

# Erweiterung der Neuen Tamm-Dancoff-Methode auf Phasenübergänge in Vielteilchensystemen

A. Friederich, W. Gerling und K. Bleuler

Institut für Theoretische Kernphysik der Universität Bonn

(Z. Naturforsch. 30 a, 142–157 [1975]; eingegangen am 16. November 1974)

*Extension of the New Tamm-Dancoff Method to Phase Transitions in Many-Body Systems*

We extend the New Tamm-Dancoff method by introducing intermediate states. In this way we are able to treat with the Green's function method the effect of nearby levels in many-body systems. We formulate the  $\eta$ - and the  $\zeta$ -function method with intermediate states. Already in first order, the  $\eta$ -function method yields a whole series of new approximations in addition to known theories such as the Hartree-Fock theory and the Hartree-Bogoliubov theory. As an example we study intensively "the Hartree-Fock theory with intermediate states". The  $\zeta$ -function method which is based on the  $\eta$ -function method yields in first order in addition to RPA, quasi-particle RPA and other approximations "RPA with intermediate states". We apply the Hartree-Fock theory with intermediate states and RPA with intermediate states to the exactly solvable Lipkin model.

## 1. Einleitung

Wenn mehrere Niveaus eines nicht-relativistischen oder relativistischen Vielteilchensystems dicht beieinander liegen, versagen sowohl die Störungstheorie als auch die Theorie der Green-Funktionen. Die Supraleitung, in der der normale und der supraleitende Zustand „konkurrieren“, liefert das bekannteste Beispiel für dieses Versagen<sup>1</sup>. Hier hat man sehr schnell einen Ausweg gefunden: die Hartree-Bogoliubov-Theorie. In ihr werden die „gefährlichen Diagramme“ der Störungsrechnung durch eine kanonische Transformation abgespalten und durch Lösen der Hartree-Bogoliubov-Gleichungen kompensiert<sup>2</sup>. Danach ist Störungsrechnung wieder

möglich. Dieses Beispiel weist darauf hin, daß die Wirkungen benachbarter Niveaus in der Theorie der Green-Funktionen von vornherein zu berücksichtigen sind<sup>3</sup>. Gorkov hat diese Forderung für Paarungskorrelationen erfüllt, indem er die Vierpunkt-Green-Funktionen unter Einbeziehung der „anormalen“ Green-Funktionen faktorisiert und das unendliche System der Bewegungsgleichungen für die Mehrpunkt-Green-Funktionen in ein Näherungssystem, das nur Zweipunkt-Green-Funktionen enthält, übergeführt hat<sup>4</sup>. Dieses Verfahren reproduziert die Hartree-Bogoliubov-Theorie<sup>5,6</sup>. Da wir es als grundlegend für Verallgemeinerungen ansehen, geben wir die Gorkov-Faktorisierung an:

$$\begin{aligned} \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_1 \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle &= \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_1 \Psi_1^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_2^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle - \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_1 \Psi_2^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_1^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \\ &+ \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_1 | 0, \mathcal{N}+2 \rangle \langle 0, \mathcal{N}+2 | T \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle ; \\ \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_3 \Psi_2 \Psi_1 \Psi_1^\dagger | 0, \mathcal{N}+2 \rangle &= \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_1 \Psi_1^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_3 \Psi_2 | 0, \mathcal{N}+2 \rangle \\ &- \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_1^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_3 \Psi_1 | 0, \mathcal{N}+2 \rangle \\ &+ \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_3 \Psi_1^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_1 | 0, \mathcal{N}+2 \rangle . \end{aligned} \quad (1.1)$$

Hier sind  $|0, \mathcal{N}\rangle$  bzw.  $|0, \mathcal{N}+2\rangle$  der Grundzustand eines  $\mathcal{N}$ - bzw.  $(\mathcal{N}+2)$ -Teilchen-Systems und  $\Psi_i$  der Feldoperator im Punkt

$$i = (r_i, t_i, \sigma_i, \tau_i) . \quad (1.2)$$

Sonderdruckanforderungen an Dr. A. Friederich und Dr. W. Gerling, Institut für Theoretische Kernphysik der Universität, D-5300 Bonn, Nußallee 14–16.

Wir verallgemeinern die Gorkov-Faktorisierung in verschiedener Hinsicht:

1. Wir lassen als konkurrierende Zustände nicht nur einen normalen und einen supraleitenden Zustand zu, wie in der Hartree-Bogoliubov-Theorie, sondern beliebige, mit der Teilchenzahlerhaltung verträgliche.
2. Wir definieren auch die höheren Näherungen.



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.

Wir nennen die konkurrierenden Zustände Zwischenzustände. In Abhängigkeit von der Wahl der Zwischenzustände gelangen wir schon in erster Näherung nicht nur zu bekannten Näherungsverfahren, wie Hartree-Fock- und Hartree-Bogoliubov-Theorie, sondern auch zu bisher unbekannten. Bisher unbekannt war die Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen, ein Gleichungssystem für  $m$  ( $0 < m < \infty$ ) Zwischenzustände der Teilchenzahl  $\mathcal{N}$ . Wir demonstrieren an ihr die Tragweite unseres neuen Verfahrens.

In einer früheren Arbeit haben wir betont, daß die Neue Tamm-Dancoff-Methode einen Rahmen für weitere Verfeinerungen nicht-relativistischer und relativistischer Näherungsverfahren abgibt<sup>7</sup>. Die Idee ist, neue  $n$ -Punkt-Funktionen einzuführen, die nur von den Mehrpunkt-Green-Funktionen gleicher und niedrigerer Punktezahl abhängen, und das unendliche System der Bewegungsgleichungen durch Nullsetzen der neuen  $n$ -Punkt-Funktionen mit  $n \geq n_0$  und durch Vernachlässigen aller Beziehungen, in denen  $n$ -Punkt-Funktionen mit  $n > n_0 + 1$  vorkommen, abzuschneiden. Die Gorkov-Faktorisierung ist ein Beispiel für  $n_0 = 4$ . Ohne die Methode der erzeugenden Funktionale wäre diese Idee undurchführbar. Daher formulieren wir Beziehungen zwischen den verschiedenen Sätzen von Mehrpunkt-Funktionen mit ihren erzeugenden Funktionalen. Dürr und Wagner haben 4 unendliche Funktionensätze als Darstellung der Zustandsvektoren eingeführt, die  $\tau$ - (Mehrpunkt-Green-Funktionen),  $\eta$ -,  $\zeta$ - und  $\varphi$ -Funktionen<sup>8</sup>. In dieser Arbeit verallgemeinern wir die Definition der  $\eta$ - und  $\zeta$ -Funktionen durch Einbeziehen einer beliebigen, aber endlichen Anzahl von Zwischenzuständen. Die  $\eta$ -Funktionen-Methode mit Zwischenzuständen liefert hermitesche, doch nicht-lineare Näherungssysteme

für diese Zwischenzustände, während die  $\zeta$ -Funktionen-Methode mit Zwischenzuständen, auf den Ergebnissen der  $\eta$ -Funktionen-Methode aufbauend, zu linearen, doch nicht-hermiteschen Näherungssystemen für die anderen Zustände führt. In dieser Hinsicht unterscheiden sich  $\eta$ - und  $\zeta$ -Funktionen-Methode mit Zwischenzuständen nicht von der gewöhnlichen  $\eta$ - und der gewöhnlichen  $\zeta$ -Funktionen-Methode, die in erster Näherung die Hartree-Fock-Theorie bzw RPA ergeben<sup>7, 9, 10</sup>. Mit der Methode der erzeugenden Funktionale ist die Verallgemeinerung besonders einfach: Man ersetzt in der Arbeit von Dürr und Wagner<sup>8</sup> die erzeugenden Funktionale zwischen dem Grundzustand durch die Matrizen der erzeugenden Funktionale zwischen den Zwischenzuständen.

In Abschnitt 2 leiten wir die  $\eta$ - und die  $\zeta$ -Regel mit Zwischenzuständen her und wenden sie auf die Vierpunkt-Green-Funktionen an. Wir betrachten nur einige Sonderfälle der zahlreichen Faktorisierungsmöglichkeiten, zu denen bei der  $\eta$ -Regel die Gorkov- und die zur Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen führende Faktorisierung und bei der  $\zeta$ -Regel die RPA- und die zu RPA mit Zwischenzuständen führende Faktorisierung gehören. In Abschnitt 3 formulieren wir die Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen für nicht-relativistische Vielteilchensysteme. In Abschnitt 4 geben wir ein Lösungsverfahren und die Beziehung zur „generalized Hartree-Fock approximation (GHFA)“ von Kerman und Klein<sup>11–13</sup> an. In Abschnitt 5 wenden wir die Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen und RPA mit Zwischenzuständen auf das Lipkin-Modell an. In Abschnitt 6 diskutieren wir einige zukünftige Anwendungen unseres Verfahrens.

## 2. Die $\eta$ - und $\zeta$ -Funktionen-Methode mit Zwischenzuständen

### 2.1. Die $\eta$ -Funktionen-Methode mit Zwischenzuständen

#### 2.1.1. Die $\eta$ -Regel mit Zwischenzuständen

Wir geben die nächstliegende Verallgemeinerung der Dürr-Wagnerschen  $\eta$ -Regel<sup>8</sup> an, indem wir voraussetzen, daß die  $\eta$ -Funktionen von den zu den Zwischenzuständen

$$|I_1\rangle, |I_2\rangle, \dots, |I_m\rangle \quad (0 < m < \infty) \quad (2.1)$$

gehörenden Mehrpunkt-Green-Funktionen

$$\begin{aligned} &\langle I | T \Psi_k \dots \Psi_1 \Psi_1^\dagger \dots \Psi_l^\dagger | J \rangle; \\ &|I\rangle, |J\rangle \in \{|I_1\rangle, |I_2\rangle, \dots, |I_m\rangle\}; k, l = 0, 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (2.2)$$

abhängen. Wir bilden aus dieser unendlichen Menge von Mehrpunkt-Green-Funktionen die erzeugenden Funktionale

$$\mathfrak{Z}_{I_i I_j} [u, \bar{u}] = \sum_{k, l=0}^{\infty} \frac{i^{k+l}}{k! l!} \langle I_i | \Psi_k \dots \Psi_1 \Psi_1^\dagger \dots \Psi_l^\dagger | I_j \rangle \bar{u}_k \dots \bar{u}_1 u_{1'} \dots u_{l'} \quad (2.3)$$

und aus ihnen die Matrix

$$(\mathfrak{Z}_{I_i I_j} [u, \bar{u}]) . \quad (2.4)$$

Wir führen neue Mehrpunkt-Funktionen  $\eta_{I_i I_j}^{(k|l)} (k, \dots, 1 | 1', \dots, l')$  dadurch ein, daß wir die erzeugenden Funktionale

$$H_{I_i I_j} [u, \bar{u}] = \sum_{k, l=0}^{\infty} \frac{i^{k+l}}{k! l!} (1 - \delta_{k,0} \delta_{l,0}) \eta_{I_i I_j}^{(k|l)} (k, \dots, 1 | 1', \dots, l') \bar{u}_k \dots \bar{u}_1 u_{1'} \dots u_{l'} \quad (2.5)$$

ebenso wie die erzeugenden Funktionale der Mehrpunkt-Green-Funktionen zur Matrix

$$(H_{I_i I_j} [u, \bar{u}]) \quad (2.6)$$

zusammenfassen und die Gleichung

$$\mathfrak{Z}_{I_i I_j} [u, \bar{u}] = (\exp \{H_{I_m I_n} [u, \bar{u}]\})_{I_i I_j} \quad (2.7)$$

fordern. Das ist bereits die  $\eta$ -Regel mit Zwischenzuständen in Funktionalform. Explizit ist

$$(\exp \{H_{I_m I_n} [u, \bar{u}]\})_{I_i I_j} = \delta_{ij} + (1/1!) H_{I_i I_j} [u, \bar{u}] + (1/2!) \sum_{j_1=1}^m H_{I_i I_{j_1}} [u, \bar{u}] H_{I_{j_1} I_j} [u, \bar{u}] + \dots \quad (2.8)$$

Ein Vergleich der Koeffizienten von  $\bar{u}_k \dots \bar{u}_1 u_{1'} \dots u_{l'}$  liefert die  $\eta$ -Regel mit Zwischenzuständen, die, abgesehen von den Summationen über die Zwischenzustände, dieselbe Gestalt hat wie die Dürr-Wagnersche  $\eta$ -Regel:

$$\begin{aligned} \eta_{I_i I_j}^{(k|l)} (k, \dots, 1 | 1', \dots, l') &= -\delta_{ij} \delta_{k0} \delta_{l0} + \langle I_i | T \Psi_k \dots \Psi_1 \Psi_1^\dagger \dots \Psi_l^\dagger | I_j \rangle \\ &+ \sum_{n=1}^{k+l-1} \frac{(-1)^n}{n+1} \sum_{i(1), \dots, i(k)=1}^k \sum_{\kappa_1=0}^k \sum_{\kappa_2=\kappa_1}^k \dots \sum_{\kappa_n=\kappa_{n-1}}^k \sum_{j(1), \dots, j(l)=1}^l \sum_{\lambda_1=0}^l \sum_{\lambda_2=\lambda_1}^l \dots \sum_{\lambda_n=\lambda_{n-1}}^l \\ &(-1)^{\sum_{i=1}^n (\kappa_i - \kappa_{i-1} + \lambda_i - \lambda_{i-1}) (k - \kappa_i)} \delta_{\overbrace{1, \dots, \kappa_1, \kappa_1+1, \dots, \kappa_2, \dots, \kappa_n+1, \dots, k}^{i(1), \dots, i(\kappa_1), i(\kappa_1+1), \dots, i(\kappa_2), \dots, i(\kappa_n+1), i(k)}} \\ &\delta_{\overbrace{1, \dots, \lambda_1, \lambda_1+1, \dots, \lambda_2, \dots, \lambda_n+1, \dots, l}^{j(1), \dots, j(\lambda_1), j(\lambda_1+1), \dots, j(\lambda_2), \dots, j(\lambda_n+1), j(l)}} \sum_{j_1=1}^m \sum_{j_2=1}^m \dots \sum_{j_n=1}^m \\ &(1 - \delta_{\kappa_1, 0} \delta_{\lambda_1, 0}) \langle I_i | T \Psi_{i(\kappa_1)} \dots \Psi_{i(1)} \Psi_{j(1)'}^\dagger \dots \Psi_{j(\lambda_1)'}^\dagger | I_{j_1} \rangle \\ &(1 - \delta_{\kappa_2 - \kappa_1, 0} \delta_{\lambda_2 - \lambda_1, 0}) \langle I_{j_1} | T \Psi_{i(\kappa_2)} \dots \Psi_{i(\kappa_1+1)} \Psi_{j(\lambda_1+1)'}^\dagger \dots \Psi_{j(\lambda_2)'}^\dagger | I_{j_2} \rangle \\ &\vdots \\ &(1 - \delta_{\kappa_n - \kappa_{n-1}, 0} \delta_{\lambda_n - \lambda_{n-1}, 0}) \langle I_{j_{n-1}} | T \Psi_{i(\kappa_n)} \dots \Psi_{i(\kappa_{n-1}+1)} \Psi_{j(\lambda_{n-1}+1)'}^\dagger \dots \Psi_{j(\lambda_n)'}^\dagger | I_{j_n} \rangle \\ &(1 - \delta_{k - \kappa_n, 0} \delta_{l - \lambda_n, 0}) \langle I_{j_n} | T \Psi_{i(k)} \dots \Psi_{i(\kappa_n+1)} \Psi_{j(\lambda_n+1)'}^\dagger \dots \Psi_{j(l)'}^\dagger | I_j \rangle . \end{aligned} \quad (2.9)$$

Hier bedeuten  $\delta_{1, \dots, k}^{i(1), \dots, i(k)}$  das verallgemeinerte Kronecker-Symbol:

$$\delta_{1, \dots, k}^{i(1), \dots, i(k)} = \begin{vmatrix} \delta_{1, i(1)} & \dots & \delta_{1, i(k)} \\ \vdots & & \vdots \\ \delta_{k, i(1)} & \dots & \delta_{k, i(k)} \end{vmatrix}$$

und der Bogen die natürliche Anordnung der darüber stehenden ganzen Zahlen.

Wir haben zur Ableitung dieser und ähnlicher Formeln einen Kalkül entwickelt, den wir an anderer Stelle ausführlich darstellen werden.

### 2.1.2. Die Faktorisierung der Vierpunkt-Green-Funktionen nach der $\eta$ -Regel

Die  $\eta$ -Funktionen-Methode ist dadurch definiert, daß alle  $n$ -Punkt- $\eta$ -Funktionen mit  $n \geq n_0$  gleich null gesetzt und alle Beziehungen, in denen  $n$ -Punkt-Funktionen mit  $n > n_0 + 1$  vorkommen, vernachlässigt werden. Nach Gl. (2.9) bedeutet das Faktorisierung der  $n$ -Punkt-Green-Funktionen mit  $n \geq n_0$  und Überführung des unendlichen Systems der Bewegungsgleichungen in ein Näherungssystem, das nur

zu den Zwischenzuständen  $|I_1\rangle, |I_2\rangle, \dots, |I_m\rangle$  gehörende  $n$ -Punkt-Green-Funktionen mit  $n < n_0$  enthält. Die einfachsten nicht-trivialen Fälle sind  $n_0 = 3$  und  $n_0 = 4$ . Das Ausmaß der Verallgemeinerung erkennt man bereits bei der Faktorisierung der Vierpunkt-Green-Funktionen

$$\langle I_i | T \Psi_2 \Psi_1 \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger | I_j \rangle; \quad i, j = 1, \dots, m,$$

wo

$$\eta_{I_i I_j}^{(2|2)}(2, 1 | 1', 2') = 0; \quad i, j = 1, \dots, m,$$

gesetzt wird:

$$\begin{aligned} & \langle I_i | T \Psi_2 \Psi_1 \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger | I_j \rangle \\ &= \frac{1}{2} \left[ - \sum_{i(1), i(2)=1}^2 \delta_{1,2}^{i(1), i(2)} \sum_{j_1=1}^m \langle I_i | T \Psi_{i(1)} | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_{i(2)} \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger | I_j \rangle \right. \\ & \quad - \sum_{i(1), i(2)=1}^2 \delta_{1,2}^{i(1), i(2)} \sum_{j_1=1}^m \langle I_i | T \Psi_{i(1)} \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_{i(2)} | I_j \rangle \\ & \quad + \sum_{j(1), j(2)=1}^2 \delta_{1,2}^{j(1), j(2)} \sum_{j_1=1}^m \langle I_i | T \Psi_{j(1)'}^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_2 \Psi_1 \Psi_{j(2)'}^\dagger | I_j \rangle \\ & \quad + \sum_{j(1), j(2)=1}^2 \delta_{1,2}^{j(1), j(2)} \sum_{j_1=1}^m \langle I_i | T \Psi_2 \Psi_1 \Psi_{j(1)'}^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_{j(2)'}^\dagger | I_j \rangle \\ & \quad + \sum_{j_1=1}^m \langle I_i | T \Psi_2 \Psi_1 | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger | I_j \rangle + \sum_{j_1=1}^m \langle I_i | T \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_2 \Psi_1 | I_j \rangle \\ & \quad + \sum_{i(1), i(2)=1}^2 \sum_{j(1), j(2)=1}^2 \delta_{1,2}^{i(1), i(2)} \delta_{1,2}^{j(1), j(2)} \sum_{j_1=1}^m \langle I_i | T \Psi_{i(1)} \Psi_{j(1)'}^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_{i(2)} \Psi_{j(2)'}^\dagger | I_j \rangle \\ & \quad - \frac{1}{3} \sum_{i(1), i(2)=1}^2 \sum_{j(1), j(2)=1}^2 \sum_{j_1=1}^m \sum_{j_2=1}^m \\ & \quad \cdot [ - \delta_{1,2}^{i(1), i(2)} \delta_{1,2}^{j(1), j(2)} ( \langle I_i | T \Psi_{i(1)} | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_{i(2)} | I_{j_2} \rangle \langle I_{j_2} | T \Psi_{j(1)'}^\dagger \Psi_{j(2)'}^\dagger | I_j \rangle \\ & \quad + \langle I_i | T \Psi_{i(1)} | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_{j(1)'}^\dagger \Psi_{j(2)'}^\dagger | I_{j_2} \rangle \langle I_{j_2} | T \Psi_{i(2)} | I_j \rangle \\ & \quad + \langle I_i | T \Psi_{j(1)'}^\dagger \Psi_{j(2)'}^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_{i(1)} | I_{j_2} \rangle \langle I_{j_2} | T \Psi_{i(2)} | I_j \rangle ) \\ & \quad + \delta_{1,2}^{i(1), i(2)} \delta_{1,2}^{j(1), j(2)} ( \langle I_i | T \Psi_{i(2)} \Psi_{i(1)} | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_{j(1)'}^\dagger | I_{j_2} \rangle \langle I_{j_2} | T \Psi_{j(2)'}^\dagger | I_j \rangle \\ & \quad + \langle I_i | T \Psi_{j(1)'}^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_{i(2)} \Psi_{i(1)} | I_{j_2} \rangle \langle I_{j_2} | T \Psi_{j(2)'}^\dagger | I_j \rangle \\ & \quad + \langle I_i | T \Psi_{j(1)'}^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_{j(2)'}^\dagger | I_{j_2} \rangle \langle I_{j_2} | T \Psi_{i(2)} \Psi_{i(1)} | I_j \rangle ) \\ & \quad + \delta_{1,2}^{i(1), i(2)} \delta_{1,2}^{j(1), j(2)} ( \langle I_i | T \Psi_{i(1)} | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_{j(1)'}^\dagger | I_{j_2} \rangle \langle I_{j_2} | T \Psi_{i(2)} \Psi_{j(2)'}^\dagger | I_j \rangle \\ & \quad - \langle I_i | T \Psi_{i(1)} | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_{i(2)} \Psi_{j(1)'}^\dagger | I_{j_2} \rangle \langle I_{j_2} | T \Psi_{j(2)'}^\dagger | I_j \rangle \\ & \quad - \langle I_i | T \Psi_{j(1)'}^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_{i(1)} | I_{j_2} \rangle \langle I_{j_2} | T \Psi_{i(2)} \Psi_{j(2)'}^\dagger | I_j \rangle \\ & \quad + \langle I_i | T \Psi_{j(1)'}^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_{i(1)} \Psi_{j(2)'}^\dagger | I_{j_2} \rangle \langle I_{j_2} | T \Psi_{i(2)} | I_j \rangle \\ & \quad + \langle I_i | T \Psi_{i(1)} \Psi_{j(1)'}^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_{i(2)} | I_{j_2} \rangle \langle I_{j_2} | T \Psi_{j(2)'}^\dagger | I_j \rangle ) \end{aligned} \quad (2.10)$$



$$\begin{aligned}
& - \langle I_i | T \Psi_{i(1)} \Psi_{j(1)'}^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_{j(2)'}^\dagger | I_{j_2} \rangle \langle I_{j_2} | T \Psi_{i(2)} | I_j \rangle \rangle ] \\
& + \frac{1}{4} \sum_{i(1), i(2)=1}^2 \sum_{j(1), j(2)=1}^2 \sum_{j_1=1}^m \sum_{j_2=1}^m \sum_{j_3=1}^m \delta_{1, \frac{1}{2}}^{i(1), i(2)} \delta_{1, \frac{1}{2}}^{j(1), j(2)} \\
& \cdot [ - \langle I_i | \Psi_{j(1)'}^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | \Psi_{j(2)'}^\dagger | I_{j_2} \rangle \langle I_{j_2} | \Psi_{i(1)} | I_{j_3} \rangle \langle I_{j_3} | \Psi_{i(2)} | I_j \rangle \\
& + \langle I_i | \Psi_{j(1)'}^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | \Psi_{i(1)} | I_{j_2} \rangle \langle I_{j_2} | \Psi_{j(2)'}^\dagger | I_{j_3} \rangle \langle I_{j_3} | \Psi_{i(2)} | I_j \rangle \\
& - \langle I_i | \Psi_{j(1)'}^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | \Psi_{i(1)} | I_{j_2} \rangle \langle I_{j_2} | \Psi_{i(2)} | I_{j_3} \rangle \langle I_{j_3} | \Psi_{j(2)'}^\dagger | I_j \rangle \\
& - \langle I_i | \Psi_{i(1)} | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | \Psi_{j(1)'}^\dagger | I_{j_2} \rangle \langle I_{j_2} | \Psi_{j(2)'}^\dagger | I_{j_3} \rangle \langle I_{j_3} | \Psi_{i(2)} | I_j \rangle \\
& + \langle I_i | \Psi_{i(1)} | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | \Psi_{j(1)'}^\dagger | I_{j_2} \rangle \langle I_{j_2} | \Psi_{i(2)} | I_{j_3} \rangle \langle I_{j_3} | \Psi_{j(2)'}^\dagger | I_j \rangle \\
& - \langle I_i | \Psi_{i(1)} | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | \Psi_{i(2)} | I_{j_2} \rangle \langle I_{j_2} | \Psi_{j(1)'}^\dagger | I_{j_3} \rangle \langle I_{j_3} | \Psi_{j(2)'}^\dagger | I_j \rangle ] .
\end{aligned}$$

Diese Faktorisierung der Vierpunkt-Green-Funktion wird wesentlich vereinfacht, wenn man nur Zwischenzustände mit den Teilchenzahlen  $\mathcal{N}$  und  $\mathcal{N} \pm 2$  zuläßt:

$$\begin{aligned}
& \langle I_i | T \Psi_2 \Psi_1 \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger | I_j \rangle \\
& + \frac{1}{2} \sum_{j_1=1}^m \langle I_i | T \Psi_2 \Psi_1 | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger | I_j \rangle \\
& + \frac{1}{2} \sum_{j_1=1}^m \langle I_i | T \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_2 \Psi_1 | I_j \rangle \\
& + \frac{1}{2} \sum_{i(1), i(2)=1}^2 \sum_{j(1), j(2)=1}^2 \delta_{1, \frac{1}{2}}^{i(1), i(2)} \delta_{1, \frac{1}{2}}^{j(1), j(2)} \sum_{j_1=1}^m \langle I_i | T \Psi_{i(1)} \Psi_{j(1)'}^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_{i(2)} \Psi_{j(2)'}^\dagger | I_j \rangle .
\end{aligned} \tag{2.11}$$

In dieser Formel sind einige aus der Vielteilchentheorie bekannte Spezialfälle enthalten.

(I) Hartree-Fock-Theorie:  $m = 1$ ;  $|I_1\rangle = |0, \mathcal{N}\rangle$ ;

$$\begin{aligned}
\langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_1 \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle & = \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_1 \Psi_1^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_2^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \\
& - \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_1 \Psi_2^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_1^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle .
\end{aligned} \tag{2.12}$$

(II) Hartree-Bogoliubov-Theorie:

$$m = 2; \quad |I_1\rangle = |0, \mathcal{N}\rangle; |I_2\rangle = |0, \mathcal{N} + 2\rangle;$$

$$\begin{aligned}
& \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_1 \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \\
& = \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_1 \Psi_1^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_2^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \\
& - \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_1 \Psi_2^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_1^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \\
& + \frac{1}{2} \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_1 | 0, \mathcal{N} + 2 \rangle \langle 0, \mathcal{N} + 2 | T \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle ; \\
& \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_3 \Psi_2 \Psi_1 \Psi_1^\dagger | 0, \mathcal{N} + 2 \rangle \\
& = \frac{1}{2} [ \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_1 \Psi_1^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_3 \Psi_2 | 0, \mathcal{N} + 2 \rangle \\
& - \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_1^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_3 \Psi_1 | 0, \mathcal{N} + 2 \rangle \\
& + \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_3 \Psi_1^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_1 | 0, \mathcal{N} + 2 \rangle \\
& + \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_1 | 0, \mathcal{N} + 2 \rangle \langle 0, \mathcal{N} + 2 | T \Psi_3 \Psi_1^\dagger | 0, \mathcal{N} + 2 \rangle \\
& - \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_3 \Psi_1 | 0, \mathcal{N} + 2 \rangle \langle 0, \mathcal{N} + 2 | T \Psi_2 \Psi_1^\dagger | 0, \mathcal{N} + 2 \rangle \\
& + \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_3 \Psi_2 | 0, \mathcal{N} + 2 \rangle \langle 0, \mathcal{N} + 2 | T \Psi_1 \Psi_1^\dagger | 0, \mathcal{N} + 2 \rangle ] .
\end{aligned} \tag{2.13}$$

Obwohl die Gl. (2.13) sich durch Austauschsterme für die Zwischenzustände von den Gln. (1.1) unterscheiden, führen beide Faktorisierungen zur Hartree-Bogoliubov-Theorie.

Wir untersuchen in den folgenden Abschnitten einen dritten, bisher unbekannten Sonderfall.

(III) Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen:

$|I_1\rangle, |I_2\rangle, \dots, |I_m\rangle$  sind  $m$  Zwischenzustände der Teilchenzahl  $\mathcal{N}$ ;

$$\begin{aligned} & \langle I_i | T \Psi_2 \Psi_1 \Psi_{1'}^\dagger \Psi_{2'}^\dagger | I_j \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{j_1=1}^m [\langle I_i | T \Psi_1 \Psi_{1'}^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_2 \Psi_{2'}^\dagger | I_j \rangle \\ & - \langle I_i | T \Psi_2 \Psi_{1'}^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_1 \Psi_{2'}^\dagger | I_j \rangle \\ & - \langle I_i | T \Psi_1 \Psi_{2'}^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_2 \Psi_{1'}^\dagger | I_j \rangle \\ & + \langle I_i | T \Psi_2 \Psi_{2'}^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_1 \Psi_{1'}^\dagger | I_j \rangle]; \\ & i, j = 1, 2, \dots, m. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Dies ist die nächstliegende Verallgemeinerung der Hartree-Fock-Theorie.

## 2.2. Die $\zeta$ -Funktionen-Methode mit Zwischenzuständen

### 2.2.1. Die $\zeta$ -Regel mit Zwischenzuständen

Die  $\eta$ -Funktionen-Methode überführt das unendliche System der Bewegungsgleichungen in ein endliches, aber nicht-lineares Näherungssystem. Da es mit der Anzahl der Zwischenzustände

$$|I_1\rangle, |I_2\rangle, \dots, |I_m\rangle \quad (0 < m < \infty) \quad (2.15)$$

immer komplizierter wird, versucht man, Mehrpunkt-Green-Funktionen der Art

$$\langle I_i | T \Psi_k \dots \Psi_1 \Psi_{l'}^\dagger \dots \Psi_{l'}^\dagger | B \rangle; \langle I_i | B \rangle = 0; \quad i = 1, \dots, m; \quad k, l = 1, 2, \dots, \quad (2.16)$$

durch lineare Näherungssysteme zu bestimmen. Will man dabei die mit der  $\eta$ -Funktionen-Methode berechneten Mehrpunkt-Green-Funktionen verwenden, so hat man die Mehrpunkt-Green-Funktionen (2.16) nach der nächstliegenden Verallgemeinerung der Dürr-Wagnerschen  $\zeta$ -Regel<sup>8</sup> zu faktorisieren.

Wir führen neue Mehrpunkt-Funktionen  $\zeta_{I_j B}^{(k|l)}(k, \dots, 1 | 1', \dots, l')$  dadurch ein, daß wir die erzeugenden Funktionale

$$Z_{I_j B}[u, \bar{u}] = \sum_{k, l=0}^{\infty} \frac{k! l!}{i^{k+l}} \zeta_{I_j B}^{(k|l)}(k, \dots, 1 | 1', \dots, l') \bar{u}_k \dots \bar{u}_1 u_{1'} \dots u_{l'}; \quad j = 1, \dots, m, \quad (2.17)$$

zur Spalte

$$(Z_{I_j B}[u, \bar{u}]) \quad (2.18)$$

zusammenfassen und die Gleichung

$$\mathfrak{Z}_{I_j B}[u, \bar{u}] = \sum_{j=1}^m \mathfrak{Z}_{I_j I_j}[u, \bar{u}] Z_{I_j B}[u, \bar{u}] \quad (2.19)$$

fordern. Das ist bereits die  $\zeta$ -Regel mit Zwischenzuständen in Funktionalform. Ein Vergleich der Koeffizienten von  $\bar{u}_k \dots \bar{u}_1 u_{1'} \dots u_{l'}$  liefert die  $\zeta$ -Regel mit Zwischenzuständen die, abgesehen von den Summationen über die Zwischenzustände, dieselbe Gestalt hat wie die Dürr-Wagnersche  $\zeta$ -Regel:

$$\begin{aligned} \zeta_{I_j B}^{(k|l)}(k, \dots, 1 | 1', \dots, l') &= \langle I_i | T \Psi_k \dots \Psi_1 \Psi_{1'}^\dagger \dots \Psi_{l'}^\dagger | B \rangle \\ &+ \sum_{n=1}^{k+l-1} (-1)^n \sum_{i(1), \dots, i(k)=1}^k \sum_{\kappa_1=0}^k \sum_{\kappa_2=\kappa_1}^k \dots \sum_{\kappa_n=\kappa_{n-1}}^k \sum_{j(1), \dots, j(l)=1}^l \sum_{\lambda_1=0}^l \sum_{\lambda_2=\lambda_1}^l \dots \sum_{\lambda_n=\lambda_{n-1}}^l \\ &\cdot (-1)_{\sum_{i=1}^n (\kappa_i - \kappa_{i-1} + \lambda_i - \lambda_{i-1})} (k - \kappa_i) \delta_{\overbrace{1, \dots, \kappa_1, \kappa_1+1, \dots, \kappa_2, \dots, \kappa_n+1, \dots, k}^{i(1), \dots, i(\kappa_i), i(\kappa_i+1), \dots, i(\kappa_2), \dots, i(\kappa_n+1), \dots, i(k)}} \\ &\cdot \delta_{\overbrace{1, \dots, \lambda_1, \lambda_1+1, \dots, \lambda_2, \dots, \lambda_n+1, \dots, l}^{j(1), \dots, j(\lambda_1), j(\lambda_1+1), \dots, j(\lambda_2), \dots, j(\lambda_n+1), \dots, j(l)}} \sum_{j_1=1}^m \sum_{j_2=1}^m \dots \sum_{j_n=1}^m \\ &\cdot (1 - \delta_{\kappa_1, 0} \delta_{\lambda_1, 0}) \langle I_i | T \Psi_{i(\kappa_i)} \dots \Psi_{i(1)} \Psi_{j(1)}^\dagger \dots \Psi_{j(\lambda_1)}^\dagger | I_{j_1} \rangle \\ &\cdot (1 - \delta_{\kappa_2 - \kappa_1, 0} \delta_{\lambda_2 - \lambda_1, 0}) \langle I_{j_1} | T \Psi_{i(\kappa_2)} \dots \Psi_{i(\kappa_1+1)} \Psi_{j(\lambda_1+1)}^\dagger \dots \Psi_{j(\lambda_2)}^\dagger | I_{j_2} \rangle \\ &\vdots \\ &\cdot (1 - \delta_{\kappa_n - \kappa_{n-1}, 0} \delta_{\lambda_n - \lambda_{n-1}, 0}) \langle I_{j_{n-1}} | T \Psi_{i(\kappa_n)} \dots \Psi_{i(\kappa_{n-1}+1)} \Psi_{j(\lambda_{n-1}+1)}^\dagger \dots \Psi_{j(\lambda_n)}^\dagger | I_{j_n} \rangle \\ &\cdot \langle I_{j_n} | T \Psi_{i(k)} \dots \Psi_{i(\kappa_n+1)} \Psi_{j(\lambda_{n-1}+1)}^\dagger \dots \Psi_{j(l)}^\dagger | B \rangle. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Für Gl. (2.20) gelten dieselben Erklärungen wie für Gleichung (2.9).

## 2.2.2. Die Faktorisierung der Vierpunkt-Green-Funktionen nach der $\zeta$ -Regel

Die  $\zeta$ -Funktionen-Methode ist dadurch definiert, daß alle  $n$ -Punkt- $\zeta$ -Funktionen mit  $n \geq n_0$  gleich null gesetzt werden und alle Beziehungen, in denen  $n$ -Punkt-Funktionen mit  $n > n_0 + 1$  vorkommen, vernachlässigt werden. Nach Gl. (2.20) bedeutet das Faktorisierung der  $n$ -Punkt-Green-Funktionen (2.16) mit  $n \geq n_0$  und Überführung des unendlichen Systems der Bewegungsgleichungen in ein Näherungssystem, das linear in den  $n$ -Punkt-Green-Funktionen (2.16) mit  $n < n_0$  ist.

Da die  $\zeta$ -Regel (2.20) dieselbe Struktur wie die  $\eta$ -Regel (2.9) hat, brauchen wir die der Gl. (2.10) entsprechende Faktorisierungsformel nicht anzugeben. Sie wird wesentlich vereinfacht, wenn man nur Zwischenzustände mit den Teilchenzahlen  $\mathcal{N}$  und  $\mathcal{N} + 2$  zuläßt:

$$\begin{aligned} \langle I_i | T \Psi_2 \Psi_1 \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger | B \rangle &= \sum_{j_1=1}^m \langle I_i | T \Psi_2 \Psi_1 | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger | B \rangle \\ &+ \sum_{j_1=1}^m \langle I_i | T \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_2 \Psi_1 | B \rangle \\ &+ \sum_{i(1), i(2)=1}^2 \sum_{j(1), j(2)=1}^2 \delta_{1, i(1)}^{i(1), i(2)} \delta_{2, i(2)}^{j(1), j(2)} \sum_{j_1=1}^m \langle I_i | T \Psi_{i(1)} \Psi_{j(1)}^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_{i(2)} \Psi_{j(2)}^\dagger | B \rangle; \end{aligned} \quad (2.21)$$

$$\langle I_i | B \rangle = 0; \quad i = 1, \dots, m.$$

In dieser Formel sind zwei aus der Vielteilchentheorie bekannte Spezialfälle enthalten.

---


$$(I) \text{ RPA: } m = 1; \quad |I_1\rangle = |0, \mathcal{N}\rangle;$$

(Man muß also die Hartree-Fock-Gleichungen gelöst haben.)

$$\begin{aligned} \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_1 \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger | B \rangle &= \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_1 \Psi_1^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_2^\dagger | B \rangle \\ &- \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_1^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_1 \Psi_2^\dagger | B \rangle \\ &- \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_1 \Psi_2^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_1^\dagger | B \rangle \\ &+ \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_2^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_1 \Psi_1^\dagger | B \rangle. \end{aligned}$$

(II) Quasiteilchen-RPA:

$$m = 2; \quad |I_1\rangle = |0, \mathcal{N}\rangle; \quad |I_2\rangle = |0, \mathcal{N} + 2\rangle. \quad (2.22)$$

(Man muß also die Hartree-Bogoliubov-Gleichungen gelöst haben.)

$$\begin{aligned} \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_1 \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger | B \rangle &= \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_1 \Psi_1^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_2^\dagger | B \rangle \\ &- \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_1^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_1 \Psi_2^\dagger | B \rangle \\ &- \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_1 \Psi_2^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_1^\dagger | B \rangle \\ &+ \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_2^\dagger | 0, \mathcal{N} \rangle \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_1 \Psi_1^\dagger | B \rangle \\ &+ \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi_2 \Psi_1 | 0, \mathcal{N} + 2 \rangle \\ &\quad \cdot \langle 0, \mathcal{N} + 2 | T \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger | B \rangle; \end{aligned} \quad (2.23)$$

usw.

Eine wesentliche Verbesserung von RPA ist

(III) RPA mit Zwischenzuständen:

$|I_1\rangle, |I_2\rangle, \dots, |I_m\rangle$  sind Zwischenzustände der Teilchenzahl  $\mathcal{N}$ . (Man muß also die Hartree-Fock-Glei-

chungen mit Zwischenzuständen gelöst haben.)

$$\begin{aligned} \langle I_i | T \Psi_2 \Psi_1 \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger | B \rangle &= \sum_{j_1=1}^m [\langle I_i | T \Psi_1 \Psi_1^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_2 \Psi_2^\dagger | B \rangle \\ &- \langle I_i | T \Psi_2 \Psi_1^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_1 \Psi_2^\dagger | B \rangle \\ &- \langle I_i | T \Psi_1 \Psi_2^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_2 \Psi_1^\dagger | B \rangle \\ &+ \langle I_i | T \Psi_2 \Psi_2^\dagger | I_{j_1} \rangle \langle I_{j_1} | T \Psi_1 \Psi_1^\dagger | B \rangle]; \end{aligned} \quad (2.24)$$

## 3. Eine Anwendung der $\eta$ -Funktionen-Methode: die nicht-relativistische Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen

Wir wenden uns aus zwei Gründen der Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen zu:

1. Sie ist ein einfaches Resultat unseres Verfahrens.
2. Sie ist sehr verwandt der „generalized Hartree-Fock approximation (GHFA)“ von Kerman und Klein<sup>11-13</sup>, mit der wir uns nach Aufstellung eines Lösungsverfahrens kritisch auseinandersetzen werden.

Die Abhänderung von GHFA lohnt sich, da die Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen hermitisch formuliert werden kann. Das führt zur Aufstellung eines Lösungsverfahrens und zur Einsicht, daß die Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen, ähnlich der Multi-Konfiguration-Methode von Roothaan und Fäßler<sup>14-16</sup>, den Nachteil hat, die Konfiguration offen zu lassen.

Wir gelangen zur Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen, wenn wir in den Bewegungsgleichungen die Vierpunkt-Green-Funktion gemäß (2.14) faktorisieren. Dadurch entkoppeln die Vier- und Mehrpunkt-Green-Funktionen von den Zweipunkt-Green-Funktionen, so daß ein Gleichungssystem für die Zweipunkt-Green-Funktionen

$$\langle A | T \Psi_1 \Psi_1^\dagger | B \rangle; |A\rangle, |B\rangle \in \{|I_1\rangle, |I_2\rangle, \dots, |I_m\rangle\} \quad (3.1)$$

übrigbleibt.

Im Grenzfall  $t_2' = 2\varepsilon$ ;  $t_1' = \varepsilon$ ;  $t_1 = -\varepsilon$ ;  $t_2 = -2\varepsilon$ ;  $\varepsilon > 0$ ;  $\varepsilon \rightarrow 0$  ist

$$\langle A | a_2^\dagger a_1^\dagger a_1 a_2 | B \rangle$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \sum_I [\langle A | a_1^\dagger a_1 | I \rangle \langle I | a_2^\dagger a_2 | B \rangle \\ &\quad - \langle A | a_1^\dagger a_2 | I \rangle \langle I | a_2^\dagger a_2 | B \rangle \\ &\quad - \langle A | a_2^\dagger a_1 | I \rangle \langle I | a_1^\dagger a_2 | B \rangle \\ &\quad + \langle A | a_2^\dagger a_2 | I \rangle \langle I | a_1^\dagger a_1 | B \rangle] . \end{aligned} \quad (3.2)$$

Wir führen diese Faktorisierung in die Bewegungsgleichungen ein, indem wir die Matrixelemente des Kommutators  $[H, a_q^\dagger a_p]$ , wo

$$H = \sum_{i_1', i_1} \mathcal{J}^{i_1' i_1} a_{i_1'}^\dagger a_{i_1} + \frac{1}{4} \sum_{i_2', i_1', i_1, i_2} V^{i_2' i_1', i_2 i_1} a_{i_2'}^\dagger a_{i_1'}^\dagger a_{i_1} a_{i_2} \quad (3.3)$$

der Hamilton-Operator ist, zwischen den Zuständen  $|A\rangle, |B\rangle \in \{|I_1\rangle, |I_2\rangle, \dots, |I_m\rangle\}$  bilden:

$$\begin{aligned} \langle A | [H, a_q^\dagger a_p] | B \rangle &= \sum_{i_1'} \langle A | a_{i_1'}^\dagger a_p | B \rangle \mathcal{J}^{i_1' q} + \frac{1}{2} \sum_{i_2', i_1', i_1} V^{i_2' i_1', q i_1} \langle A | a_{i_2'}^\dagger a_{i_1'}^\dagger a_{i_1} a_p | B \rangle \\ &\quad - \sum_{i_1} \mathcal{J}^{p i_1} \langle A | a_q^\dagger a_{i_1} | B \rangle - \frac{1}{2} \sum_{i_1', i_1, i_2} V^{p i_1', i_2 i_1} \langle A | a_q^\dagger a_{i_1'}^\dagger a_{i_1} a_{i_2} | B \rangle \end{aligned} \quad (3.4)$$

und annehmen, daß die Zustände  $|A\rangle, |B\rangle, |I\rangle \in \{|I_1\rangle, |I_2\rangle, \dots, |I_m\rangle\}$  als angenäherte Eigenzustände von  $H$  nicht nur die Faktorisierungseigenschaft haben, sondern auch Eigenzustände des „Quasiteilchenoperators“  $h$  sind:

$$h |A\rangle = \Omega_A |A\rangle, \quad (3.5)$$

der bei der Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen  $H$  approximiert. Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen:

$$\begin{aligned} 2(\Omega_A - \Omega_B) \langle A | a_q^\dagger a_p | B \rangle &= \sum_{i_1'} \langle A | a_{i_1'}^\dagger a_p | B \rangle \mathcal{J}^{i_1' q} + \sum_{i_2', i_1', i_1, I} V^{i_2' i_1', q i_1} \langle A | a_{i_2'}^\dagger a_p | I \rangle \langle I | a_{i_1'}^\dagger a_{i_1} | B \rangle \\ &\quad - \sum_{i_1} \mathcal{J}^{p i_1} \langle A | a_q^\dagger a_{i_1} | B \rangle - \sum_{i_1', i_1, i_2, I} V^{p i_1', i_2 i_1} \langle A | a_{i_1'}^\dagger a_{i_1} | I \rangle \langle I | a_q^\dagger a_{i_2} | B \rangle \\ &\quad + \sum_{i_1'} \langle A | a_{i_1'}^\dagger a_p | B \rangle \mathcal{J}^{i_1' q} + \sum_{i_2', i_1', i_1, I} V^{i_2' i_1', q i_1} \langle A | a_{i_1'}^\dagger a_{i_1} | I \rangle \langle I | a_{i_2'}^\dagger a_p | B \rangle \\ &\quad - \sum_{i_1} \mathcal{J}^{p i_1} \langle A | a_q^\dagger a_{i_1} | B \rangle - \sum_{i_1', i_1, i_2, I} V^{p i_1', i_2 i_1} \langle A | a_q^\dagger a_{i_1} | I \rangle \langle I | a_{i_1'}^\dagger a_{i_2} | B \rangle; \\ &\langle A | N | A \rangle = \mathcal{N}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Wir bringen diese Gleichungen in eine übersichtlichere Form durch Einführung der verallgemeinerten Dichtematrix

$$\varrho_{AB}^{ab} = \langle A | a_b^\dagger a_a | B \rangle \quad (3.7)$$

und der verallgemeinerten Hartree-Fock-Matrix

$$\mathcal{H}_{AB}^{ab} = \mathcal{J}^{ab} \delta_{AB} + \sum_{l, l'} V^{al', bl'} \varrho_{AB}^{ll'} : \quad (3.8)$$

$$2(\Omega_A - \Omega_C) \varrho_{AC}^{ac} = \sum_{k, K} (\varrho_{AK}^{ak} \mathcal{H}_{KC}^{kc} - \mathcal{H}_{AK}^{ak} \varrho_{KC}^{kc} + \varrho_{KC}^{ak} \mathcal{H}_{AK}^{kc} - \mathcal{H}_{KC}^{ak} \varrho_{AK}^{kc}); \sum_a \varrho_{AA}^{aa} = \mathcal{N}. \quad (3.6)$$

(3.6) ist ein Gleichungssystem für die verallgemeinerte Dichtematrix ( $\varrho_{AB}^{ab}$ ); die Eigenwerte  $\Omega_A$  des Quasiteilchenoperators  $h$  spielen hier die Rolle von Hilfsgrößen; ihre Bedeutung wird bei der Aufstellung eines Lösungsverfahrens klar. Mit der Dichtematrix liegen alle Matrixelemente von Ein- und Zweiteilchen-Operatoren zwischen den Zuständen  $|I_1\rangle, |I_2\rangle, \dots, |I_m\rangle$  fest; so sind in unserer Hartree-Fock-Näherung die Energien des Vielteilchensystems die Erwartungswerte

$$\begin{aligned} \langle A | H | A \rangle &= \sum_{i_1', i_1} \mathcal{J}^{i_1' i_1} \langle A | a_{1'}^\dagger a_{i_1} | A \rangle + \frac{1}{4} \sum_{i_2', i_1', i_2, i_1} V^{i_2' i_1', i_2 i_1} \langle A | a_{2'}^\dagger a_{1'}^\dagger a_{i_1} a_{i_2} | A \rangle \\ &= \sum_{i_1', i_1} \mathcal{J}^{i_1' i_1} \varrho_{AA}^{i_1 i_1'} + \frac{1}{2} \sum_{i_2', i_1', i_2, i_1, l} V^{i_2' i_1', i_2 i_1} \varrho_{Al}^{i_2 i_2'} \varrho_{lA}^{i_1 i_1'} . \end{aligned} \quad (3.9)$$

Es gibt demnach zwei Möglichkeiten, die Energien des Vielteilchensystems zu berechnen: Gl. (3.5) oder Gleichung (3.9). Da die Eigenwerte  $\Omega_A$  zu Hilfsgrößen erniedrigt worden sind, ist die Konsistenzbeziehung

$$\Omega_A = \langle A | H | A \rangle \quad (3.10)$$

nicht automatisch erfüllt. Daher ist (3.6) durch (3.10) zu ergänzen. Die Lösungen von (3.6) treten paarweise auf, weil mit  $\varrho_{AB}^{ab}$  auch

$$\check{\varrho}_{AB}^{ab} = \varrho_{BA}^{ab} \quad (3.11)$$

eine Lösung ist. Das Gleichungssystem (3.6) hat in  $\check{\varrho}$  die Gestalt

$$-2(\Omega_A - \Omega_C) \check{\varrho}_{AC}^{ac} = \sum_{k, K} (\check{\varrho}_{AK}^{ak} \check{\mathcal{H}}_{KC}^{kc} - \check{\mathcal{H}}_{AK}^{ak} \check{\varrho}_{KC}^{kc} + \check{\varrho}_{KC}^{ak} \check{\mathcal{H}}_{AK}^{kc} - \check{\mathcal{H}}_{KC}^{ak} \check{\varrho}_{AK}^{kc}) ; \quad \sum_a \check{\varrho}_{AA}^{aa} = \mathcal{N} . \quad (3.12)$$

Die beiden Lösungen liefern wegen

$$\sum_{i_1', i_1} \mathcal{J}^{i_1' i_1} \check{\varrho}_{AA}^{i_1 i_1'} + \frac{1}{2} \sum_{i_2', i_1', i_2, i_1, l} V^{i_2' i_1', i_2 i_1} \check{\varrho}_{Al}^{i_2 i_2'} \check{\varrho}_{lA}^{i_1 i_1'} = \sum_{i_1', i_1} \mathcal{J}^{i_1' i_1} \varrho_{AA}^{i_1 i_1'} + \frac{1}{2} \sum_{i_2', i_1', i_2, i_1, l} V^{i_2' i_1', i_2 i_1} \varrho_{Al}^{i_2 i_2'} \varrho_{lA}^{i_1 i_1'} \quad (3.13)$$

dieselben Energieerwartungswerte. Die zweite Lösung  $\check{\varrho}$  scheidet aus, da zu ihr die Eigenwerte  $-\Omega_A$  und die Energieerwartungswerte  $\langle A | H | A \rangle$  gehören, die Konsistenzbeziehung (3.10) also nicht einmal näherungsweise erfüllt ist.

Aus (3.6) folgt eine Orthonormierungsbedingung für die Zwischenzustände:

$$(\Omega_A - \Omega_C) \langle A | N | C \rangle = 0, \quad \text{d. h.} \quad \langle A | N | C \rangle = \mathcal{N} \varrho_{AC} . \quad (3.14)$$

#### 4. Ein Lösungsverfahren für die Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen

##### 4.1 Zwei Arten hermitescher Dichtematrizen

Wir geben in diesem Abschnitt ein Lösungsverfahren für das Gleichungssystem (3.6) an, das als Gleichungssystem für die verallgemeinerte Dichtematrix ( $\varrho_{AB}^{ab}$ ) aufzufassen ist. Ausgangspunkt unserer Überlegungen ist die Beobachtung, daß die verallgemeinerte Dichtematrix auf zwei verschiedene Arten als hermitesche Matrix aufgefaßt werden kann. Aus der Definitionsgleichung (3.7) folgt

$$\varrho_{AB}^{ab} = \varrho_{BA}^{ba}{}^* . \quad (4.1)$$

Wir können hier entweder die übereinander stehenden oder die quer übereinander stehenden Indizes zu einem gemeinsamen Index zusammenfassen; im ersten Fall erhalten wir die Matrix

$$\varrho_{(A)}^{(A)}{}^{(B)} = \varrho_{AB}^{a\bar{r}} , \quad (4.2)$$

und im zweiten die Matrix

$$\varrho_{[A]}^{[A]}{}^{[B]} = \varrho_{BA}^{ab} . \quad (4.3)$$

Offensichtlich sind nach (4.1)

$$\varrho_{(A)}^{(A)}{}^{(B)} = \varrho_{(B)}^{(B)}{}^{(A)}{}^* ; \quad \varrho_{[A]}^{[A]}{}^{[B]} = \varrho_{[B]}^{[B]}{}^{[A]}{}^* . \quad (4.4)$$

Wir benutzen oft eine einfachere Schreibweise:

$$\varrho_{(A)}^{(A)}{}^{(B)} = \varrho_{AB}^{ab} ; \quad \varrho_{[A]}^{[A]}{}^{[B]} = \check{\varrho}_{AB}^{ab} . \quad (4.5)$$

Da die verallgemeinerte Dichtematrix auf zwei Arten als hermitesche Matrix aufgefaßt werden kann, kann sie auch auf zwei Arten durch eine unitäre Matrix diagonalisiert werden:

$$\varrho_{(A)}^{(A)}{}^{(B)} = \sum_{t, T} \mathcal{U}_{AT}^{at} \varrho_D^{(t)} \mathcal{U}_{BT}^{bt}{}^* ; \quad (4.6)$$

$$\varrho_{[A]}^{[A]}{}^{[B]} = \sum_{t, T} \mathcal{V}_{[A]}^{[a]}{}^{[t]} \check{\varrho}_D^{[t]} \mathcal{V}_{[B]}^{[b]}{}^{[T]}{}^* . \quad (4.7)$$

Bei positiv-definiter Norm im Hilbert-Raum sind die Elemente der reellen Diagonalmatrix ( $\varrho_D^{(t)}$ ) nach oben und die Elemente der reellen Diagonalmatrix ( $\check{\varrho}_D^{[t]}$ ) nach unten beschränkt; aus (3.7) und (4.6) folgt

$$\varrho_D^{(t)} = \sum_{\substack{a, A \\ b, B}} \mathcal{U}_{AT}^{at}{}^* \langle A | a_b^\dagger a_a | B \rangle \mathcal{U}_{BT}^{bt} = 1 - \left( \sum_{a, A} \mathcal{U}_{AT}^{at}{}^* \langle A | a_a \rangle \left( \sum_{b, B} \mathcal{U}_{BT}^{bt} a_b^\dagger | B \rangle \right) \right) \leq 1 ; \quad (4.8)$$



aus (3.7) und (4.7) folgt

$$\check{\varrho}_D^{[t]} = \sum_{\substack{a,A \\ b,B}} \mathcal{V}^{[A]} [t]^\times \langle B | a_b^\dagger a_a | A \rangle \mathcal{V}^{[B]} [t] = \left( \sum_{b,B} \mathcal{V}^{[B]} [t] \langle B | a_b^\dagger \right) \left( \sum_{a,A} \mathcal{V}^{[A]} [t]^\times a_a | A \rangle \right) \geq 0. \quad (4.9)$$

Wir bezeichnen  $(\varrho_{AB}^{ab})$  nach (4.6) faktorisiert mit  $(\varrho_{AB}^{ab}(\mathcal{U}, \varrho_D))$  und nach (4.7) faktorisiert mit  $(\varrho_{AB}^{ab}[\mathcal{V}, \check{\varrho}_D])$ .

Nach Gl. (3.8) übertragen sich die Eigenschaften (4.1) bis (4.7) der verallgemeinerten Dichtematrix auf die verallgemeinerte Hartree-Fock-Matrix.

#### 4.2. Die Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen als Variationsproblem

Wir zeigen, daß (3.6) nur als Gleichungssystem für die unitäre Matrix  $\mathcal{U}$  (bzw.  $\mathcal{V}$ ) und nicht für die Diagonalmatrix  $(\varrho_D^{(t)})$  [bzw.  $(\check{\varrho}_D^{[t]})$ ] aufzufassen ist; die Diagonalmatrix  $(\varrho_D^{(t)})$  [bzw.  $(\check{\varrho}_D^{[t]})$ ] wird vielmehr durch Symmetrien und andere Randbedingungen des Vielteilchensystems bestimmt. Dazu formulieren wir die Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen als Variationsproblem. Da aber die verallgemeinerte Dichtematrix auf zwei Arten faktorisiert werden kann, existieren zwei Variationsprobleme.

(I) Zu jedem  $(\varrho_D^{(t)})$  werde ein „kritisches“  $\mathcal{U}$  so bestimmt, daß für die Erwartungswerte (3.9)

$$\mathcal{E}_K(\mathcal{U}, \varrho_D) \equiv \sum_{a',a} \mathcal{T}^{a'a} \varrho_{KK}^{aa'}(\mathcal{U}, \varrho_D) + \frac{1}{2} \sum_{a',a,b',b,I} \mathcal{V}^{a'b',ab} \varrho_{KI}^{aa'}(\mathcal{U}, \varrho_D) \varrho_{IK}^{bb'}(\mathcal{U}, \varrho_D) = \text{Extremum} \quad (4.10)$$

gilt unter den Nebenbedingungen

$$\sum_K \varrho_{KK}^{kk}(\mathcal{U}, \varrho_D) = \mathcal{N}; \quad K = I_1, I_2, \dots, I_m.$$

Die Variationsgleichungen für das Variationsproblem (4.10).

Wir differenzieren den Ausdruck

$$\mathcal{H}_K(\mathcal{U}, \varrho_D) = \mathcal{E}_K(\mathcal{U}, \varrho_D) + \Omega_K^{(1)} [\sum_K \varrho_{KK}^{kk}(\mathcal{U}, \varrho_D) - \mathcal{N}] + \sum_{\substack{p,P \\ q,Q \\ i,T}} \Phi_{KQP}^{qp} (\mathcal{U}_{PT}^{pt} \mathcal{U}_{QT}^{qt} - \delta^{pq} \delta_{PQ}), \quad (4.11)$$

wo

$$\Omega_K^{(1)} \text{ reell; } \Phi_{KQP}^{qp} = \Phi_{KPQ}^{pq}{}^\times \quad (4.12)$$

Lagrange-Multiplikatoren sind, nach den Elementen der unitären Matrix  $\mathcal{U}$ . Die Variationsgleichungen lauten:

$$\begin{aligned} & \left[ \sum_{b,B,K} \frac{\partial \mathcal{H}_K(\mathcal{U}, \varrho_D)}{\partial \mathcal{U}_{CB}^{cb}{}^\times} \mathcal{U}_{AB}^{ab}{}^\times \right]^\times - \sum_{b,B,K} \frac{\partial \mathcal{H}_K(\mathcal{U}, \varrho_D)}{\partial \mathcal{U}_{AB}^{ab}{}^\times} \mathcal{U}_{CB}^{cb}{}^\times \\ & \equiv \sum_{k,K} [\varrho_{AK}^{ak}(\mathcal{U}, \varrho_D) \mathcal{H}_{KC}^{kc}(\mathcal{U}, \varrho_D) - \mathcal{H}_{AK}^{ak}(\mathcal{U}, \varrho_D) \varrho_{KC}^{kc}(\mathcal{U}, \varrho_D)] - (\Omega_A^{(1)} - \Omega_C^{(1)}) \varrho_{AC}^{ac}(\mathcal{U}, \varrho_D) = 0, \end{aligned} \quad (4.13)$$

wobei noch die Nebenbedingungen

$$\sum_K \varrho_{KK}^{kk}(\mathcal{U}, \varrho_D) = \mathcal{N} \quad (4.14)$$

zu erfüllen sind.

Da Lösungsverfahren für die Hartree-Bogoliubov-Theorie bekannt sind, macht die Lösung des Gleichungssystems (4.13), (4.14) keine Schwierigkeiten: Wir bestimmen die kritische unitäre Matrix  $\mathcal{U}$  durch Diagonalisieren der hermiteschen Matrix  $[\mathcal{H}_{AK}^{ak}(\mathcal{U}, \varrho_D) + \delta^{ak} \delta_{AK} \Omega_A^{(1)}]$ :

$$\sum_{k,K} [\mathcal{H}_{AK}^{ak}(\mathcal{U}, \varrho_D) + \delta^{ak} \delta_{AK} \Omega_A^{(1)}] \mathcal{U}_{KB}^{kb} = \mathcal{U}_{AB}^{ab} D^{(b)}, \quad (4.15)$$

wobei die Lagrangeschen Multiplikatoren  $\Omega_A^{(1)}$  so zu wählen sind, daß die Nebenbedingungen (4.14) erfüllt sind.

(II) Zu jedem  $(\check{\varrho}_D^{[t]})$  werde ein „kritisches“  $\mathcal{V}$  so bestimmt, daß für die Erwartungswerte (3.9)

$$\varepsilon_K[\mathcal{V}, \check{\varrho}_D] \equiv \sum_{a', a} \mathcal{T}^{a'a} \varrho_{KK}^{aa'} [\mathcal{V}, \check{\varrho}_D] + \frac{1}{2} \sum_{\substack{a', a, b', b \\ l}} V^{a'b', ab} \varrho_{KI}^{aa'} [\mathcal{V}, \check{\varrho}_D] \varrho_{IK}^{bb'} [\mathcal{V}, \check{\varrho}_D] = \text{Extremum} \quad (4.16)$$

gilt unter den Nebenbedingungen

$$\sum_k \varrho_{KK}^{kk} [\mathcal{V}, \check{\varrho}_D] = \mathcal{N}; \quad K = I_1, I_2, \dots, I_m.$$

Die Variationsgleichungen für das Variationsproblem (4.16).

Wir differenzieren den Ausdruck

$$\mathcal{H}_K[\mathcal{V}, \check{\varrho}_D] = \varepsilon_K[\mathcal{V}, \check{\varrho}_D] + \Omega_K^{(2)} \left( \sum_k \varrho_{KK}^{kk} [\mathcal{V}, \check{\varrho}_D] - \mathcal{N} \right) + \sum_{\substack{p, P \\ q, Q \\ t, T}} \Psi_{KQP}^{qp} (\mathcal{V}^{[p]} [\check{\varrho}_D]^\times \mathcal{V}^{[q]} [\check{\varrho}_D]^\times - \delta^{pq} \delta_{PQ}) , \quad (4.17)$$

wo

$$\Omega_K^{(2)} \text{ reell}; \quad \Psi_{KQP}^{qp} = \Psi_{KQP}^{pq \times} \quad (4.18)$$

Lagrange-Multiplikatoren sind, nach den Elementen der unitären Matrix  $\mathcal{V}$ . Die Variationsgleichungen lauten

$$\left[ \sum_{b, B, K} \frac{\partial \mathcal{H}_K[\mathcal{V}, \check{\varrho}_D]}{\partial \mathcal{V}^{[a]} [\check{\varrho}_D]^\times} \mathcal{V}^{[a]} [\check{\varrho}_D]^\times \right]^\times - \sum_{b, B, K} \frac{\partial \mathcal{H}_K[\mathcal{V}, \check{\varrho}_D]}{\partial \mathcal{V}^{[a]} [\check{\varrho}_D]^\times} \mathcal{V}^{[a]} [\check{\varrho}_D]^\times \quad (4.19)$$

$$\equiv \sum_{k, K} (\varrho_{KK}^{ak} [\mathcal{V}, \check{\varrho}_D] \mathcal{H}_{AK}^{kc} [\mathcal{V}, \check{\varrho}_D] - \mathcal{H}_{KK}^{ak} [\mathcal{V}, \check{\varrho}_D] \varrho_{AK}^{kc} [\mathcal{V}, \check{\varrho}_D]) + (\Omega_A^{(2)} - \Omega_C^{(2)}) \varrho_{AC}^{ac} [\mathcal{V}, \check{\varrho}_D] = 0,$$

wobei noch die Nebenbedingungen  $\sum_k \varrho_{KK}^{kk} [\mathcal{V}, \check{\varrho}_D] = \mathcal{N}$  zu erfüllen sind. (4.20)

Die Lösung des Gleichungssystems (4.19), (4.20) macht keine Schwierigkeiten: Wir bestimmen die kritische unitäre Matrix  $\mathcal{V}$  durch Diagonalisieren der hermiteschen Matrix  $(\mathcal{H}_{AK}^{ak} [\mathcal{V}, \varrho_D] + \delta^{ak} \delta_{AK} \Omega_A^{(2)})$ :

$$\sum_{k, K} (\mathcal{H}_{KA}^{ak} [\mathcal{V}, \check{\varrho}_D] + \delta^{ak} \delta_{AK} \Omega_A^{(2)}) \mathcal{V}^{[k]} [\check{\varrho}_D] = \mathcal{V}^{[a]} [\check{\varrho}_D] \check{\mathcal{D}}^{[a]}, \quad (4.21)$$

wobei die Lagrangeschen Multiplikatoren  $\Omega_A^{(2)}$  so zu wählen sind, daß die Nebenbedingungen (4.20) erfüllt sind.

$$\sum_{t, T} \varrho_D^{(t)} = \sum_{k, K} \varrho_{KK}^{kk} (\mathcal{U}, \varrho_D) = m \mathcal{N} \quad (\text{bzw.} \quad \sum_{t, T} \check{\varrho}_D^{[t]} = \sum_{k, K} \varrho_{KK}^{kk} [\mathcal{V}, \check{\varrho}_D] = m \mathcal{N}) \quad (4.22)$$

ist eine notwendige Bedingung, die Nebenbedingungen zu erfüllen. Wegen (4.22) bleiben  $m-1$  Nebenbedingungen übrig. Da in den Bewegungsgleichungen (4.13) (bzw. 4.19) nur die Differenzen  $\Omega_A^{(1)} - \Omega_C^{(1)}$  (bzw.  $\Omega_A^{(2)} - \Omega_C^{(2)}$ ) der Lagrangeschen Multiplikatoren vorkommen, gibt es genau so viele linear unabhängige Differenzen wie Nebenbedingungen. Daher ist das Gleichungssystem (4.13), (4.14) [bzw. (4.19), (4.20)] widerspruchlos. Da wir die Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen als Variationsproblem formulieren wollen, müssen wir die Äquivalenz der Variationsprobleme (I) und (II) beweisen. Die Äquivalenz wird durch den folgenden Satz gesichert, den wir ohne Beweis angeben:

Zu jedem  $(\varrho_D^{(t)})$  und einem zugehörigen kritischen  $\mathcal{U}$  existiert ein  $(\check{\varrho}_D^{[t]})$  und ein zugehöriges kritisches  $\mathcal{V}$ , so daß

$$(\varrho_{AC}^{ac} [\mathcal{U}, \varrho_D]) = (\varrho_{AC}^{ac} [\mathcal{V}, \check{\varrho}_D]) \quad \text{ist und umgekehrt.}$$

Wenn nun

$$\varrho_{AC}^{ac} = \varrho_{AC}^{ac} (\mathcal{U}, \varrho_D) = \varrho_{AC}^{ac} [\mathcal{V}, \check{\varrho}_D] \quad (4.23)$$

eine gemeinsame Lösung der Gleichungssysteme (4.13), (4.14) und (4.19), (4.20) ist, können wir die Variationsgleichungen (4.13) und (4.19) zu

$$[(\Omega_A^{(1)} - \Omega_C^{(1)}) - (\Omega_A^{(2)} - \Omega_C^{(2)})] \varrho_{AC}^{ac} = \sum_{k, K} (\varrho_{AK}^{ak} \mathcal{H}_{KK}^{kc} - \mathcal{H}_{AK}^{ak} \varrho_{KK}^{kc} + \varrho_{KC}^{ak} \mathcal{H}_{AK}^{kc} - \mathcal{H}_{KC}^{ak} \varrho_{AK}^{kc}) \quad (4.24)$$

addieren. Ein Vergleich mit (3.6) ergibt

$$2(\Omega_A - \Omega_C) = [(\Omega_A^{(1)} - \Omega_C^{(1)}) - (\Omega_A^{(2)} - \Omega_C^{(2)})]. \quad (4.25)$$

Es ist nicht nötig, zur Bestimmung der Lagrangeschen Multiplikatoren  $\Omega_A^{(1)}, \Omega_A^{(2)}$ ;  $A = I_1, I_2, \dots, I_m$ , beide Gleichungssysteme (4.13), (4.14) und (4.19), (4.20) zu lösen. Da eine Lösung  $\varrho_{AC}^{ac}$  nicht nur (4.13), (4.14), sondern auch (4.19), (4.20) befriedigt, ist auch  $\check{\varrho}_{AC}^{ac} = \varrho_{CA}^{ac}$  Lösung dieser beiden Gleichungssysteme:

$$\sum_{k,K} (\check{\varrho}_{AK}^{ak} \check{H}_{KC}^{kc} - \check{H}_{AK}^{ak} \check{\varrho}_{KC}^{kc}) - (\Omega_A^{(2)} - \Omega_C^{(2)}) \check{\varrho}_{AC}^{ac} = 0; \quad \sum_k \check{\varrho}_{KK}^{kk} = \mathcal{N}; \quad (4.26)$$

$$\sum_{k,K} (\check{\varrho}_{KC}^{ak} \check{H}_{AK}^{kc} - \check{H}_{KC}^{ak} \check{\varrho}_{AK}^{kc}) + (\Omega_A^{(1)} - \Omega_C^{(1)}) \check{\varrho}_{AC}^{ac} = 0; \quad \sum_k \check{\varrho}_{KK}^{kk} = \mathcal{N}. \quad (4.27)$$

Diese Feststellung ist verträglich mit dem paarweisen Auftreten der Lösungen von (3.6). Damit haben wir gezeigt, daß das Gleichungssystem (3.6) der Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen durch Berechnung der beiden zusammengehörigen Lösungen  $(\varrho_{AC}^{ac}, \check{\varrho}_{AC}^{ac})$  entweder des Gleichungssystems (4.13), (4.14) oder des Gleichungssystems (4.19), (4.20) gelöst wird. Wenn dabei die Diagonalmatrix  $(\varrho_D^{(t)})$  [bzw.  $(\check{\varrho}_D^{[t]})$ ] so gewählt worden ist, daß die Konsistenzbeziehung  $\Omega_A = \langle A | H | A \rangle$  (3.10) mindestens näherungsweise erfüllt ist, ist  $(\varrho_{AC}^{ac})$  die verallgemeinerte Dichtematrix, während  $(\check{\varrho}_{AC}^{ac})$  als Lösung von (3.6) ausscheidet.

#### 4.3. Die Eigenwerte der hermiteschen Dichtematrizen

Wir haben in Abschnitt 4.2 die zu fest vorgegebenen Diagonalmatrizen  $(\varrho_D^{(t)})$  [bzw.  $(\check{\varrho}_D^{[t]})$ ] gehören den Lösungen des Gleichungssystems (3.6) gesucht. Da wir aber kein Variationsprinzip zur Bestimmung der Eigenwerte  $\varrho_D^{(t)}$  (bzw.  $\check{\varrho}_D^{[t]}$ ) kennen, machen wir den Vorschlag, die Eigenwerte  $\varrho_{0,D}^{(t)}$  (bzw.  $\check{\varrho}_{0,D}^{[t]}$ ) der verallgemeinerten Schalenmodellmatrix  $\varrho_0 = (\varrho_0^{(a)} \varrho_0^{(b)})$  [bzw.  $\check{\varrho}_0 = (\check{\varrho}_0^{[a]} \check{\varrho}_0^{[b]})$ ] zu nehmen. In der gewöhnlichen Hartree-Fock-Theorie z. B. sind sie entweder 0 oder 1. Da sie sich sehr langsam mit der Wechselwirkungsstärke ändern, werden sie die Konsistenzbeziehung  $\Omega_A = \langle A | H | A \rangle$  (3.10) gut erfüllen. Die Lösungen des Gleichungssystems (3.6) sind durch die verallgemeinerte Schalenmodellmatrix nicht eindeutig bestimmt, weil im allgemeinen das Gleichungssystem (4.13), (4.14) Lösungen mit  $\varrho_D^{(t)} = \varrho_{0,D}^{(t)}$ ;  $\check{\varrho}_D^{[t]} \neq \check{\varrho}_{0,D}^{[t]}$  liefert, das Gleichungssystem (4.19), (4.20) Lösungen mit  $\varrho_D^{(t)} \neq \varrho_{0,D}^{(t)}$ ;  $\check{\varrho}_D^{[t]} = \check{\varrho}_{0,D}^{[t]}$ .

#### 4.4. Die Fortschritte gegenüber der „generalized Hartree-Fock approximation (GHFA)“ von Kerman und Klein

GHFA<sup>11</sup> besteht, in unsere Schreibweise übertragen, aus den beiden Bewegungsgleichungen

$$\sum_{k,K} (H_{KA}^{ak} [v] - \delta^{ak} \delta_{AK} \mathcal{E}_A) v_{Kk}^{[k]} = v_{Aa}^{[a]} \check{D}^i; \quad (50^{11*})$$

$$\sum_{k,K} (H_{AK}^{ak} (u) + \delta^{ak} \delta_{AK} \mathcal{E}_A) u_K^{kj} = u_A^{aj} D^j \quad (57^{11})$$

mit

$$H_{KA}^{ak} [v] = \mathcal{T}^{ak} \delta_{KA} + \sum_{l,l'} V^{al',bl} \varrho_{KA}^{ll'} [v]; \quad (51^{11})$$

$$\varrho_{KA}^{ll'} [v] = \sum_i v_{Ai}^{[a]} v_{Kk}^{[k]}; \quad (52^{11})$$

$$\varrho_{AK}^{ll'} (u) = \delta^{ll'} \delta_{AK} - \sum_j u_A^{lj} u_K^{lj*},$$

und den drei Nebenbedingungen

$$\sum_l \varrho_{AK}^{ll} [v] = \mathcal{N} \delta_{AK}; \quad (54^{11})$$

$$\varrho_{AK}^{ll'} [v] = \varrho_{AK}^{ll'} (u); \quad (55^{11})$$

$$\mathcal{E}_A = \langle A | H | A \rangle. \quad (60^{11})$$

Ähnliche Gleichungen sind uns in den Gln. (4.21), (4.15), (3.8), (4.7), (4.6), (4.20), (4.23), (3.10) begegnet. Die Bewegungsgleichungen (50<sup>11</sup>) und (57<sup>11</sup>) weisen gegenüber den Gln. (4.21) und (4.15) einige Mängel auf.

1. Kerman und Klein haben sie durch Einschieben eines vollständigen Satzes von  $(\mathcal{N}-1)$ -Teilchen-Zuständen  $|\mathcal{N}-1, i\rangle$  [bzw.  $(\mathcal{N}+1)$ -Teilchen-Zuständen  $|\mathcal{N}+1, j\rangle$ ] hergeleitet. Daher ist der Wertebereich des Index  $i$  in  $v_{Ai}^{[a]}$  (bzw. des Index

\* Gleichung (50<sup>11</sup>) bedeutet Gl. (50) aus der Arbeit von Kerman und Klein<sup>11</sup>.

$j$  in  $u_A^{aj}$ ) unbestimmt. Das ist nicht der Fall bei der Neuen Tamm-Dancoff-Methode, wo nirgends vorausgesetzt wird, daß die Zwischenzustände einen vollständigen Satz bilden.

2. Kerman und Klein erheben noch die Forderung

$$\Omega_A^{(1)} = -\Omega_A^{(2)} = \mathcal{E}_A,$$

die nach (4.26), (4.27) jede Lösung unmöglich machen kann.

3. Kerman und Klein normieren die Eigenvektoren  $(v_A^{[a]i})_A^a$  [bzw.  $(u_A^{aj})_A^a$ ] nicht auf 1, weil Normierung auf 1 ihre Deutung erschweren würde.

Wir haben den Wertebereich von  $i$  (bzw.  $j$ ) festgelegt:

$$\{i\} = \{[a]\} \quad (\text{bzw. } \{j\} = \{a\}),$$

und gezeigt, daß die ersten fünf Gleichungen von GHFA als Gleichungen für die auf 1 normierten Eigenvektoren aufzufassen sind, und daß die Normierungsfaktoren, d. h. im wesentlichen die Eigenwerte  $\tilde{\varrho}_D^{[i]}$  (bzw.  $\varrho_D^{(j)}$ ) der Dichtematrix, durch die letzten beiden Gleichungen von GHFA nur unvollständig bestimmt sind. Trotzdem darf man nicht, wie Kerman und Klein in (B 11<sup>11</sup>),

$$\tilde{\varrho}_D^{[i]} = \begin{cases} 1 & \text{für } i \leq \mathcal{N}; \\ 0 & \text{für } i > \mathcal{N}, \end{cases}$$

setzen, weil diese Festlegung nicht mit dem Schalenmodell verträglich ist und jede Lösung von (60<sup>11</sup>) unmöglich macht.

Diese hermitesche Formulierung hat es uns sogar ermöglicht, die Gleichheit der Gln. (50<sup>11</sup>) und (57<sup>11</sup>) nachzuweisen und auf die nicht-diagonalen Nebenbedingungen in (54<sup>11</sup>) zu verzichten. Damit haben wir GHFA auf die Gln. (4.21), (4.20) und (3.10) reduziert.

## 5. Anwendung der Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen und von RPA mit Zwischenzuständen auf das Lipkin-Modell

Wir erkennen bereits am exakt lösbaren Lipkin-Modell<sup>17</sup>, daß in gewissen Energiebereichen auch die höheren Näherungen von RPA, d. h. die höheren Näherungen der  $\zeta$ -Funktionen-Methode von Dürr und Wagner<sup>8</sup> und Sawicki<sup>18</sup>, versagen, und daß dieser Mangel durch Einführung zusätzlicher Zwischenzustände behoben wird.

Der Einteilchenraum des Lipkin-Modells besteht aus zwei  $(2j+1)$ -fach entarteten Schalen entgegen-

gesetzter Parität. Wenn man die zugehörigen Erzeugungsoperatoren mit  $a_{k,\sigma}^\dagger$

$$k = 1, \dots, 2j+1; \quad \sigma = -1, -1,$$

bezeichnet, ist

$$H = \varepsilon \tau_0 + \frac{\mathcal{V}}{2} (\tau_+^2 + \tau_-^2) \quad (\mathcal{V} = -|\mathcal{V}|) \quad (5.1)$$

mit

$$\tau_0 = \frac{1}{2}(\eta_+ - \eta_-); \quad \eta_\pm = \sum_{k=1}^{2j+1} a_{k,\pm 1}^\dagger a_{k,\pm 1};$$

$$\tau_+ = \sum_{k=1}^{2j+1} a_{k,+1}^\dagger a_{k,-1}; \quad \tau_- = (\tau_+)^{\dagger},$$

der Hamilton-Operator. Da  $H$  mit dem Gesamtdrehimpulsoperator

$$\vec{\tau}^2 = \frac{1}{2}(\tau_+ \tau_- + \tau_- \tau_+) + \tau_0^2 \quad (5.2)$$

kommutiert, lassen sich die Eigenzustände  $|A\rangle$  von  $H$  nach der Gesamtdrehimpulsquantenzahl  $\mathcal{J}$  klassifizieren:

$$\vec{\tau}^2 |A\rangle = \mathcal{J}(\mathcal{J}+1) |A\rangle. \quad (5.3)$$

Wir besetzen die untere Schale vollständig:

$$\mathcal{N} = 2j+1. \quad (5.4)$$

Dann ist

$$|\Phi_0\rangle = a_{1,-1}^\dagger a_{2,-1}^\dagger \dots a_{\mathcal{N},-1}^\dagger |\text{vacuum}\rangle \quad (5.5)$$

für  $\mathcal{V} = 0$  der Grundzustand von  $H$ .

Wegen 
$$\vec{\tau}^2 |\Phi_0\rangle = \frac{\mathcal{N}}{2} \left( \frac{\mathcal{N}}{2} + 1 \right) |\Phi_0\rangle \quad (5.6)$$

beschränken wir das Eigenwertproblem von  $H$  auf den durch

$$\mathcal{J} = \mathcal{N}/2 \quad (5.7)$$

charakterisierten Unterraum. Für  $\mathcal{V} = 0$  ist

$$|\Phi_1\rangle = (1/\sqrt{\mathcal{N}}) \tau_+ |\Phi_0\rangle \quad (5.8)$$

der niedrigste angeregte Zustand in diesem Unterraum. Die Matrixelemente

$$\begin{aligned} \langle \Phi_0 | \eta_+ | \Phi_0 \rangle &= 0; & \langle \Phi_0 | \eta_- | \Phi_0 \rangle &= \mathcal{N}; \\ \langle \Phi_1 | \eta_+ | \Phi_1 \rangle &= 1; & \langle \Phi_1 | \eta_- | \Phi_1 \rangle &= \mathcal{N}-1; \\ \langle \Phi_0 | \tau_- | \Phi_1 \rangle &= \sqrt{\mathcal{N}}; & \langle \Phi_0 | \tau_+ | \Phi_1 \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (5.9)$$

kommen in der verallgemeinerten Schalenmodell-dichtematrix  $\varrho_0$  vor.

Wir begnügen uns bei der Anwendung der Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen auf das

Lipkin-Modell mit zwei Zwischenzuständen  $|I_1\rangle$ ,  $|I_2\rangle$ .

$|I_1\rangle$  sei der Grundzustand  $|0\rangle$  von  $H$ ,  $|I_2\rangle$  der erste angeregte Zustand  $|1\rangle$ . Sie gehen für  $\mathcal{V}$  gegen 0 in die Zustände  $|\Phi_0\rangle$  und  $|\Phi_1\rangle$  über:

$$|I_1\rangle = |0\rangle \xrightarrow{\mathcal{V} \rightarrow 0} |\Phi_0\rangle; \quad |I_2\rangle = |1\rangle \xrightarrow{\mathcal{V} \rightarrow 0} |\Phi_1\rangle. \quad (5.10)$$

Man kann verlangen, daß ihre Näherungen, ebenso wie die exakten Zustände, entgegengesetzte Parität haben. Folglich gehen aus den Gln. (3.6) und (3.10) die Gleichungen

und

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon}{2} & 0 & 0 & \overline{\mathcal{V}}\langle 0|\tau_+|1\rangle \\ 0 & -\frac{\varepsilon}{2} & \overline{\mathcal{V}}\langle 0|\tau_-|1\rangle & 0 \\ 0 & \overline{\mathcal{V}}\langle 1|\tau_+|0\rangle & \frac{\varepsilon}{2} + (\Omega_1 - \Omega_0) & 0 \\ \overline{\mathcal{V}}\langle 1|\tau_-|0\rangle & 0 & 0 & -\frac{\varepsilon}{2} + (\Omega_1 - \Omega_0) \end{pmatrix} \quad (5.15)$$

sind mit

$$\overline{\mathcal{V}} = \mathcal{V}(\mathcal{N} - 1)/\mathcal{N}.$$

Daher sind beim Lipkin-Modell die Gleichungssysteme (4.13), (4.14) und (4.19), (4.20) identisch.

Unter der Voraussetzung, daß die notwendige Bedingung  $\text{Spur } \varrho = 2\mathcal{N}$  erfüllt ist, bilden die Gln. (5.11), (5.12) ein Gleichungssystem für die unitäre Matrix  $\mathcal{U}$  der Faktorisierung  $\varrho = \mathcal{U} \varrho_D \mathcal{U}^\dagger$ .

Ein zweiter Eigenwert der verallgemeinerten Dichtematrix  $\varrho$  ist durch Gl. (5.13) bestimmt. Daher bleiben zwei Eigenwerte offen. Die Spezifizierung (5.10) legt die Eigenwerte von  $\varrho$  für  $\mathcal{V} = 0$  fest:

$$\varrho_{0,D}^{(1)} = -1; \quad \varrho_{0,D}^{(2)} = \varrho_{0,D}^{(3)} = \mathcal{N}; \quad \varrho_{0,D}^{(4)} = 1. \quad (5.16)$$

Wir benutzen die Eigenwerte (5.16) auch für  $\mathcal{V} \neq 0$ , obwohl wir in diesem Falle auf die Erfüllung der Konsistenzbeziehung (5.13) verzichten. Damit begehen wir keinen großen Fehler:  $\Omega_1 - \Omega_0$  ist als Lagrangescher Multiplikator in einem Gleichungssystem für die unitäre Matrix  $\mathcal{U}$  eine langsam veränderliche Funktion der Eigenwerte, während die Differenz  $\langle 1|H|1\rangle - \langle 0|H|0\rangle$  eine schnell veränderliche Funktion ist. Da man die Eigenwerte (5.16) im physikalisch interessanten Energiebereich höchstens um 1% abändern muß, um die Konsistenzbeziehung (5.13) zu erfüllen, ist  $\Omega_1 - \Omega_0$  die bes-

$$\mathcal{H}\varrho = \varrho\mathcal{H}; \quad (5.11)$$

$$\mathcal{N} = \langle 0|\eta_+ + \eta_-|0\rangle = \langle 1|\eta_+ + \eta_-|1\rangle; \quad (5.12)$$

$$\Omega_1 - \Omega_0 = \langle 1|H|1\rangle - \langle 0|H|0\rangle = \varepsilon(\langle 1|\eta_+|1\rangle - \langle 0|\eta_+|0\rangle) \quad (5.13)$$

hervor, wo

$$\varrho = \begin{pmatrix} \langle 0|\eta_+|0\rangle & 0 & 0 & \langle 0|\tau_-|1\rangle \\ 0 & \langle 0|\eta_-|0\rangle & \langle 0|\tau_+|1\rangle & 0 \\ 0 & \langle 1|\tau_-|0\rangle & \langle 1|\eta_+|1\rangle & 0 \\ \langle 1|\tau_+|0\rangle & 0 & 0 & \langle 1|\eta_-|1\rangle \end{pmatrix} \quad (5.14)$$

sere Näherung für die Energiedifferenz der Zustände  $|0\rangle$ ,  $|1\rangle$ . Daher wird in Abb. 1 die Energiedifferenz der Zustände  $|0\rangle$ ,  $|1\rangle$  durch  $\Omega_1 - \Omega_0$  wiedergegeben.

Mit diesen Ergebnissen gehen wir in RPA mit Zwischenzuständen (2.24) hinein und berechnen die Energiedifferenz des ersten und zweiten angeregten Zustands. Der zweite angeregten Zustand ist durch

$$|B\rangle = |2\rangle \xrightarrow{\mathcal{V} \rightarrow 0} |\Phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\mathcal{N}(\mathcal{N}-1)}} \tau_+^2 |\Phi_0\rangle \quad (5.17)$$

definiert.

Abbildung 1 zeigt, daß schon zwei Zwischenzustände ausreichen, die Energiedifferenzen entscheidend gegenüber der dritten Ordnung der  $\zeta$ -Funktionen-Methode von Dürr und Wagner und Sawicki zu verbessern. Wie bekannt, ist die erste Ordnung ihrer Methode RPA, und wird in dritter Ordnung die 8-Punkt-Funktion faktorisiert. Nach Abb. 2 werden durch die Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen auch die Übergangsmatrixelemente  $\langle 1|\tau_-|0\rangle$  und  $\langle 1|\tau_+|0\rangle$  gegenüber RPA im Deformationsbereich entscheidend verbessert. In Abb. 3 sind die Erwartungswerte  $\langle 0|\eta_+|0\rangle$  und  $\langle 1|\eta_+|1\rangle$  aufgetragen, die sich ebenfalls aus der Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen ergeben.



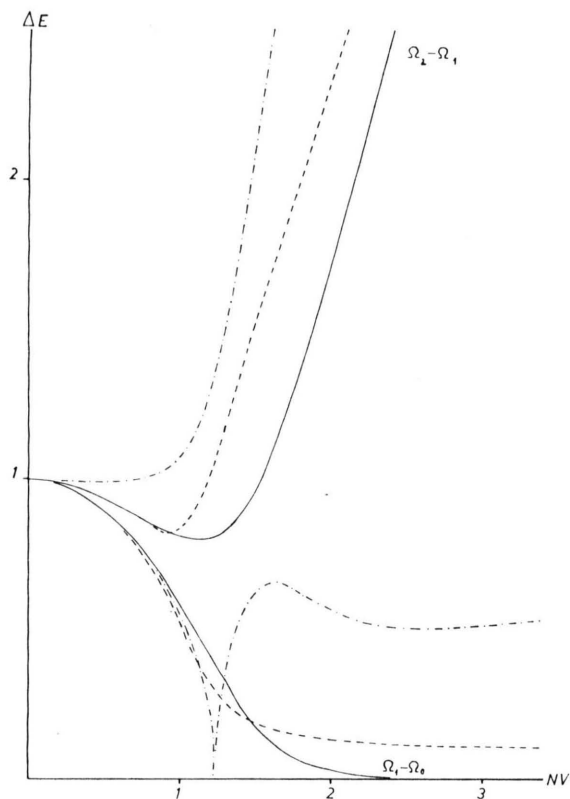


Abb. 1

Abb. 1. Energiedifferenzen der Zustände  $|0\rangle, |1\rangle$ :  $\Omega_1 - \Omega_0$  und der Zustände  $|1\rangle, |2\rangle$ :  $\Omega_2 - \Omega_1$  als Funktionen von  $NV$  bei  $N=20$ . (—) exakte Werte; (---) Hartree-Fock-Theorie mit den Zwischenzuständen  $|0\rangle$  und  $|1\rangle$  und RPA mit den Zwischenzuständen  $|0\rangle$  und  $|1\rangle$ ; (-·-·-) dritte Ordnung der  $\zeta$ -Funktionen-Methode von Dürr und Wagner und Sawicki.

Abb. 2. Die Übergangsmatrixelemente  $\langle 1|\tau_-|0\rangle$  und  $\langle 1|\tau_+|0\rangle$  als Funktionen von  $NV$  bei  $N=20$ . (—) exakte Werte; (---) Hartree-Fock-Theorie mit den Zwischenzuständen  $|0\rangle$  und  $|1\rangle$ ; (-·-·-) RPA.

Abb. 3. Die Erwartungswerte  $\langle 0|\eta_+|0\rangle$  und  $\langle 1|\eta_+|1\rangle$  als Funktionen von  $NV$  bei  $N=20$ . (—) exakte Werte; (---) Hartree-Fock-Theorie mit den Zwischenzuständen  $|0\rangle$  und  $|1\rangle$ .

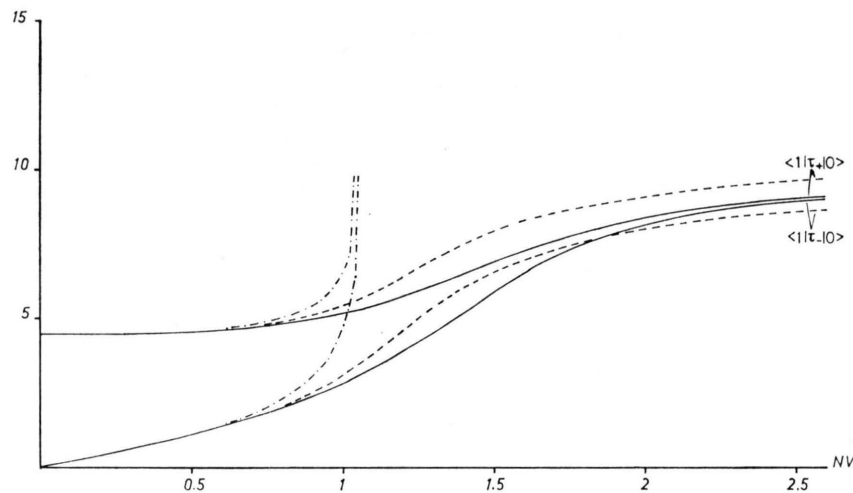


Abb. 2

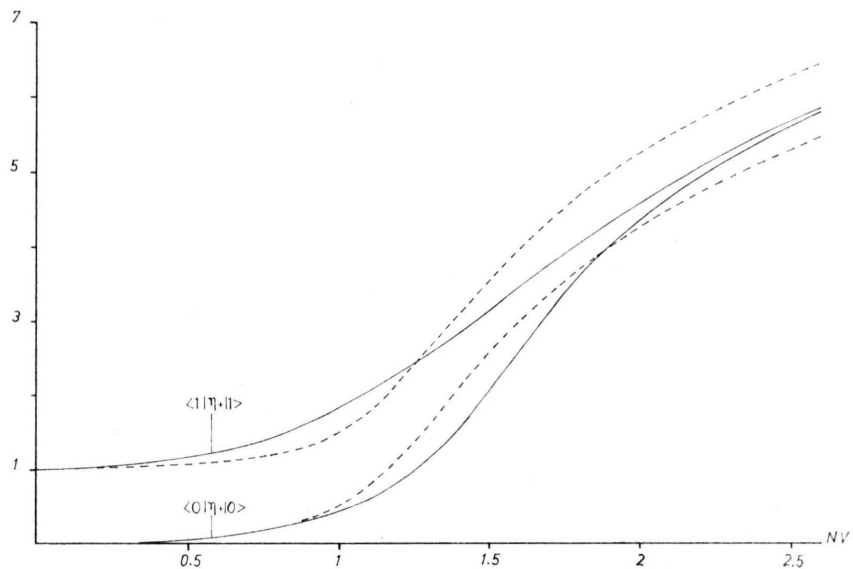


Abb. 3

## 6. Schluß

Die Erweiterung der Neuen Tamm-Dancoff-Methode durch Einführung von Zwischenzuständen führt zu einer Fülle neuer Beziehungen in der relativistischen und nicht-relativistischen Vielteilchentheorie. Wir haben hier nur das nach der Hartree-Fock- und der Hartree-Bogoliubov-Theorie nächst einfache, nicht-relativistische Gleichungssystem untersucht: die Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen. Wir haben sie auf das Lipkin-Modell<sup>17</sup> angewendet, wo sie mit zwei Zwischenzuständen  $|I_1\rangle$ ,  $|I_2\rangle$  und mit den Eigenwerten der verallgemeinerten Schalenmodellmatrix  $\varrho_0$  den Übergang von sphärischer zu deformierter Struktur sehr gut wiedergibt. Ihrer Konzeption nach eignet sie sich besonders zur Berechnung der Rotationsspektren von Kernen.

Die Neue Tamm-Dancoff-Methode mit Zwischenzuständen ist auch für die Heisenbergsche nicht-

lineare Spinortheorie von Nutzen<sup>19</sup>: Die relativistische Version der Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen ermöglicht eine selbstkonsistente Berechnung von Vakuum und Bosonenzuständen. Mit Hilfe der  $\eta$ -Regel (2.9) lassen sich selbstkonsistente Gleichungssysteme, in denen geradzahlige und ungeradzahlige Mehrpunkt-Green-Funktionen, d. h. Bosonen- und Fermionenzustände, gekoppelt sind, aufstellen, mit Hilfe der  $\zeta$ -Regel (2.20) lineare Gleichungssysteme für kompliziertere Zustände. Wir kommen auch dem thermodynamischen Problem der Phasenübergänge näher, wenn wir die Mehrpunkt-Green-Funktionen durch temperaturabhängige ersetzen<sup>20</sup>.

A. Friederich und W. Gerling danken dem Ministerium für Wissenschaft und Forschung des Landes Nordrhein-Westfalen sowie dem Bundesministerium für Forschung und Technologie für die Finanzierung dieser Arbeit.

<sup>1</sup> N. N. Bogoliubov, V. V. Tolmachev u. D. V. Shirkov, A New Method in the Theory of Superconductivity, Consultants Bureau, Inc., New York 1959, pp. 3–19.

<sup>2</sup> M. Baranger, in: Cargèse Lectures in Theoretical Physics 1962, ed. by M. Lévy, W. A. Benjamin, Inc., New York 1963, pp. 61–89.

<sup>3</sup> A. B. Migdal, Nuclear Theory: The Quasiparticle Method, W. A. Benjamin, Inc., New York, Amsterdam 1968, p. 35.

<sup>4</sup> L. P. Gorkov, J. Exp. Theor. Phys. 7, 505 [1958].

<sup>5</sup> W. Brenig u. H. Wagner, Z. Physik 173, 484 [1963].

<sup>6</sup> A. Friederich, Z. Physik 223, 152 [1969].

<sup>7</sup> K. Bleuler, A. Friederich, H. R. Petry u. D. Schütte, in: Quanten und Felder, Vieweg u. Sohn, Braunschweig 1971, pp. 267–277.

<sup>8</sup> H. P. Dürr u. F. Wagner, Nuovo Cim. 46, 223 [1966].

<sup>9</sup> E. Freese, Nuovo Cim. 2, 50 [1955].

<sup>10</sup> P. Kristensen, Dan. Mat. Fys. Medd. 28, no. 12 [1954].

<sup>11</sup> A. K. Kerman u. A. Klein, Phys. Rev. 132, 1326 [1963].

<sup>12</sup> A. K. Kerman u. A. Klein, Phys. Rev. 138 B, 1323 [1965].

<sup>13</sup> A. Klein, L. Calenza u. A. K. Kerman, Phys. Rev. 140 B, 245 [1965].

<sup>14</sup> C. C. J. Roothaan, Rev. Mod. Phys. 32, 179 [1960].

<sup>15</sup> A. Fäßler u. A. Plastino, Z. Physik 220, 88 [1969].

<sup>16</sup> A. Fäßler, K. W. Schmid u. A. Plastino, Nucl. Phys. A 174, 26 [1971].

<sup>17</sup> H. J. Lipkin, N. Meshkov u. A. J. Glick, Nucl. Phys. 62, 188 [1965].

<sup>18</sup> J. Sawicki, Phys. Rev. 126, 2231 [1962].

<sup>19</sup> W. Heisenberg, Einführung in die einheitliche Feldtheorie der Elementarteilchen, Hirzel, Stuttgart 1967, pp. 66–80.

<sup>20</sup> L. P. Kadanoff u. G. Baym, Quantum Statistical Mechanics, W. A. Benjamin, Inc., New York 1962.