 955 [1965]; **7**, 356 [1966].
[5] C. M. Sommerfield, J. Math. Phys. **6**, 1170 [1965].
[6] E. Kazes, J. Math. Phys. **6**, 1172 [1965].
[7] J. C. Houard, Ann. Inst. Henri Poincaré A II, 105 [1965].
[8] G. L. Tindle, Nuovo Cim. A **45**, 619 [1966].
[9] D. I. Fivel, J. Math. Phys. **11**, 699 [1970].
[10] M. Bolsterli, Phys. Rev. **166**, 1760 [1968].
[11] H. v. DeWitz u. K. Helmers, Z. Naturforsch. **26 a**, 4 [1971].
[12] H. v. DeWitz, Diplomarbeit.

The Energy-Density Functional of an Electron Gas in Locally Linear Approximation of the One-Body Potential *

R. Baltin

Institut A für Theoretische Physik der Technischen Universität Braunschweig, Germany

(Z. Naturforsch. 27 a, 1176—1186 [1972]; received 11 March 1972)

For a system of independent electrons moving in a common one-body potential $V(\boldsymbol{r})$ an integral representation of Dirac's density matrix is evaluated in the approximation that $V(\boldsymbol{r})$ at the point $\boldsymbol{r}$ is replaced by a linear potential with a gradient equal to the gradient of V at $\boldsymbol{r}$. The particle density ϱ, $\nabla\varrho$ and the kinetic-energy density ε_k are derived from the density matrix. After eliminating the potential and its gradient a parametric representation for ε_k in terms of ϱ and $y \equiv |\nabla\varrho|^{1/2} \varrho^{-2/3}$ is obtained. Explicit analytical expressions are given in the limits $y \to 0$ and $y \to \infty$ and compared with the inhomogeneity corrections of Kirzhnits and v. Weizsäcker.

1. Introduction

According to the original Thomas-Fermi theory the kinetic-energy density ε_k of electrons with particle density ϱ moving independently in a common effective one-body potential $V(\boldsymbol{r})$ is given by

$$\varepsilon_k = \varkappa\, \varrho^{5/3} \quad [\varkappa = 0.3\,(3\,\pi^2)^{2/3}\,\hbar^2/m]\,.$$

As is well-known, this relation is an insufficient approximation either when the potential varies rapidly in space or when the density is very low. For the general case of an inhomogeneous electron gas, Hohenberg and Kohn [1] have shown that the ground state kinetic energy is a unique functional of ϱ whether or not the electrons are interacting. However, it seems difficult to gain valid explicit approximations to this functional beyond the TF-term.

Reprints request to Dr. R. Baltin, Institut A für Theoretische Physik, Technische Universität, *D-3300 Braunschweig*, Germany.

* Extracted from the author's doctoral thesis (D 84).

In a rather intuitive approach, v. Weizsäcker [2] introduced an additive correction term $\sim (\nabla\varrho)^2/\varrho$ to $\varepsilon_k^{\mathrm{TF}}$ whereby qualitative improvements could be achieved. However, application to some specific potentials yields too high ground state energies [3–5].

A systematic investigation of Kirzhnits [6] starting from a reformulation of the Hartree-Fock equations in terms of Dirac's density matrix and expanding the latter in a power series of $\hbar$ came to the result that for weak inhomogeneity the Weizsäcker correction term should be multiplied by a factor of $\gamma = 1/9$. Other authors [7–9] using similar methods obtain the same factor. Golden [10] finds $\gamma = 13/45$. Using semiclassical arguments Gombás [11–13] claims that not the Weizsäcker term but the TF term should be corrected by a factor dependent upon the number of electrons.

Several authors [14–16] have pointed out that Kirzhnits' series expansion doesn't take into account the nonanalytical behaviour of Dirac's density matrix