

Eine gruppentheoretische Methode zur Berechnung von Skalarprodukten zwischen HFB-Zuständen

Heinz Günter Becker

Institut für Theoretische Kernphysik der Universität Bonn

(Z. Naturforsch. **28 a**, 1049—1055 [1973]; eingegangen am 17. März 1973)

A Group Theoretical Method for Calculating Overlaps of HFB States

Overlaps of Hartree-Fock-Bogoljubov states occurring in modified HFB theories (e. g. projected HFB) are calculated using group theoretical methods. For this purpose the Bogoliubov-Valatin transformation is generalized. The resulting nonunitary transformation leaves the Fermi commutation relations invariant, but the characteristic property of the creation and annihilation operators, namely that they are hermitean conjugate to each other, is lost. A suitable factorization of the new transformation is derived, which also applies to the unitary Bogoliubov-Valatin transformation but the structure of which is completely different from the well-known Bloch-Messiah decomposition. Furthermore, the relation between various representations of the HFB state vector is clarified.

1. Einleitung

Bei der Formulierung von Näherungsverfahren, die sich im Rahmen der Hartree-Fock-Bogoljubov (HFB)-Theorie^{1, 2} bewegen oder auf der HFB-Theorie aufbauen, entsteht das Problem, Überlappintegrale zwischen verschiedenen HFB-Zuständen explizit zu berechnen. Der HFB-Theorie haftet der Mangel an, daß die HFB-Zustandsfunktionen Invarianzprinzipien verletzen. Sie sind i. allg. keine Eigenfunktionen der den Symmetrien des Hamilton-Operators entsprechenden Konstanten der Bewegung, auch dann nicht, wenn das HFB-Variationsprinzip unter der Nebenbedingung durchgeführt wird, daß die Mittel- bzw. Erwartungswerte der betreffenden Operatoren (Teilchenzahl, Impuls, Drehimpuls, Isospin) fest vorgegebene Werte annehmen. Um aber die theoretischen Ergebnisse in möglichst vielen Details mit den Experimenten vergleichen zu können, muß man die Symmetrieverletzungen wieder teilweise oder ganz aufheben. Hierbei sind verschiedene Gesichtspunkte möglich. Dementsprechend sind auch verschiedene Verfahren entwickelt worden. Für eine systematische Diskussion der Methoden zur Behebung der Symmetrieverletzungen und der entsprechenden Erweiterungen des HFB-Variationsverfahrens sei auf Ref.² verwiesen. Die meisten Verfahren machen in irgendeiner Form von der Projektionsmethode Gebrauch, die darin besteht, die Zustandsfunktionen auf Eigenfunktionen mit „guten“ Quantenzahlen zu projizieren. Die projizierten Zustände

erweisen sich dabei als Superpositionen von HFB-Zuständen, die durch gewisse Transformationen aus dem ursprünglich vorgegebenen Zustand hervorgehen. Zum Beispiel werden bei der Projektion der HFB-Wellenfunktion $|\Phi\rangle$ auf eine feste Teilchenzahl (die Verletzung der Teilchenzahlinvarianz ist gerade für HFB charakteristisch) HFB-Zustände $|\Phi'\rangle = |\Phi(\lambda)\rangle$ überlagert, die durch die Eichtransformation $c_i^+ \rightarrow c_i^+ e^{-i\lambda}$ der Partikelerzeugungsoperatoren aus $|\Phi\rangle$ hervorgehen^{2, 3}. In der HFB-Theorie der deformierten Kerne^{4, 5} geschieht die Projektion der „deformierten“ Lösung $|\Phi\rangle$ auf einen bestimmten J -Wert dadurch, daß HFB-Zustände $|\Phi'\rangle = |\Phi(a, \beta, \gamma)\rangle$ superponiert werden, die durch „Drehung“ von $|\Phi\rangle$ erzeugt werden. Es ist somit klar, daß im Rahmen einer entsprechend modifizierten HFB-Theorie Matrixelemente (sogen. Überlappintegrale bzw. Überlappfunktionen) der Form $\langle \Phi' | \Phi \rangle$ und $\langle \Phi' | H | \Phi \rangle$ berechnet werden müssen.

Ein Näherungsverfahren zur Berücksichtigung von Quasipartikkelkorrelationen, welches sich auf die HFB-Theorie gründet (HFB entspricht dem Bild freier unabhängiger Quasipartikel), ist die sogen. Quasipartikel-Random-Phase-Approximation (QRPA). Diese läßt sich im Rahmen eines allgemeineren Variationsprinzips unter Verwendung der Methode der „generator coordinates“ ableiten^{6, 7}. Hierbei bedeutet die Versuchswellenfunktion ebenfalls eine Linearkombination von HFB-Zuständen, die im Gegensatz zum Vorigen keine Projektion darstellt, sondern bei der die Gewichtsfunktion (Generatorfunktion) erst aus dem Variationsprinzip bestimmt wird. Hierbei treten ähnliche Überlappintegrale wie die oben erwähnten auf.

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



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.

Die Hauptschwierigkeit besteht darin, daß Überlappintegral $\langle \Phi' | \Phi \rangle$ in geschlossener Form zu berechnen. Die Berechnung von $\langle \Phi' | H | \Phi \rangle$ ist dabei sekundär, da diese in einfacher und übersichtlicher Weise auf diejenige von $\langle \Phi' | \Phi \rangle$ zurückgeführt werden kann^{5, 7}. Im Gegensatz zum analogen Problem bei HF (hier lassen sich die Überlappfunktionen auf Grund von Sätzen der Determinantentheorie berechnen⁸), gibt es im Rahmen von HFB keine übersichtliche Verfahren. Man ist auf relativ umständliche Prozeduren angewiesen^{5, 9}. Eine allgemeine und elegante Methode hierfür zu entwickeln, die auf gruppentheoretischen Grundlagen beruht, ist das Ziel der vorliegenden Arbeit.

Die HFB-Zustände zeichnen sich dadurch aus, daß sie sich als Vakuumzustände von Quasiteilchen interpretieren lassen. Die zugehörigen Quasipartikeloperatoren a_i^+ und a_i sind Linearkombinationen der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren c_j^+ und c_j von realen Teilchen [sogen. Bogoljubov-Valatin-Transformation (BVT)]. Die Invarianz der Fermi-Vertauschungsrelationen und die, wie wir im folgenden noch sehen werden, nichttriviale Forderung, daß sich die Quasipartikeloperatoren wie die Teilchenoperatoren in Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, d. h. paarweise zueinander konjugierte Operatoren einteilen lassen, haben die Unitarität der BVT zur Folge. Der BVT kann man einen unitären Operator $U_B = (U_B^+)^{-1}$ im Fock-Raum zuordnen, mit dem sie sich als Abbildung $a_i = U_B c_i U_B^+$ bzw. $a_i^+ = U_B c_i^+ U_B^+$ im Fock-Raum schreiben läßt. Hieraus folgt unmittelbar, daß der HFB-Zustand in der Form $| \text{HFB} \rangle = U_B | 0 \rangle$ dargestellt werden kann, d. h. durch die unitäre Transformation mit U_B aus dem Teilchenvakuum $| 0 \rangle$ ($c_i | 0 \rangle \equiv 0$) hervorgeht. Die Gesamtheit der BVT bzw. ihrer Darstellungen U_B bildet eine Gruppe. Das Produkt von zwei unitären Operatoren U_B angewandt auf $| 0 \rangle$ ergibt wieder einen Zustand vom HFB-Typ. Die Gruppe der BVT ist eine Untergruppe der unitären Gruppe $\mathbf{U}(2n)$ und erweist sich als unitäräquivalent zur reellen orthogonalen Gruppe $\mathbf{O}(2n, R)$ ^{10, 11}. Einzelheiten können der Ref.¹¹ entnommen werden, wo u. a. ein gruppentheoretischer Beweis der Bloch-Messiah-Zerlegung¹⁰ zu finden ist. Die Zahl n bedeutet die Anzahl der Erzeugungsoperatoren c_j^+ , welche die Zustände der zugrunde gelegten Einteilchenbasis repräsentieren. Die Beschränkung auf eine endliche Anzahl geschieht einerseits in Übereinstimmung mit

den numerischen Anwendungen, andererseits zur Vermeidung mathematischer Schwierigkeiten.

Da U_B ein unitärer Operator ist, hat dies automatisch zur Folge, daß $| \text{HFB} \rangle = U_B | 0 \rangle$ auf 1 normiert ist. Bei der Formulierung von Näherungsverfahren verwendet man jedoch meistens nichtnormierte HFB-Wellenfunktionen, die sich sämtlich auf die kompakte Form

$$| \text{HFB} \rangle = \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{ij} \xi_{ij} c_i^+ c_j^+ \right\} | 0 \rangle \equiv \exp \{ T_{\text{op}} \} | 0 \rangle \quad (1.1)$$

bringen lassen. Daß diese die allgemeinste Form (bei Beschränkung auf gerade Teilchenzahl) darstellt, wird im Verlauf unserer Untersuchungen klar werden. Die zu berechnenden Überlappintegrale $\langle \Phi' | \Phi \rangle$ nehmen dann die Form

$$\begin{aligned} \langle \Phi' | \Phi \rangle &= \langle 0 | \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{ij} \eta_{ij} c_i c_j \right\} \\ &\quad \times \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{ij} \xi_{ij} c_i^+ c_j^+ \right\} | 0 \rangle \\ &\equiv \langle 0 | \exp \{ S_{\text{op}} \} \exp \{ T_{\text{op}} \} | 0 \rangle \end{aligned} \quad (1.2)$$

an. Der Zustand (1.1) geht durch eine nichtunitäre Transformation aus $| 0 \rangle$ hervor. Es stellt sich die naheliegende Frage, ob sich die BV-Gruppe so erweitern läßt, daß auch die Operatoren $e^{T_{\text{op}}}$ und somit die nichtnormierten HFB-Zustände miteinfaßt werden können. Dies läßt sich in der Tat erreichen, wenn man die Forderung, nach der die transformierten Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren wieder zueinander hermitesch konjugiert sein müssen, aufgibt und nur noch die Invarianz der Fermi-Vertauschungsrelationen verlangt. Die genauere Diskussion (2. Abschnitt) zeigt, daß die so charakterisierte Gruppe \mathbf{G} linearer Transformationen unitäräquivalent zur komplexen orthogonalen Gruppe $\mathbf{O}(2n, C)$ ist. Die Darstellung von \mathbf{G} im Fock-Raum (3. Abschnitt) durch nichtunitäre Operatoren enthält u. a. gerade die Operatoren $e^{S_{\text{op}}}$ und $e^{T_{\text{op}}}$. Durch diesen Trick können wir zur Berechnung von (1.2) Gruppeneigenschaften ausnützen (4. Abschnitt). Hierbei spielt eine geeignete Zerlegung der allgemeinen Transformation aus \mathbf{G} in drei Faktoren eine besondere Rolle, von denen jeder eine spezielle nichtunitäre Transformation aus \mathbf{G} bedeutet. Die Zerlegung gilt auch für die Untergruppe der unitären BV-Transformationen. Sie hat gegenüber der BM-Faktorisierung^{10, 11}, bei der jeder einzelne Faktor unitär ist, eine völlig andere Struktur. Auf Grund dieser Zerlegung ist man aber in der Lage, über die Erweiterung der BV-Gruppe auch Überlappintegrale zwischen normierten HFB-

Zuständen, die durch unitäre Transformationen aus $|0\rangle$ hervorgehen, explizit zu berechnen.

2. Verallgemeinerung der Bogoljubov-Valatin-Transformation

Die Gesamtheit der $2n$ Operatoren

$$\{c_1^+ \dots c_n^+, c_1 \dots c_n\} \quad (2.1)$$

bildet einen komplexen linearen Raum \mathbf{L} der Dimension $2n$. Die verallgemeinerte BVT (VBVT) fassen wir als lineare Abbildung in \mathbf{L} auf, die sich, wenn wir die Operatoren in Spaltenvektoren zusammenfassen, in der Form

$$\begin{pmatrix} a \\ \bar{a} \end{pmatrix} = \mathcal{A}^{-1} \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix}; \quad \mathcal{A} = \begin{pmatrix} A_1 & A_2 \\ A_3 & A_4 \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

schreiben läßt. Daß wir die $2n \times 2n$ -Transformationsmatrix mit \mathcal{A}^{-1} ansetzen, erweist sich für das folgende als bequem. Da wir sofort nachweisen, daß die Gesamtheit der VBVT eine Gruppe bildet, ist dies ohne weiteres möglich. Von den Transformationen (2.2) verlangen wir, daß sie die Fermi-Vertauschungsrelationen invariant lassen. Letztere interpretieren wir als einen symmetrischen Tensor 2. Stufe in \mathbf{L} , den wir in der a -Basis symbolisch darstellen können durch

$$\begin{pmatrix} \{a_i, a_j\}, \{a_i, \bar{a}_j\} \\ \{\bar{a}_i, a_j\}, \{\bar{a}_i, \bar{a}_j\} \end{pmatrix} \simeq \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = f; \quad f = \tilde{f} = f^{-1}. \quad (2.3)$$

Auf die c -Basis bezogen hat dieser Tensor, dessen Komponenten in der Matrix f zusammengefaßt sind, die gleiche Form, d. h. er ist ein numerisch invarianter Tensor. [Konsequenterweise sollte man c^+ durch \bar{c} ersetzen, da es nur auf die Fermi-Vertauschungsrelationen bei der erweiterten BV-Gruppe ankommt. Wir halten aber aus Zweckmäßigkeitsgründen für die c -Operatoren die Bezeichnung (2.1) bei.] Für \mathcal{A} (genauer \mathcal{A}^{-1}) erhalten wir als notwendige und hinreichende Bedingung

$$\tilde{\mathcal{A}} f \mathcal{A} = f. \quad (2.4)$$

Aus dieser Gleichung folgt $\det \mathcal{A} \neq 0$, also die Existenz der inversen Matrix. Somit definiert die Gesamtheit der Matrizen \mathcal{A} mit (2.4) eine Gruppe \mathbf{G} , die wir als verallgemeinerte BV-Gruppe bezeichnen. Zur Identifikation von \mathbf{G} führen wir analog zur BV-Gruppe^{10, 11} mit Hilfe der unitären Matrix

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{pmatrix}; \quad S^+ = S^{-1}; \quad \tilde{S} S = f \quad (2.5)$$

einen Basiswechsel in \mathbf{L} durch. Dabei geht der Tensor f in die Einheitsmatrix

$$f' = S f \tilde{S} \equiv 1 \quad (2.6)$$

über, während sich für die auf die neue Basis bezogene VBVT $\mathcal{A}' = S \mathcal{A} S^+$ die Beziehung

$$\tilde{\mathcal{A}}' \mathcal{A}' = 1 \quad (2.7)$$

ergibt. Die Gruppe der VBVT ist also unitäräquivalent bzw. isomorph zur komplexen orthogonalen Gruppe $\mathbf{O}(2n, C)$.

Zur Untergruppe \mathbf{G}_B der unitären BVT gelangen wir, wenn wir $\bar{a}_i = a_i^+$ (bzw. $\bar{c}_i = c_i^+$) fordern. Gleichung (2.2) schreibt sich in diesem Fall

$$\begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} = B \begin{pmatrix} a \\ a^+ \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

(den Buchstaben B reservieren wir für Elemente aus \mathbf{G}_B) bzw. in der alternativen Form

$$\begin{pmatrix} c^+ \\ c \end{pmatrix} = B^* \begin{pmatrix} a \\ a^+ \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Die Multiplikation dieser Gleichung mit f führt, da f die Vertauschung der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren in einem Spaltenvektor bewirkt, auf

$$\begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} = f B^* \begin{pmatrix} a^+ \\ a \end{pmatrix} = f B^* f \begin{pmatrix} a^+ \\ a \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

Der Vergleich mit (2.8) ergibt für die BVT die zusätzliche Bedingung¹

$$f B f = B^*. \quad (2.11)$$

Zusammen mit (2.4) folgt daraus die Unitarität der Matrix B . Wegen Gl. (2.6) ist die Beziehung (2.11) äquivalent mit der Bedingung, daß die unitärtransformierte BVT $B' = S B S^+$ reell ist. Damit ist gezeigt, daß die Untergruppe \mathbf{G}_B isomorph zur reellen orthogonalen Gruppe $\mathbf{O}(2n, R)$ ist bzw. eine $2n$ -dimensionale unitäre Darstellung derselben bedeutet^{10, 11}.

Für $\mathcal{A} \in \mathbf{G}$ machen wir den Exponentialansatz

$$\mathcal{A} = \exp\{\tilde{\mathcal{X}}\}. \quad (2.12)$$

Für die Matrix $\tilde{\mathcal{X}}$ folgt aus Gl. (2.4) die Bedingung

$$f \tilde{\mathcal{X}} f = -\tilde{\mathcal{X}}, \quad (2.13)$$

wodurch die Struktur von $\tilde{\mathcal{X}}$ festgelegt ist:

$$\tilde{\mathcal{X}} = \begin{pmatrix} X_1 & X_2 \\ X_3 & -\tilde{X}_1 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \tilde{X}_2 = -X_2 \\ \text{und} \quad \tilde{X}_3 = -X_3. \quad (2.14)$$

Aus Gl. (2.13) bzw. der expliziten Form (2.14) kann man unmittelbar entnehmen, daß

$$\text{Spur } \tilde{\mathcal{X}} = 0 \quad (2.15)$$

ist, was $\det \mathcal{A} = 1$ zur Folge hat. Durch den Ansatz (2.12) haben wir uns also bei den Transformationen aus \mathbf{G} auf die Zusammenhangskomponente \mathbf{G}^+ der Gruppeneins beschränkt. Bei den folgenden Betrachtungen beziehen wir uns nur auf solche Transformationen aus \mathbf{G}^+ , die sich in der Form (2.12) darstellen lassen. Da \mathbf{G} eine nichtkompakte Lie-Gruppe ist, kann nicht jedes Element aus \mathbf{G}^+ in der Form (2.12) geschrieben werden, im Gegensatz zur kompakten Untergruppe \mathbf{G}_B^+ ! Diese Voraussetzung wird auch bei den Anwendungen in der HFB-Theorie gemacht und muß im einzelnen Fall nachgeprüft werden. Wenn $\mathcal{A} \in \mathbf{G}_B^+$ ist, gilt für die Matrix \mathfrak{X} in Gl. (2.12) zusätzlich

$$f \mathfrak{X} f = \mathfrak{X}^*. \quad (2.16)$$

\mathfrak{X} ist in diesem Falle antihermitesch. Für die Untermatrizen von \mathfrak{X} in Gl. (2.14) entstehen dadurch die weiteren Bedingungen

$$X_1^+ = -X_1 \quad \text{und} \quad X_3 = X_2^*. \quad (2.17)$$

Die Gesamtheit der Matrizen \mathfrak{X} mit der Eigenschaft (2.13) bildet die Lie-Algebra von \mathbf{G}^+ .

3. Darstellung der verallgemeinerten BV-Gruppe

Ziel dieses Abschnittes ist es, eine Darstellung von \mathbf{G}^+ im Fock-Raum zu konstruieren und einen allgemeinen Ausdruck für einen nichtnormierten HFB-Zustand herzuleiten. Durch die unitäre Matrix S in Gl. (2.5) werden die $2n$ Operatoren

$$\begin{aligned} \gamma_k &= \frac{1}{\sqrt{2}} (c_k + c_k^+), \\ \bar{\gamma}_k &= \frac{i}{\sqrt{2}} (c_k^+ - c_k) \equiv \gamma_{k+n} \end{aligned} \quad (3.1)$$

als Basis in \mathbf{L} eingeführt, in der sich die Gruppe \mathbf{G}^+ mit der bekannten Gruppe $\mathbf{SO}(2n, C)$ identifizieren läßt. Es ist deshalb naheliegend, zur Konstruktion der Darstellung ebenfalls von den γ -Operatoren auszugehen. Ihre Vertauschungsrelationen lauten

$$\{\gamma_i, \gamma_k\} = \delta_{ik}; \quad i, k = 1, \dots, 2n. \quad (3.2)$$

Auf Grund dieser Beziehungen liefern die γ -Operatoren unmittelbar eine Darstellung der Cliffordschen Zahlen und damit der von diesen erzeugten Cliffordschen Algebra. Letztere spielen aber gerade eine Rolle bei der Konstruktion der Spin-Darstellungen der Drehgruppe. Auf Einzelheiten^{12, 13} hierzu gehen wir nicht näher ein, sondern bringen nur soviel, als

zum Verständnis des folgenden notwendig ist. Die Lie-Algebra von $\mathbf{SO}(2n, R)$ wird gebildet von der Gesamtheit der reellen schiefsymmetrischen $2n \times 2n$ -Matrizen. Führen wir als Basis die $n(2n-1)$ linear unabhängigen Matrizen

$$\mathcal{L}_{ij} = \mathcal{E}_{ij} - \mathcal{E}_{ji} = -\mathcal{L}_{ji} \quad (3.3)$$

ein, wobei \mathcal{E}_{ij} die Matrix mit den Elementen $(\mathcal{E}_{ij})_{\alpha\beta} = \delta_{i\alpha} \delta_{j\beta}$ bezeichnet, so genügen dieselben den charakteristischen Relationen

$$[\mathcal{L}_{ij}, \mathcal{L}_{kl}] = \delta_{il} \mathcal{L}_{jk} - \delta_{jl} \mathcal{L}_{ik} - \delta_{ik} \mathcal{L}_{jl} + \delta_{jk} \mathcal{L}_{il}. \quad (3.4)$$

Es läßt sich nun auf Grund der Antikommutatoren (3.2) sofort verifizieren, daß die in den γ -Operatoren bilinearen Produkte $L_{ij} \equiv \gamma_i \gamma_j = -L_{ji}$ mit $i \neq j$ ebenfalls diesen Relationen genügen. Das heißt aber, daß durch die Operatoren L_{ij} eine Darstellung der Lie-Algebra von $\mathbf{SO}(2n, R)$, die zur Spin-Darstellung isomorph ist, im Fock-Raum realisiert wird. Ein beliebiges Element $\mathcal{R} = \frac{1}{2} \sum_{ij} \mathcal{R}_{ij} \mathcal{L}_{ij}$ der Lie-Algebra von $\mathbf{SO}(2n, R)$ hat somit im Fock-Raum die Darstellung $R_{op} = \frac{1}{2} \sum_{ij} \mathcal{R}_{ij} L_{ij}$, wofür wir in Matrixform auch schreiben können

$$R_{op} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \gamma & \bar{\gamma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_1 & R_2 \\ -\tilde{R}_2 & R_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma \\ \bar{\gamma} \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

Wegen der Antisymmetrie der Matrix \mathcal{R} sind die $n \times n$ -Untermatrizen R_1 und R_4 antisymmetrisch. Wir erhalten eine Darstellung der Lie-Algebra von $\mathbf{SO}(2n, C)$, wenn wir für die Matricelemente \mathcal{R}_{ij} komplexe Werte zulassen. Führen wir wieder unter Verwendung von Gl. (3.1) die c -Operatoren ein, so gelangen wir zur Darstellung der Lie-Algebra von \mathbf{G}^+ . Der Übergang zur Darstellung der Gruppe \mathbf{G}^+ erfolgt dann durch die Exponentialabbildung. Damit ist jedem Element $\mathcal{A} = \exp\{\mathfrak{X}\}$ aus \mathbf{G}^+ ein entsprechender Operator

$$\begin{aligned} e^{\mathfrak{X}_{op}} &\stackrel{\text{def.}}{=} \exp \left\{ \frac{1}{2} \begin{pmatrix} c^+ & c \end{pmatrix} \mathfrak{X} \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} \right\} \\ &= \exp \left\{ \frac{1}{2} \begin{pmatrix} c^+ & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 & X_2 \\ X_3 & -\tilde{X}_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} \right\} \end{aligned} \quad (3.6)$$

im Fock-Raum zugeordnet. Beschränkt man sich auf Transformationen aus \mathbf{G}_B^+ , so erweist sich der Operator $e^{\mathfrak{X}_{op}}$ wegen der Antihermitizität der Matrix \mathfrak{X} als unitär. Im allgemeinen Fall ist $e^{\mathfrak{X}_{op}}$ jedoch nicht-unitär.

Wir zeigen nun, daß die Transformation der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren c und c^+ mit $e^{\mathfrak{X}_{op}}$ (als Abbildung im Fock-Raum) mit der VBVT

in Gl. (2.2) identisch ist:

$$e^{X_{op}} \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} e^{-X_{op}} = \begin{pmatrix} a \\ \bar{a} \end{pmatrix} = \exp\{-\mathfrak{X}\} \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} = \mathcal{A}^{-1} \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Zum Beweis dieser wichtigen Beziehung differenzieren wir den Spaltenvektor

$$\mathcal{F}(t) = e^{tX_{op}} \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} e^{-tX_{op}}; \quad \mathcal{F}(t=0) = \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

nach dem reellen Parameter t :

$$\dot{\mathcal{F}}(t) = e^{tX_{op}} \left[X_{op}, \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} \right] e^{-tX_{op}}. \quad (3.9)$$

Der Kommutator läßt sich in geschlossener Form angeben

$$\left[X_{op}, \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} \right] = - \begin{pmatrix} X_1 & X_2 \\ X_3 & -\bar{X}_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} = -\mathfrak{X} \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

und für $\mathcal{F}(t)$ folgt damit die Differentialgleichung (hierbei ist natürlich auf die Reihenfolge von Matrix und Spaltenvektor zu achten)

$$\dot{\mathcal{F}}(t) = -\mathfrak{X} \mathcal{F}(t). \quad (3.11)$$

Die Lösung unter Berücksichtigung der Anfangsbedingung (3.8) für $t=0$ lautet

$$\mathcal{F}(t) = \exp\{-t\mathfrak{X}\} \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

Setzen wir $t=1$, so ergibt sich aus dem Vergleich mit Gl. (3.8) die Beziehung (3.7). Gruppentheoretisch gesehen ist der Beweis mittels der „Differentialgleichungsmethode“ äquivalent mit dem Beweis von Gl. (3.7) für infinitesimale Transformationen mit anschließendem Übergang (Integration) zu endlichen Transformationen. Die Gesamtheit der Operatoren $e^{tX_{op}}$ mit variablem Parameter t bildet eine Abelsche Gruppe.

Durch Spezialisierung des Operators $e^{X_{op}}$ in Gl. (3.6) erhält man die in der Einleitung erwähnten Operatoren $e^{S_{op}}$ und $e^{T_{op}}$ und auf Grund von Gl. (3.7) die ihnen entsprechenden Transformationen der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren.

Nachdem wir eine Darstellung der Gruppe \mathbf{G}^+ im Fock-Raum konstruiert haben, ist es nicht schwer, einen expliziten Ausdruck für einen allgemeinen HFB-Zustand anzugeben. Durch eine VBVT wird (über ihre Darstellung im Fock-Raum) eine Abbildung der Zustände des Fock-Raumes induziert. Man kann nun unmittelbar verifizieren, daß der HFB-Zustand gemäß

$$|\text{HFB}\rangle = e^{X_{op}} |0\rangle \quad (3.13)$$

aus dem Vakuumzustand $|0\rangle$ der „realen“ Teilchen hervorgeht. Aus $c_i |0\rangle \equiv 0$ folgt nämlich unter Berücksichtigung von Gl. (3.7)

$$a_i |\text{HFB}\rangle = e^{X_{op}} c_i e^{-X_{op}} e^{X_{op}} |0\rangle \equiv 0. \quad (3.14)$$

Im allgemeinen ist $|\text{HFB}\rangle$ in Gl. (3.13) kein normierter Zustand. Nur in dem Fall, daß $e^{X_{op}}$ ein unitärer Operator ist (und dementsprechend einer BVT aus \mathbf{G}_B^+ korrespondiert), stellt (3.13) einen auf 1 normierten Zustandsvektor dar. In diesem Falle läßt sich die Bloch-Messiah-Zerlegung der unitären BVT auf $e^{X_{op}}$ übertragen (was auf Grund der Darstellungseigenschaft möglich ist), womit man den Anschluß an die in der Literatur z. B. Ref. ^{2, 5, 14} üblichen Formen für $|\text{HFB}\rangle$ erhält. Für weitere Einzelheiten hierzu und einen Beweis des BM-Theorems auf gruppentheoretischer Basis sei auf Ref. ¹¹ verwiesen.

Im nächsten Abschnitt wird u. a. gezeigt, daß der HFB-Zustand (3.13) auf die Form (1.1) gebracht werden kann, d. h. daß letztere immer noch die allgemeinste Form für einen nichtnormierten HFB-Zustandsvektor bedeutet.

4. Faktorisierung der verallgemeinerten Bogoljubov-Valatin-Transformation und explizite Berechnung von Überlappfunktionen

Zur Berechnung des Überlappintegrals (1.2) leiten wir zunächst einen expliziten Ausdruck für den Wert von

$$\langle 0 | e^{X_{op}} | 0 \rangle \quad (4.1)$$

ab. Dieses Matrixelement bedeutet in gewissem Sinne, wie wir noch sehen werden, ein Standardüberlappintegral, auf das alle in den Anwendungen vorkommenden Überlappfunktionen zurückgeführt werden können. Es ist nun naheliegend, zur Berechnung von (4.1) die Gruppeneigenschaft der Operatoren $e^{X_{op}}$ auszunützen und eine geeignete Faktorisierung des Operators $e^{X_{op}}$ zu suchen, d. h. den Operator $e^{X_{op}}$ in der allgemeinen Form (3.6) als ein Produkt von speziellen Transformationen darzustellen. Folgender Ansatz führt zum Ziel:

$$e^{X_{op}} = \exp \left\{ \frac{1}{2} \begin{pmatrix} c^+, c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & V_2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} \right\} \\ \cdot \exp \left\{ \frac{1}{2} \begin{pmatrix} c^+, c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 & 0 \\ 0 & -\bar{V}_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} \right\} \quad (4.2) \\ \cdot \exp \left\{ \frac{1}{2} \begin{pmatrix} c^+, c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ V_3 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} \right\}.$$

Der Sinn dieser Zerlegung ist unmittelbar einzusehen. Die einzelnen Faktoren sind so geordnet, daß der 1. Faktor nur Erzeugungsoperatoren enthält, während im 3. Faktor nur Vernichtungsoperatoren vorkommen. Bei der Bildung des Erwartungswertes liefert deswegen nur der 2. Faktor einen Beitrag:

$$\begin{aligned}\langle 0 | e^{X_{op}} | 0 \rangle &= \langle 0 | \exp \left\{ \frac{1}{2} (c^\dagger, c) \begin{pmatrix} V_1 & 0 \\ 0 & V_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix} \right\} | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | \exp \left\{ \sum_{ij} (V_1)_{ij} c_i^\dagger c_j \right\} \\ &\quad \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{2} \text{Spur } V_1 \right\} = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \text{Spur } V_1 \right\}.\end{aligned}\quad (4.3)$$

Um die Untermatrizen V_i ($i=1, 2, 3$) als Funktionen der Untermatrizen von $\mathcal{A} = \exp\{\mathcal{X}\}$ auszudrücken, verwenden wir die zur Gl. (4.2) analoge Zerlegung

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix} A_1 & A_2 \\ A_3 & A_4 \end{pmatrix} &= \exp \begin{pmatrix} 0 & V_2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \exp \begin{pmatrix} V_1 & 0 \\ 0 & -\tilde{V}_1 \end{pmatrix} \exp \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ V_3 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} e^{V_1+V_2} e^{-\tilde{V}_1} V_3 & V_2 e^{-\tilde{V}_1} \\ e^{-\tilde{V}_1} V_3 & e^{-\tilde{V}_1} \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (4.4)$$

der VBVT-Matrix \mathcal{A} und erhalten für die Matrizen V_i :

$$\begin{aligned}V_1 &= -\ln \tilde{A}_4, & A_4 &= e^{-\tilde{V}_1}, \\ V_2 &= A_2 A_4^{-1}, \\ V_3 &= A_4^{-1} A_3.\end{aligned}\quad (4.5)$$

Es zeigt sich also, daß man als Voraussetzung für die Gültigkeit der Zerlegung (4.2) bzw. (4.4) die Bedingung $\det A_4 \neq 0$ fordern muß. Für den Wert des Überlappintegrals (4.1) ergibt sich somit endgültig der explizite Ausdruck

$$\begin{aligned}\langle 0 | e^{X_{op}} | 0 \rangle &= \exp \left\{ \frac{1}{2} \text{Spur } \ln \tilde{A}_4 \right\} \\ &= \exp \left\{ \frac{1}{2} \text{Spur } \ln A_4 \right\}.\end{aligned}\quad (4.6)$$

Der Logarithmus der Matrix A_4 (durch die unendliche Reihe definiert) kann vermieden werden, wenn man die Beziehung $\det A_4 = \exp\{-\text{Spur } V_1\}$ benutzt. Für (4.6) folgt dann die äquivalente Form

$$\langle 0 | e^{X_{op}} | 0 \rangle = \sqrt{\det A_4}.\quad (4.7)$$

Mit der Zerlegung (4.2) beweist man unmittelbar die am Ende des 3. Abschnittes aufgestellte Behauptung, die besagt, daß jeder HFB-Zustand in der Form (1.1) geschrieben werden kann und letztere also keine Einschränkung bedeutet. Die Entwicklung der Exponentialfunktion in dem Ausdruck (1.1) für |HFB> zeigt, daß der HFB-Zustand eine Linearkombination von Zuständen mit gerader Teilchenzahl darstellt, also nur zur Beschreibung von Viel-

körpersystemen mit gerader Teilchenzahl verwendet werden kann. Dies erweist sich, wie man leicht aus der bisherigen Entwicklung erkennt, als eine direkte Folge der Beschränkung auf VBVT bzw. BVT mit Determinante +1. Zur Beschreibung von Systemen mit ungerader Teilchenzahl („blocking“-Effekt) muß man Transformationen mit Determinante -1 zugrunde legen.

Wir kommen zur Berechnung des Überlappintegrals (1.2), das in dieser Form in den Anwendungen am häufigsten auftritt. Hierbei verwenden wir wieder die Gruppen- bzw. Darstellungseigenschaften der Transformationen. Danach existiert für das Produkt der in Gl. (1.2) vorkommenden Operatoren $e^{S_{op}}$ und $e^{T_{op}}$ ein Operator $e^{X_{op}'}$ derart, daß

$$e^{S_{op}} e^{T_{op}} = e^{X_{op}'}\quad (4.8)$$

ist. Diesem entspricht die VBVT-Matrix

$$\mathcal{A}' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \eta & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \xi \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \xi \\ \eta & 1+\eta\xi \end{pmatrix}.\quad (4.9)$$

Nun können wir die Formeln (4.6) bzw. (4.7) benutzen, indem wir an Stelle von $e^{X_{op}}$ den Operator $e^{X_{op}'}$ aus Gl. (4.8) einsetzen. Die dazugehörige Untermatrix A_4' entnehmen wir der Gleichung (4.9). Damit erhält man für das Überlappintegral (1.2) in Übereinstimmung mit Ref. 5,9 den geschlossenen Ausdruck

$$\begin{aligned}\langle 0 | \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{ij} \eta_{ij} c_i c_j \right\} \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{ij} \xi_{ij} c_i^\dagger c_j^\dagger \right\} | 0 \rangle \\ = \exp \left\{ \frac{1}{2} \text{Spur } \ln (1 + \eta \xi) \right\} \\ = \sqrt{\det (1 + \eta \xi)}.\end{aligned}\quad (4.10)$$

Der Normierungsfaktor des HFB-Zustandes in der allgemeinen Form (3.13) läßt sich nach demselben Prinzip berechnen.

Die Faktorisierung (4.2) bzw. (4.4) gilt natürlich auch für Transformationen aus der Untergruppe \mathbf{G}_B der unitären BVT. Dementsprechend bleibt das Ergebnis in Gl. (4.6) bzw. (4.7) auch dann gültig, wenn X_{op} ein antihermitescher Operator ist. Im Gegensatz zur Bloch-Messiah-Zerlegung^{10,11} der BVT, bei der jeder einzelne Faktor ein Element aus \mathbf{G}_B ist, d. h. eine unitäre Transformation darstellt, sind bei der Faktorisierung (4.2) die einzelnen Faktoren nichtunitär. Das gesamte Produkt hingegen besitzt wieder die Unitaritätseigenschaft. Somit können wir ohne weiteres Überlappintegrale auch zwischen normierten HFB-Zuständen (hier ist die „unitäre“ Form

gemeint) berechnen. Dies ist allerdings, wie wir sehen, nur über den Umweg der verallgemeinerten BVT möglich.

Für wertvolle Hinweise und Diskussionen danke ich den Herren Prof. Dr. K. Bleuler, Prof. Dr. D. Schütte und Dr. R. Petry.

- ¹ M. Baranger, *Cargèse Lectures in Theoretical Physics* 1962, Herg. M. Levy, W. A. Benjamin Inc., New York 1963.
- ² G. Baumgärtner u. P. Schuck, *Kernmodelle*, Bibliographisches Institut, Mannheim 1968.
- ³ K. Dietrich, H. J. Mang, and J. Pradal, *Phys. Rev.* **B 135**, 22 [1964].
- ⁴ R. Beck, H. J. Mang, and P. Ring, *Z. Physik* **231**, 1 [1970].
- ⁵ K. Goeke, Preprint KFA Jülich 817-KP, Dez. 1971.
- ⁶ H. J. Mang and H. A. Weidenmüller, *Ann. Rev. Nucl. Sci.* **18**, 1 [1968].
- ⁷ H. G. Becker, Dissertation, Universität Bonn 1969, Inst. f. Theor. Kernphysik.

- ⁸ D. M. Brink, *Proceedings of the International School Enrico Fermi, Course XXXVI*, Academic Press, New York and London 1967.
- ⁹ M. Baranger, *Phys. Rev.* **130**, 1244 [1963].
- ¹⁰ C. Bloch and A. Messiah, *Nucl. Phys.* **39**, 95 [1962].
- ¹¹ H. G. Becker, *Z. Naturforsch.* **28 a**, 332 [1973].
- ¹² H. J. Lipkin, *Anwendung von Lieschen Gruppen in der Physik*, Bibliographisches Institut, Mannheim 1967.
- ¹³ H. Boerner, *Darstellungen von Gruppen*, Springer-Verlag, Berlin 1967, 2. Auflage.
- ¹⁴ K. Dietrich, H. J. Mang, and J. Pradal, *Z. Physik* **190**, 357 [1966].

Theorie der Polaritonen in zweiachsigen endlichen Ionenkristallen

G. Borstel

Fachbereich Physik der Universität Münster, Lehrstuhl Prof. Dr. L. Merten

(*Z. Naturforsch.* **28 a**, 1055–1058 [1973] ; received 20 March 1973)

Theory of Polaritons in Biaxial Finite Ionic Crystals

A macroscopic theory of polaritons and long optical phonons in biaxial finite ionic crystals is presented. For the case of a crystal plate it is shown that the dispersion of surface and bulk polaritons is determined by a system of nonlinear equations. These equations may be combined to an explicit dispersion formula only for propagation directions parallel to the principal axes of the dielectric tensor of the crystal.

Einleitung

In letzter Zeit ist die Bestimmung der Dispersionskurven von Oberflächenpolaritonen in endlichen oder halbunendlichen Ionenkristallen (z.B. GaP, NaCl, CaF₂, α -Quarz) durch verhinderte Totalreflexion¹ in zahlreichen experimentellen Arbeiten behandelt worden^{2–4}. Die theoretische Berechnung solcher Dispersionskurven wurde für Kristalle kubischer Symmetrie mittels eines makroskopischen Ansatzes von Kliever und Fuchs^{5–7} und von Englman und Ruppin^{8–10}, mittels eines mikroskopischen Ansatzes von Lucas¹¹ und von Tong und Maradudin¹² durchgeführt. 1970/71 wurden die bisherigen Ergebnisse von Ruppin und Englman¹³ sowie Maradudin u. a.¹⁴ zusammengefaßt. Dabei zeigt sich, daß sich die für kubische Kristalle gewonnenen expliziten Dispersionsformeln nur für Hauptrichtungen einachsiger oder zweiachsiger Kristallsysteme verallgemeinern lassen. Eine makroskopische Theorie zur Berechnung der Dispersionskurven für beliebige Richtungen des Phononenwellenvektors scheint jedoch für zweiachsige endliche Kristalle bisher noch

zu fehlen¹⁵. Ziel dieser und folgender Arbeiten ist es daher, ausgehend von einem makroskopischen Ansatz, das Dispersionsverhalten in zweiachsigen endlichen Ionenkristallen allgemein zu untersuchen.

Theorie

Zur Berechnung der Dispersionskurven von Polaritonen in endlichen Kristallen wählen wir die in Abb. 1 dargestellte Geometrie einer kristallinen

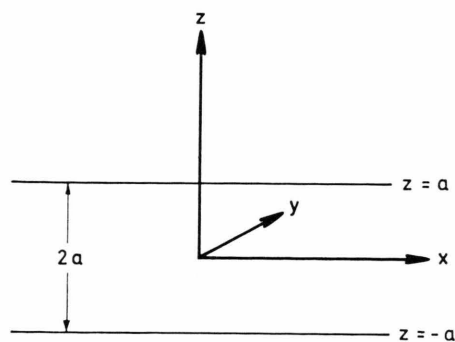


Abb. 1. Geometrie der Kristallplatte.