

Wick-Regeln mit Zwischenzuständen und die Neue Tamm-Dancoff-Methode mit Zwischenzuständen

A. Friederich und W. Gerling

Institut für Theoretische Kernphysik der Universität Bonn

(Z. Naturforsch. 31 a, 872–886 [1976]; eingegangen am 11. Mai 1976)

*On Wick Rules with Intermediate States and the New Tamm-Dancoff Method
with Intermediate States*

Instead of emphasizing the ground state as is done in Green's function method, we take a finite-dimensional subspace of the Hilbert space: the space of the "intermediate states". A systematic introduction of intermediate states is effected by an extension of the method of generating functionals: we combine the generating functionals of the n -point Green's functions to a "matrix functional" T , and form new matrix functionals, which are matrix functions of T . The aim of this paper is to develop the functional calculus in such a way that the transition from scalar functionals to matrix functionals is straightforward, and the method of obtaining further results becomes clear. Following the lines of Dürr and Wagner we get " η - and ζ -rules with intermediate states". Using them we define a truncation procedure for the equations of motion of the n -point Green's functions, the "New Tamm-Dancoff method with intermediate states". This extension makes it possible to treat the effect of nearby levels in many body systems with Green's functions. In addition to well-known approximations, such as the Hartree-Fock and the Hartree-Bogoliubov theory, the RPA and the quasiparticle RPA, we obtain a series of new approximations. Among these are the "Hartree-Fock theory with intermediate states" and the "random-phase approximation with intermediate states", which we already applied with great success to some exactly soluble models.

1. Einleitung

Die übliche, den Grundzustand auszeichnende Theorie der Green-Funktionen versagt, wenn mehrere Niveaus eines nichtrelativistischen oder relativistischen Vielteilchensystems dicht beieinander liegen oder sogar entartet sind. Um die Wirkungen benachbarter Niveaus von vornherein zu berücksichtigen, setzen wir an die Stelle des Grundzustands einen endlichdimensionalen Unterraum des Hilbert-Raums, den Raum der *Zwischenzustände*^{1,2}. Damit wird, in Analogie zur Erweiterung der Goldstone-Störungstheorie zu einer Störungstheorie für komplexere Spektren (Bloch, Horowitz³ und „folded diagrams“⁴), das Konzept des „Modell-Raums“ auch in die Theorie der Green-Funktionen eingeführt. Zu seiner Verwirklichung im Rahmen der Neuen Tamm-Dancoff-Methode sind erweiterte Wick-Regeln nötig, die Zwischenzustände enthalten. Da die Neue Tamm-Dancoff-Methode den Ausgangspunkt dieser Arbeit bildet, sei ihre Grundidee skizziert^{5,6}: Die Einteilchen-Green-Funktion

$$\langle 0, \mathcal{N} | T \Psi(x) \Psi^\dagger(x') | 0, \mathcal{N} \rangle$$

($|0, \mathcal{N}\rangle$ Grundzustand des \mathcal{N} -Teilchen-Systems, T Zeitordnungsoperator, $\Psi(x)$ Fermi-Feldoperator im Heisenberg-Bild) wird durch die Bewegungsgleichung an die Zweiteilchen-Green-Funktion gekoppelt und diese wiederum an die Dreiteilchen-

Green-Funktion. Bei Fortsetzung dieses Schemas erhält man ein der Schrödinger-Gleichung äquivalentes, gekoppeltes System von Integrodifferentialgleichungen für die Green-Funktionen verschiedener Stufe. Die Näherung, im Sinne der Neuen Tamm-Dancoff-Methode, besteht nun darin, die Green-Funktionen einer bestimmten Stufe durch die Green-Funktionen niedrigerer Stufe auszudrücken, so daß man ein in sich geschlossenes Gleichungssystem für die Green-Funktionen bis zu einer maximalen Stufe erhält. Man steht also vor dem Problem, geeignete Faktorisierungen der Green-Funktionen nicht-relativistischer und relativistischer Vielteilchensysteme zu finden. Im einfachsten Fall, d. h. bei fehlender Wechselwirkung, liefert die Wick-Regel⁷ eine Faktorisierung von Produkten der freien Feldoperatoren. Im Rahmen der Neuen Tamm-Dancoff-Methode werden Verallgemeinerungen dieser Regel angegeben, ohne das Heisenberg-Bild zu verlassen. Allerdings darf man nicht erwarten, daß, wie im freien Fall, die Green-Funktionen exakt in Produkte von Green-Funktionen niedrigerer Stufe zerlegt werden können, sondern es werden im allgemeinen Terme übrigbleiben, die sogenannten η - bzw. ζ -Funktionen⁸. In der Neuen Tamm-Dancoff-Methode werden diese nach einer Faktorisierung übrigbleibenden und die Restkorrelationen beschreibenden Terme ab einer gewissen Stufe vernachlässigt.



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.

Auf diese Weise wurden die Massen einiger Elementarteilchen aus der Heisenbergschen nicht-linearen Spinortheorie berechnet⁹. In der nicht-relativistischen Vielteilchentheorie führen die untersten Ordnungen (Faktorisierung der Zweiteilchen-Green-Funktionen) zur Hartree-Fock- bzw. Random-Phase-Näherung¹⁰. Daran wird auch deutlich, daß die bisherigen in der Neuen Tamm-Dancoff-Methode verwendeten Faktorisierungen der Green-Funktionen nicht ausreichen, da schon die Paarungskräfte nicht einbezogen sind. Es gibt zwei äquivalente Ansätze, sie zu berücksichtigen: die Hartree-Bogoliubov-Theorie¹¹, wo dem \mathcal{N} -Teilchen-Grundzustand Zustände mit anderen Teilchenzahlen beigemischt werden und die Gorkov-Faktorisierung¹², wo in die Faktorisierungsformel für die Zweiteilchen-Green-Funktion die „anormalen“ Green-Funktionen

$$\langle 0, \mathcal{N} + 2 | T \Psi^\dagger(x) \Psi^\dagger(x') | 0, \mathcal{N} \rangle$$

$$\text{und} \quad \langle 0, \mathcal{N} | T \Psi(x) \Psi(x') | 0, \mathcal{N} + 2 \rangle$$

mit hineingenommen werden [$|0, \mathcal{N} + 2\rangle$ Grundzustand des $(\mathcal{N} + 2)$ -Teilchen-Systems]. „Anomale“ Green-Funktionen müssen immer dann berücksichtigt werden, wenn sogenannte „nearby levels“¹³ auftreten.

Ohne die Methode der erzeugenden Funktionale¹⁴ wäre eine systematische Erweiterung der Neuen Tamm-Dancoff-Methode zur *Neuen Tamm-Dancoff-Methode mit Zwischenzuständen* undurchführbar. Daher formulieren wir Beziehungen zwischen den verschiedenen Sätzen von Mehrpunkt-Funktionen, d.h. Wick-Regeln, mit ihren erzeugenden Funktionalen. Dürr und Wagner haben vier unendliche Funktionensätze als Darstellung der Zustandsvektoren eingeführt, die τ - (Mehrpunkt-Green-Funktionen), η -, ζ - und φ -Funktionen⁸. Wir verallgemeinern die Definition der η - und ζ -Funktionen durch Einbeziehen einer beliebigen, aber endlichen Anzahl von Zwischenzuständen (*η - und ζ -Regel mit Zwischenzuständen*). Mit der Methode der erzeugenden Funktionale erfordert das nur einen kleinen Schritt: Man ersetzt in der Arbeit von Dürr und Wagner die erzeugenden Funktionale zwischen dem Grundzustand durch die Matrizen der erzeugenden Funktionale zwischen den Zwischenzuständen. Die Einführung von *Matrixfunktionalen* verlangt jedoch einen Ausbau des Funktionalkalküls. Auf seine Darstellung verzichteten wir bisher^{1,2}, um anhand der wichtigsten Folgerungen („Hartree-Fock-Theorie

mit Zwischenzuständen“ und „RPA mit Zwischenzuständen“) einen Eindruck von der Praktikabilität und Qualität des neuen Verfahrens zu bekommen. Dieses Vorgehen ist mit Nachteilen verbunden:

1. Der Überblick über die Bedeutung des neuen Verfahrens geht verloren.
2. Die η - und ζ -Regel mit Zwischenzuständen, die wir in der ersten Arbeit¹ angegeben haben, lassen sich schwer nachprüfen und handhaben.
3. Die höheren Näherungen werden nicht definiert.

Da auf der Basis des von uns eingeschlagenen Weges noch viele Fortschritte zu erzielen sind, holen wir in dieser Arbeit das Versäumte nach.

Im einzelnen werden wir im 2. Abschnitt auf die Methode der erzeugenden Funktionale eingehen und eine Erweiterung auf Matrixfunktionale vorschlagen, aus der, wie im 3. Abschnitt gezeigt wird, die Erweiterungen der bisherigen Faktorisierungen der Green-Funktionen sich fast zwangsläufig ergeben. Im 4. Abschnitt schließlich werden diese Erweiterungen am Beispiel des nicht-relativistischen Vielfermionen-Problems diskutiert. In Abschnitt 5 diskutieren wir einige zukünftige Anwendungen unseres Verfahrens.

2. Erweiterung des Funktionalkalküls auf Matrixfunktionale

2.1. Skalare Funktionale

Die Idee der Methode der erzeugenden Funktionale ist, Sätze von Mehrpunkt-Funktionen, insbesondere Green-Funktionen, in Funktionalen zusammenzufassen, aus denen sich jede gewünschte Mehrpunkt-Funktion durch einfache Operationen herausziehen läßt. Dazu werden Hilfsfelder $u(x)$, $\bar{u}(x)$ eingeführt, die sich besonders einfach handhaben lassen, andererseits aber einige wesentliche Strukturen der Fermi-Feldoperatoren $\Psi(x)$, $\Psi^\dagger(x)$ aufweisen ($x = (\mathbf{r}, t, \sigma, \tau)$). Die Hilfsfelder u und \bar{u} sollen sich gegenläufig zu den Feldoperatoren Ψ , Ψ^\dagger transformieren und untereinander antikommutieren:

$$\{u(x), u(x')\} = \{\bar{u}(x), \bar{u}(x')\} = \{u(x), \bar{u}(x')\} = 0. \quad (2.1)$$

Der Funktionalraum \mathcal{F} wird als die Menge aller endlichen oder unendlichen Reihen in den Hilfsfeldern u und \bar{u} mit komplexwertigen Koeffizienten

definiert; d. h. jedes Element $A \in \mathcal{F}$ soll darstellbar sein als

$$A = \sum_{k,l=0}^{\infty} \frac{i^{k+l}}{k!l!} \int dx_1 \dots dx_k dx'_1 \dots dx'_l \bar{u}(x_k) \dots \bar{u}(x_1) \cdot u(x'_1) \dots u(x'_l) \alpha^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x'_1, \dots, x'_l) \quad (2.2)$$

mit $\alpha^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x'_1, \dots, x'_l) \in \mathbb{C}$.

Dafür schreiben wir in abkürzender Notation:

$$A = \sum_{k,l=0}^{\infty} \frac{i^{k+l}}{k!l!} \bar{u}_{x_k} \dots \bar{u}_{x_1} u_{x'_1} \dots u_{x'_l} \alpha^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x'_1, \dots, x'_l). \quad (2.2)$$

Wir werden diese Summenkonvention durchweg beibehalten: bei mehrfach vorkommenden Parametern wird immer über den diskreten Anteil summiert und über den kontinuierlichen Anteil integriert.

Folgende Bemerkungen zur Definition des Funktionalraums sind angebracht:

a) Die Frage, ob die u und \bar{u} mit den Fermi-Feldoperatoren antikommutieren, stellt sich nicht, solange als Koeffizienten der Hilfsfelder, wie im vorliegenden Fall, nur komplexe Zahlen vorkommen (die natürlich mit den u und \bar{u} kommutieren sollen⁸).

b) Die einfachsten Funktionale sind die komplexen Zahlen selbst.

c) Da die u und \bar{u} antikommutieren, können die $\alpha^{(k|l)}$ sowohl antisymmetrisch in x_k, \dots, x_1 als auch antisymmetrisch in x'_1, \dots, x'_l angenommen werden.

d) \mathcal{F} besitzt zusätzlich eine Produktstruktur, gegeben durch das assoziative Produkt der u, \bar{u} .

e) Funktionale lassen sich wegen d) auch als Operatoren im Funktionalraum auffassen:

$$A, B \in \mathcal{F}: A(B) = AB \in \mathcal{F}. \quad (2.3)$$

Speziell gilt:

$$u_x(A) = u_x A; \quad \bar{u}_x(A) = \bar{u}_x A. \quad (2.4)$$

Die erzeugenden Funktionale für die Green-Funktionen sind ausgezeichnete Elemente des Funktionalraums \mathcal{F} , da alle anderen Funktionale auf sie bezogen werden:

$$T_{AB} = \sum_{k,l=0}^{\infty} \frac{i^{k+l}}{k!l!} \bar{u}_{x_k} \dots \bar{u}_{x_1} u_{x'_1} \dots u_{x'_l} \langle A | T \Psi(x_k) \dots \Psi(x_1) \Psi^\dagger(x'_1) \dots \Psi^\dagger(x'_l) | B \rangle; \quad (2.5)$$

$|A\rangle, |B\rangle$ Hilbert-Raum-Zustände.

Da in Gl. (2.5) auch eine ungerade Zahl von Fermi-Feldoperatoren Ψ, Ψ^\dagger erlaubt ist, und die Definition der \mathcal{N} -Teilchen-Green-Funktion diesen Fall nicht umfaßt, führt man eine Bezeichnungsweise ein, die sich an der Anzahl der auftretenden Raum-Zeit-Punkte orientiert:

$$\langle A | T \Psi(x_k) \dots \Psi(x_1) \Psi^\dagger(x'_1) \dots \Psi^\dagger(x'_l) | B \rangle \equiv \tau_{AB}^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x'_1, \dots, x'_l) \quad (2.6)$$

heißt $(k+l)$ -Punkt-Green-Funktion [bzw. $(k+l)$ -Punkt- τ -Funktion] bezüglich der Zustände $|A\rangle, |B\rangle$.

Die untersten Terme von Gl. (2.5) lauten explizit:

$$T_{AB} = \langle A | B \rangle + i \int dx_1 \bar{u}(x_1) \langle A | \Psi(x_1) | B \rangle + i \int dx'_1 u(x'_1) \langle A | \Psi^\dagger(x'_1) | B \rangle + \dots \quad (2.5)$$

2.2. Matrixfunktionale

Bisher sind nur erzeugende Funktionale betrachtet worden, deren Koeffizienten skalare Funktionen sind. Wir erweitern jetzt den Funktionalkalkül auf Matrixfunktionale, um Zwischenzustände in die Green-Funktionen-Methode einzuführen. Dazu gehen wir von einem Orthonormalsystem $|I_1\rangle, |I_2\rangle, \dots$ des Hilbert-Raums aus, das keine orthonormale Basis zu sein braucht, und fassen die skalaren Funktionale $T_{I_i I_j}$ in Matrixform zusammen:

$$T = \begin{pmatrix} T_{I_1 I_1} & \dots & T_{I_1 I_r} & \dots \\ \vdots & & \vdots & \\ T_{I_r I_1} & \dots & T_{I_r I_r} & \dots \\ \vdots & & \vdots & \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Da jedes der Funktionale $T_{I_i I_j}$ die Standardform (2.5) besitzt,

kann man genauso gut die $\tau_{I_i I_j}^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x'_1, \dots, x'_l)$ von Gleichung (2.6)

zu einer Matrix $T^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x_1', \dots, x_l')$ zusammenfassen:

$$\mathbf{T}^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x_1', \dots, x_l') = \begin{pmatrix} \tau_{I_1 I_1}^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x_1', \dots, x_l') \dots \tau_{I_1 I_r}^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x_1', \dots, x_l') \dots \\ \vdots \\ \tau_{I_r I_1}^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x_1', \dots, x_l') \dots \tau_{I_r I_r}^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x_1', \dots, x_l') \dots \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (2.8)$$

so daß

$$\mathbf{T} = \sum_{k,l=0}^{\infty} \frac{i^{k+l}}{k! l!} \bar{u}_{x_k} \dots \bar{u}_{x_1} u_{x_1'} \dots u_{x_l'} T^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x_1', \dots, x_l') \quad (2.9)$$

ist. Gleichung (2.9) ist nichts anderes als die Matrixdarstellung der mit den Hilfsfeldern u, \bar{u} zu einem Funktional zusammengefaßten, zeitgeordneten Feldoperatoren bezüglich eines Orthonormalsystems. Diese Darstellung läßt sich verallgemeinern, so daß \mathbf{T} ein ausgezeichnetes Element des Matrix-Funktionalraums $\mathcal{M}(\mathcal{F})$ wird: Der Matrix-Funktionalraum $\mathcal{M}(\mathcal{F})$ wird als die Menge aller endlichen oder unendlichen Reihen in den Hilfsfeldern u und \bar{u} mit Matrixkoeffizienten definiert; d.h. jedes Element $\mathbf{A} \in \mathcal{M}(\mathcal{F})$ soll darstellbar sein als

$$\mathbf{A} = \sum_{k,l=0}^{\infty} \frac{i^{k+l}}{k! l!} \bar{u}_{x_k} \dots \bar{u}_{x_1} u_{x_1'} \dots u_{x_l'} A^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x_1', \dots, x_l') \quad (2.10)$$

mit

$$A^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x_1', \dots, x_l') = \begin{pmatrix} \alpha_{I_1 I_1}^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x_1', \dots, x_l') \dots \alpha_{I_1 I_r}^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x_1', \dots, x_l') \dots \\ \vdots \\ \alpha_{I_r I_1}^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x_1', \dots, x_l') \dots \alpha_{I_r I_r}^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x_1', \dots, x_l') \dots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

und

$$\alpha_{I_i I_j}^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x_1', \dots, x_l') \in \mathbb{C}.$$

Nach Gl. (2.10) kann ein Matrixfunktional auch einen Term ohne u, \bar{u} enthalten ($k=l=0$). Deshalb darf man die Matrix eines Operators bezüglich eines Orthonormalsystems als spezielles Matrixfunktional auffassen. Da es ungünstig ist, alle Zustände des Orthonormalsystems $|I_1\rangle, |I_2\rangle, \dots$ als Zwischenzustände aufzufassen, spielt das zum Projektionsoperator

$$P = \sum_{i=1}^m |I_i\rangle \langle I_i| \quad (0 < m < +\infty) \quad (2.11)$$

gehörende Matrixfunktional

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \langle I_1 | P | I_1 \rangle \dots \langle I_1 | P | I_m \rangle \dots \\ \vdots \\ \langle I_m | P | I_1 \rangle \dots \langle I_m | P | I_m \rangle \dots \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \dots & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \\ 0 & \dots & 1 & 0 & \dots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

eine wichtige Rolle: Es definiert den Raum der Zwischenzustände \mathcal{H}_P im erweiterten Funktionalkalkül.

2.3. Taylor-Entwicklung der Matrixfunktionale

Da die Matrixfunktionale in Form von Potenzreihen definiert worden sind, sollten die Koeffizienten $A^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x_1', \dots, x_l')$, ähnlich wie in der Taylor-Entwicklung einer gewöhnlichen Funktion, als $(k+l)$ -fache Funktionalableitungen darstellbar sein. Dazu werden von den Funktionalableitungen, die wir mit $\delta/\delta u_x \equiv \partial_x$ und $\delta/\delta \bar{u}_x \equiv \bar{\partial}_x$ bezeichnen wollen, die folgenden Eigenschaften gefordert:

- Funktionalableitungen von Ausdrücken, die keine Hilfsfelder enthalten, sollen verschwinden.
- Für die Ableitungen der Hilfsfelder soll gelten:

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta u_x}(u_{x'}) &= \frac{\delta}{\delta \bar{u}_x}(\bar{u}_{x'}) = \delta_{xx'}; \\ \frac{\delta}{\delta u_x}(\bar{u}_{x'}) &= \frac{\delta}{\delta \bar{u}_x}(u_{x'}) = 0, \end{aligned} \quad (2.13)$$

wobei $\delta_{xx'} = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\tau\tau'}$ die Dirac-Funktion bezüglich der kontinuierlichen Parameter und sonst das Kronecker-Symbol darstellt.

c) Die Produktregel soll gelten:

$$\frac{\delta}{\delta v_x}(w_{x'} \mathbf{A}) = \frac{\delta}{\delta v_x}(w_{x'}) \mathbf{A} - w_{x'} \frac{\delta}{\delta v_x}(\mathbf{A}); \quad (2.14)$$

$$v_x, w_x \in \{u_x, \bar{u}_x\}; \quad \mathbf{A} \in \mathcal{M}(\mathcal{F}).$$

Damit ist die Funktionalableitung jedes Funktional eindeutig festgelegt. Mehrfache Ableitungen sind wie üblich definiert:

$$\left(\frac{\delta}{\delta v_x} \frac{\delta}{\delta w_{x'}} \right) (\mathbf{A}) = \frac{\delta}{\delta v_x} \left(\frac{\delta}{\delta w_{x'}} (\mathbf{A}) \right). \quad (2.15)$$

Aus diesen Gleichungen folgt insbesondere, daß die Funktionalableitungen untereinander antikommutieren. Man beweist mit ihnen auch die Gültigkeit von

$$\begin{aligned} \partial_{x_1'} \dots \partial_{x_l'} \bar{\partial}_{x_1} \dots \bar{\partial}_{x_k} (\bar{u}_{y_k} \dots \bar{u}_{y_1} u_{y_1'} \dots u_{y_l'}) \\ = \sum_{i_1, \dots, i_k=1}^k \sum_{j_1, \dots, j_l=1}^l \delta_{i_1, \dots, i_k}^{j_1, \dots, j_l} \delta_{x_1 y_{i_1}} \dots \delta_{x_k y_{i_k}} \delta_{x_1' y_{j_1}'} \dots \delta_{x_l' y_{j_l}'} . \end{aligned} \quad (2.16)$$

Wir haben in Gl. (2.16) das verallgemeinerte Kronecker-Symbol

$$\delta_{j_1, \dots, j_n}^{i_1, \dots, i_n} = \begin{vmatrix} \delta_{i_1 j_1} & \dots & \delta_{i_1 j_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \delta_{i_n j_1} & \dots & \delta_{i_n j_n} \end{vmatrix} \quad (2.17)$$

verwendet. Wir werden später noch „reduzierte“ verallgemeinerte Kronecker-Symbole benötigen, die die Anzahl der Permutationen stark einschränken:

$$\begin{aligned} \delta_{j_1, \dots, j_r, j_{r+1}, \dots, j_{r+s}, j_{r+s+1}, \dots, j_n}^{i_1, \dots, i_r, i_{r+1}, \dots, i_{r+s}, i_{r+s+1}, \dots, i_n} \\ = \delta_{j_1, \dots, j_n}^{i_1, \dots, i_n} \theta(i_{r+s} - i_{r+s-1}) \dots \theta(i_{r+2} - i_{r+1}); \end{aligned} \quad (2.18)$$

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } x > 0; \\ 0 & \text{für } x < 0. \end{cases}$$

Mit Gl. (2.16) läßt sich folgende Taylor-Entwicklung der Matrixfunktionale (2.10) aufstellen:

$$\mathbf{A} = \sum_{k, l=0}^{\infty} \frac{1}{k! l!} \bar{u}_{x_k} \dots \bar{u}_{x_1} u_{x_1'} \dots u_{x_l'} \{ \partial_{x_1'} \dots \partial_{x_l'} \bar{\partial}_{x_1} \dots \bar{\partial}_{x_k} (\mathbf{A}) |_{u=\bar{u}=0} \}. \quad (2.19)$$

Es ist also

$$A^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x_1', \dots, x_l') = \frac{1}{i^{k+l}} \partial_{x_1'} \dots \partial_{x_l'} \bar{\partial}_{x_1} \dots \bar{\partial}_{x_k} (\mathbf{A}) |_{u=\bar{u}=0}, \quad (2.20)$$

wo $\partial_{x_1'} \dots \partial_{x_l'} \bar{\partial}_{x_1} \dots \bar{\partial}_{x_k} (\mathbf{A}) |_{u=\bar{u}=0}$ die $(k+l)$ -fache Funktionalableitung des Funktional \mathbf{A} an der Stelle $u = \bar{u} = 0$ ist. Speziell ist

$$T^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x_1', \dots, x_l') = \frac{1}{i^{k+l}} \partial_{x_1'} \dots \partial_{x_l'} \bar{\partial}_{x_1} \dots \bar{\partial}_{x_k} (\mathbf{T}) |_{u=\bar{u}=0}. \quad (2.21)$$

2.4. Produkte von Matrixfunktionalen

Das Produkt zweier Matrixfunktionale \mathbf{A} und \mathbf{B} ist durch

$$(\mathbf{A} \mathbf{B})_{I_i I_k} = \sum_j \mathbf{A}_{I_i I_j} \mathbf{B}_{I_j I_k} \quad \text{für alle } i \text{ und } k \quad (2.22)$$

definiert. Demnach ist das Produkt zweier oder mehrerer Matrixfunktionale einfach das Produkt der entsprechenden Potenzreihen (2.10), wobei an die Stelle der skalaren Multiplikation der Koeffizienten die Matrizenmultiplikation der Koeffizientenmatrizen tritt. Damit lassen sich auch Funktionen von Matrixfunktionalen definieren: $f(z)$ sei eine Funktion des Parameters z , die sich in die Potenzreihe $f(z) = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu} z^{\nu}$

entwickeln lasse. Dann ist für jedes Matrixfunktional \mathbf{A} , für das die Entwicklung $f(A^{(0|0)}) = \sum_{v=0}^{\infty} a_v (A^{(0|0)})^v$ existiert, $f(\mathbf{A})$ definiert:

$$f(\mathbf{A}) = \sum_{v=0}^{\infty} a_v \mathbf{A}^v = \sum_{v=0}^{\infty} a_v \underbrace{\mathbf{A} \cdots \mathbf{A}}_{v\text{-mal}}. \quad (2.23)$$

Wichtigstes Beispiel ist die Exponentialfunktion $e^{\mathbf{A}} = \sum_{v=0}^{\infty} \frac{1}{v!} \mathbf{A}^v$. $f(\mathbf{A})$ ist wieder ein Matrixfunktional; d.h. es gilt $f(\mathbf{A}) \in \mathcal{M}(\mathcal{F})$. Da die Taylor-Entwicklung (2.19) für beliebige Funktionale aufgestellt worden ist, ist

$$f(\mathbf{A}) = \sum_{k,l=0}^{\infty} \frac{1}{k!l!} \bar{u}_{x_k} \cdots \bar{u}_{x_1} u_{x_1'} \cdots u_{x_l'} \{ \partial_{x_1'} \cdots \partial_{x_l'} \bar{\partial}_{x_1} \cdots \bar{\partial}_{x_k} (f(\mathbf{A}))|_{u=\bar{u}=0} \}. \quad (2.24)$$

Man braucht eine Formel für die $(k+l)$ -fache Funktionalableitung mehrfacher Produkte von Matrixfunktionalen, um die Matrixfunktion in der geschweiften Klammer von Gl. (2.24) berechnen zu können; man findet durch vollständige Induktion den folgenden, grundlegenden Ausdruck:

$$\begin{aligned} \partial_{x_1'} \cdots \partial_{x_l'} \bar{\partial}_{x_1} \cdots \bar{\partial}_{x_k} (\mathbf{A}_1 \cdots \mathbf{A}_n \mathbf{A}_{n+1}) &= \sum_{i_1, \dots, i_k=1}^k \sum_{x_1=0}^k \sum_{x_2=x_1}^k \sum_{x_n=x_{n-1}}^k \sum_{j_1, \dots, j_l=1}^l \sum_{\lambda_1=0}^l \sum_{\lambda_2=\lambda_1}^l \sum_{\lambda_n=\lambda_{n-1}}^l \\ &\cdot \delta_{\overbrace{1, \dots, x_1, x_1+1, \dots, x_2, \dots, x_n+1, \dots, k}^{i_1, \dots, i(x_1), i(x_1+1), \dots, i(x_2), \dots, i(x_n+1), \dots, i_k}} \delta_{\overbrace{1, \dots, \lambda_1, \lambda_1+1, \dots, \lambda_2, \dots, \lambda_n+1, \dots, l}^{j_1, \dots, j(\lambda_1), j(\lambda_1+1), \dots, j(\lambda_2), \dots, j(\lambda_n+1), \dots, j_l}} \\ &\cdot \partial^{(n+1)}(x'_{j_l}) \cdots \partial^{(n+1)}(x'_{j_{\lambda_n+1}}) \cdots \partial^{(1)}(x'_{j_{\lambda_1}}) \cdots \partial^{(1)}(x'_{j_1}) \bar{\partial}^{(1)}(x_{i_1}) \cdots \bar{\partial}^{(1)}(x_{i_{x_1}}) \cdots \bar{\partial}^{(n+1)}(x_{i_{x_n+1}}) \cdots \bar{\partial}^{(n+1)}(x_{i_k}) \\ &\cdot (\mathbf{A}_1 \cdots \mathbf{A}_n \mathbf{A}_{n+1}). \end{aligned} \quad (2.25)$$

$\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_n, \mathbf{A}_{n+1}$ sind beliebige Matrixfunktionale; die mit dem Index r gekennzeichneten Funktionalableitungen $\partial_x^{(r)}$, $\bar{\partial}_x^{(r)}$ wirken nur auf das Matrixfunktional \mathbf{A}_r . Die Ableitungen $\partial_x^{(r)}$, $\bar{\partial}_x^{(r)}$ müssen bei der Berechnung noch bis zum Funktional \mathbf{A}_r durchgezogen werden, was zu zusätzlichen Vorzeichen führt, die von den einzelnen Funktionalen abhängen. Um diese vom Typ der Funktionale abhängigen Vorzeichen zu eliminieren, wurde obige Darstellung gewählt. Man ist damit in der Lage, aus jedem Matrixfunktional auch wenn es aus anderen Matrixfunktionalen zusammengesetzt ist, jeden beliebigen Term herauszuziehen.

Jedes Funktional $\mathbf{A} \in \mathcal{M}(\mathcal{F})$ besteht aus Funktionalen der Stufe (k, l) ; $k, l = 0, 1, 2, \dots$:

$$\mathbf{A} = \sum_{k,l=0}^{\infty} \mathbf{A}^{(k|l)}; \quad \mathbf{A}^{(k|l)} = \frac{i^{k+l}}{k!l!} \bar{u}_{x_k} \cdots \bar{u}_{x_1} u_{x_1'} \cdots u_{x_l'} \mathbf{A}^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x_1', \dots, x_l'). \quad (2.26)$$

Man benutzt nicht immer Gl. (2.25), um aus einem Produkt $\mathbf{A}_1 \cdots \mathbf{A}_n \mathbf{A}_{n+1}$ den Anteil der Stufe (k, l) herauszuziehen; oft genügt schon eine fast triviale Vorstufe dieser Gleichung:

$$(\mathbf{A}_1 \cdots \mathbf{A}_n \mathbf{A}_{n+1})^{(k|l)} = \sum_{p_1, \dots, p_{n+1}=0}^k \sum_{q_1, \dots, q_{n+1}=0}^l \delta_{k, p_1 + \dots + p_{n+1}} \delta_{l, q_1 + \dots + q_{n+1}} \mathbf{A}_1^{(p_1|q_1)} \cdots \mathbf{A}_n^{(p_n|q_n)} \mathbf{A}_{n+1}^{(p_{n+1}|q_{n+1})}. \quad (2.27)$$

3. Wick-Regeln mit Zwischenzuständen

3.1. Bekannte Faktorisierungen

Die in den vorigen Abschnitten entwickelte Technik ermöglicht es, aus den Funktionalen \mathbf{T}_{I, I_j} neue Funktionale zu bilden, die Funktionen der \mathbf{T}_{I, I_j} sind. Die für die Störungstheorie wichtige, gewöhnliche Wick-Regel ist ein Spezialfall. Mit den bisher

bekannten Methoden, wie sie z.B. in der Neuen Tamm-Dancoff-Methode verwandt wurden, kann man jedoch nur Funktionen von skalaren Funktionalen bilden (skalare „Kontraktionen“). In der von uns vorgeschlagenen Erweiterung der Funktionalmethode kommen Funktionen von Matrixfunktionalen hinzu. Dadurch wird der Rahmen für die Konstruktion von Wick-Regeln und damit auch der Neuen Tamm-Dancoff-Methode erheblich erweitert. Zum Vergleich geben wir zunächst die Struktur der bekannten Faktorisierungen⁸ an.

* Aus technischen Gründen wurde in Gl. (2.25) $\partial(x)$ statt ∂_x gesetzt.

Aus den \mathbf{T} -Funktionalen lassen sich \mathbf{Z} -Funktionale nach folgender Gleichung ableiten:

$$\mathbf{Z}_{IJ} = \mathbf{T}_{00}^{-1} \mathbf{T}_{IJ}; \quad (3.1)$$

dabei sind $|I\rangle, |J\rangle$ beliebige Zustände des Hilbert-Raums und $|0\rangle$ der normierte Grundzustand (das physikalische Vakuum) des zu untersuchenden Systems. Das \mathbf{Z}_{IJ} -Funktional erzeugt genau sämtliche „Normalprodukte“ zwischen den Zuständen $|I\rangle, |J\rangle$. Denn aus Gl. (3.1) folgt

$$\mathbf{Z}_{00} = 1, \quad (3.2)$$

was wegen

$$\mathbf{Z}_{IJ} = \langle I | J \rangle + \sum_{\substack{k,l=0 \\ (k,l) \neq (0,0)}}^{\infty} \frac{i^{k+l}}{k! l!} \bar{u}_{x_k} \dots \bar{u}_{x_l} u_{x'_1} \dots u_{x'_l} \cdot \zeta_{IJ}(x_k, \dots, x_l | x'_1, \dots, x'_l) \quad (3.3)$$

gleichbedeutend ist mit dem Verschwinden aller ζ_{00} -Funktionen, die als Grundzustandserwartungswerte aufzufassen sind. Die Umkehrung von Gl. (3.1) $\mathbf{T}_{IJ} = \mathbf{T}_{00} \mathbf{Z}_{IJ}$ gibt die Zerlegung der zeitgeordneten Produkte von Feldoperatoren des Heisenberg-Bildes in ihre Normalprodukte an.

Im freien Fall bzw. im Wechselwirkungsbild gilt darüber hinaus

$$\mathbf{T}_{00} = \exp \{ \mathbf{H}_{00} \} \quad (3.4)$$

mit

$$\mathbf{H}_{00} = -\bar{u}_x u_{x'} \langle 0 | T \Psi(x) \Psi^\dagger(x') | 0 \rangle; \quad (3.5)$$

$|0\rangle$ = ungestörter Grundzustand.

Die Gln. (3.4) und (3.5) besagen nichts anderes, als daß die ungestörten \mathcal{N} -Teilchen-Green-Funktionen als antisymmetrische Produkte der Einteilchen-Green-Funktion dargestellt werden können. Damit lautet die übliche Wick-Regel in funktionaler Form

$$\mathbf{T}_{IJ} = \exp \{ -\bar{u}_x u_{x'} \langle 0 | T \Psi(x) \Psi^\dagger(x') | 0 \rangle \} \mathbf{Z}_{IJ}. \quad (3.6)$$

Da Gl. (3.6) für alle Zustände $|I\rangle, |J\rangle$ gilt, kann man sie auch als Operatorgleichung zwischen zeitgeordneten und normalgeordneten Produkten freier Feldoperatoren schreiben. Man projiziert die Operatorgleichung aus den Taylor-Entwicklungen von \mathbf{T}_{IJ} und $\exp \{ -\bar{u}_x u_{x'} \langle 0 | T \Psi(x) \Psi^\dagger(x') | 0 \rangle \} \mathbf{Z}_{IJ}$ unter Verwendung der Gln. (2.19) und (2.25) heraus:

$$T(\Psi(x_k) \dots \Psi(x_1) \Psi^\dagger(x'_1) \dots \Psi^\dagger(x'_l)) \quad (3.7)$$

$$= \sum_{v=0}^{\min(k,l)} \frac{1}{v!} \sum_{i_1, \dots, i_k=1}^k \sum_{j_1, \dots, j_l=1}^l \delta_{1, \dots, v, v+1, \dots, k}^{i_1, \dots, i_v, i_{v+1}, \dots, i_k} \delta_{1, \dots, v, v+1, \dots, l}^{j_1, \dots, j_v, j_{v+1}, \dots, j_l} \cdot \langle 0 | T \Psi(x_{i_1}) \Psi^\dagger(x'_{j_1}) | 0 \rangle \dots \langle 0 | T \Psi(x_{i_v}) \Psi^\dagger(x'_{j_v}) | 0 \rangle : \Psi(x_{i_{v+1}}) \dots \Psi(x_{i_{k-v}}) \Psi^\dagger(x'_{j_{v+1}}) \dots \Psi^\dagger(x'_{j_l}) :.$$

Gleichung (3.7) ist in der üblichen Schreibweise angegeben; d.h. die Normalordnung ist durch Doppelpunkte angezeigt. Zur Wick-Regel (3.7) sind wir unter der Voraussetzung gelangt, daß Gl. (3.4) vom \mathbf{H}_{00} -Funktional (3.5) erfüllt wird. Bei Wechselwirkung trifft das nicht mehr zu. Gleichung (3.4) ist dann als Definitionsgleichung für ein neues Funktional, das \mathbf{H}_{00} -Funktional, anzusehen. Somit hat man im Heisenberg-Bild die beiden folgenden Faktorisierungsmöglichkeiten der Mehrpunkt-Green-Funktionen:

$$(I) \quad \eta\text{-Regel: } \mathbf{T}_{00} = \exp \{ \mathbf{H}_{00} \}; \quad (3.8)$$

$$(II) \quad \zeta\text{-Regel: } \mathbf{T}_{IJ} = \mathbf{T}_{00} \mathbf{Z}_{IJ}. \quad (3.9)$$

Diese Darstellungen der Mehrpunkt-Green-Funktionen werden zum Ausgangspunkt für Näherungsverfahren genommen.

3.2. Erweiterung der Faktorisierungen durch Zwischenzustände

Die Einführung von Matrixfunktionalen erlaubt es, auch Funktionen dieser Funktionalen zu betrachten, so daß die Erweiterungen der η - und ζ -Regel auf der Hand liegen. Die Zwischenzustände $|I_1\rangle, |I_2\rangle, \dots, |I_m\rangle$ ($0 < m < \infty$), die orthonormiert vorausgesetzt werden, erhalten für die erweiterten Wick-Regeln dieselbe Bedeutung, die zuvor der Grundzustand inne hatte. Zur Vereinfachung der Schreibweise ist es zweckmäßig, den Projektionsoperator P (Gl. (2.11)) und das zugehörige Matrixfunktional \mathbf{P} (Gl. (2.12)) einzuführen. Wir machen folgende Ansätze:

(I) η -Regel mit Zwischenzuständen:

$$\mathbf{P} \mathbf{T} \mathbf{P} = \mathbf{P} e^{\mathbf{P} \mathbf{H} \mathbf{P}} \mathbf{P}. \quad (3.10)$$

(II) ζ -Regel mit Zwischenzuständen:

$$\begin{aligned} \text{a) } \mathbf{PT} &= \mathbf{PTPZ}_P; \\ \text{b) } \mathbf{TP} &= \mathbf{Z}_P\mathbf{PTP}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Auch die erweiterte η - und ζ -Regel ergänzen sich. Aus Gl. (3.11) folgt nämlich, daß die ζ -Regel nur für Übergangsmatrixelemente zwischen \mathcal{H}_P (Raum der Zwischenzustände) und \mathcal{H}_Q (Komplementärraum ($Q = 1 - P$)) eine nichttriviale Gleichung liefert ($\mathbf{PZ}_P\mathbf{P} = \mathbf{P}$), während in der η -Regel (3.10) nur Matrixelemente von \mathcal{H}_P vorkommen. Es sei darauf hingewiesen, daß an keiner Stelle $P \approx 1$ verlangt wird. Außerdem sei erwähnt, daß \mathcal{H}_P ein beliebiger Unterraum des Hilbert-Raums sein kann. Man braucht sich also nicht auf einen Unterraum mit fester Teilchenzahl zu beschränken.

Die Gln. (3.10) und (3.11) sind zunächst Definitionsgleichungen für die Funktionale \mathbf{H}_P und \mathbf{Z}_P , deren Existenz wir jetzt beweisen. Aus \mathbf{PTP} läßt sich der von u, \bar{u} unabhängige Term $\mathbf{PTP}|_{u=\bar{u}=0} = \mathbf{P}$ abspalten:

$$\mathbf{PTP} = \mathbf{P} + \mathbf{PT}'\mathbf{P}, \quad (3.12)$$

so daß der hierdurch definierte Term $\mathbf{PT}'\mathbf{P}$ für $u = \bar{u} = 0$ verschwindet:

$$\mathbf{PT}'\mathbf{P}|_{u=\bar{u}=0} = 0. \quad (3.13)$$

Addiert man zu (3.12) den Projektionsoperator $\mathbf{Q} = \mathbf{1} - \mathbf{P}$, so erhält man den Ausdruck

$$\mathbf{Q} + \mathbf{PTP} = \mathbf{1} + \mathbf{PT}'\mathbf{P}, \quad (3.14)$$

für den die Reihenentwicklungen

$$\tilde{\mathbf{H}}_P = \ln(\mathbf{1} + \mathbf{PT}'\mathbf{P}) = \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{(-1)^{\nu+1}}{\nu} (\mathbf{PT}'\mathbf{P})^{\nu}; \quad (3.15)$$

$$\tilde{\mathbf{T}}_P = (\mathbf{1} + \mathbf{PT}'\mathbf{P})^{-1} = \mathbf{1} + \sum_{\nu=1}^{\infty} (-1)^{\nu} (\mathbf{PT}'\mathbf{P})^{\nu} \quad (3.16)$$

existieren. Aus Gl. (3.15) folgt

$$\tilde{\mathbf{H}}_P = \mathbf{P}\tilde{\mathbf{H}}_P = \tilde{\mathbf{H}}_P\mathbf{P} = \mathbf{P}\tilde{\mathbf{H}}_P\mathbf{P}, \quad (3.17)$$

aus Gl. (3.16)

$$\tilde{\mathbf{T}}_P = \mathbf{P}\tilde{\mathbf{T}}_P\mathbf{P} + \mathbf{Q}. \quad (3.18)$$

Gleichung (3.15) ist die Umkehrung der η -Regel mit Zwischenzuständen, weil

$$\mathbf{P}e^{\mathbf{P}\tilde{\mathbf{H}}_P\mathbf{P}} = \mathbf{P}e^{\tilde{\mathbf{H}}_P} = \mathbf{P}(\mathbf{1} + \mathbf{PT}'\mathbf{P}) = \mathbf{PTP} \text{ ist:}$$

$$\mathbf{H}_P = \tilde{\mathbf{H}}_P. \quad (3.19)$$

Wir zeigen, daß die Gleichung

$$\mathbf{Z}_P = \mathbf{1} - \tilde{\mathbf{T}}_P + \tilde{\mathbf{T}}_P\mathbf{T}\tilde{\mathbf{T}}_P \quad (3.20)$$

die Umkehrung der ζ -Regel ist. Dazu formen wir die rechte Seite von (3.20) um, indem wir $\tilde{\mathbf{T}}_P$ durch $\mathbf{P}\tilde{\mathbf{T}}_P\mathbf{P} + \mathbf{Q}$ ersetzen (Gl. (3.18)) und das Ergebnis mit der aus (3.16) folgenden Gleichung

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}\tilde{\mathbf{T}}_P\mathbf{PTP} = \mathbf{PTP}\tilde{\mathbf{T}}_P\mathbf{P} \quad (3.21)$$

vereinfachen:

$$\begin{aligned} &\mathbf{1} - \tilde{\mathbf{T}}_P + \tilde{\mathbf{T}}_P\mathbf{T}\tilde{\mathbf{T}}_P \\ &= \mathbf{P} + \mathbf{QTQ} + \mathbf{P}\tilde{\mathbf{T}}_P\mathbf{PTQ} + \mathbf{QTP}\tilde{\mathbf{T}}_P\mathbf{P}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Danach hat man nur noch Gl. (3.22) von links (bzw. von rechts) mit \mathbf{PTP} zu multiplizieren, um Gl. (3.11), a) (bzw. (3.11), b)) zu erhalten.

Nach Gl. (3.22) hat das \mathbf{Z}_P -Funktional die Eigenschaften

$$\begin{aligned} \text{a) } \mathbf{PZ}_P\mathbf{P} &= \mathbf{P}; & \text{b) } \mathbf{PZ}_P\mathbf{Q} &= \mathbf{P}\tilde{\mathbf{T}}_P\mathbf{PTQ}; \\ \text{c) } \mathbf{QZ}_P\mathbf{P} &= \mathbf{QTP}\tilde{\mathbf{T}}_P\mathbf{P}; & \text{d) } \mathbf{QZ}_P\mathbf{Q} &= \mathbf{QTQ}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Bei der Anwendung dieser Resultate auf die Bewegungsgleichungen ist es zweckmäßig, von den Umkehrungen (3.19) bzw. (3.23) der η - bzw. ζ -Regel auszugehen, die man auf folgende Gestalt bringt:

$$\mathbf{PH}_P\mathbf{P} = \ln(\mathbf{1} + \mathbf{PT}'\mathbf{P}) \quad (3.24)$$

$$= \mathbf{PT}'\mathbf{P} + \sum_{\nu=2}^{\infty} \frac{(-1)^{\nu+1}}{\nu} (\mathbf{PT}'\mathbf{P})^{\nu};$$

$$\mathbf{PZ}_P = \mathbf{P}\tilde{\mathbf{T}}_P\mathbf{PT} = \mathbf{PT} + \sum_{\nu=1}^{\infty} (-1)^{\nu} (\mathbf{PT}'\mathbf{P})^{\nu}\mathbf{PT};$$

$$\mathbf{Z}_P\mathbf{P} = \mathbf{TP}\tilde{\mathbf{T}}_P\mathbf{P} = \mathbf{TP} + \sum_{\nu=1}^{\infty} (-1)^{\nu}\mathbf{TP}(\mathbf{PT}'\mathbf{P})^{\nu}.$$

Die daraus folgenden Reihendarstellungen

$$\mathbf{PT}'\mathbf{P} = \mathbf{PH}_P\mathbf{P} + \sum_{\nu=2}^{\infty} \frac{(-1)^{\nu}}{\nu} (\mathbf{PT}'\mathbf{P})^{\nu};$$

$$\mathbf{PT} = \mathbf{PZ}_P + \sum_{\nu=1}^{\infty} (-1)^{\nu+1} (\mathbf{PT}'\mathbf{P})^{\nu}\mathbf{PT}; \quad (3.24)$$

$$\mathbf{TP} = \mathbf{Z}_P\mathbf{P} + \sum_{\nu=1}^{\infty} (-1)^{\nu+1}\mathbf{TP}(\mathbf{PT}'\mathbf{P})^{\nu}$$

liefern wieder mit Hilfe von Gl. (2.25) die gewünschten Beziehungen für die Koeffizientenmatrizen. Dabei ist zu beachten, daß $\mathbf{PT}'\mathbf{P}|_{u=\bar{u}=0} = 0$ ist.

(I) η -Regel mit Zwischenzuständen:

$$\begin{aligned}
\mathbf{P} T^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x_1', \dots, x_l') \mathbf{P} &= \mathbf{P} H^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x_1', \dots, x_l') \mathbf{P} + \mathbf{P} \delta_{k0} \delta_{l0} \\
&+ \sum_{n=1}^{k+l-1} \frac{(-1)^{n+1}}{n+1} \sum_{i_1, \dots, i_k=1}^k \sum_{\kappa_1=0}^k \sum_{\kappa_2=\kappa_1}^k \dots \sum_{\kappa_n=\kappa_{n-1}}^k \sum_{j_1, \dots, j_l=1}^l \sum_{\lambda_1=0}^l \sum_{\lambda_2=\lambda_1}^l \dots \sum_{\lambda_n=\lambda_{n-1}}^l \\
&\cdot (-1)^{\sum_{\mu=1}^n (\kappa_\mu - \kappa_{\mu-1} + \lambda_\mu - \lambda_{\mu-1}) (k - \kappa_\mu)} \delta_{1, \dots, \kappa_1, \dots, \kappa_n+1, \dots, k}^{i_1, \dots, i(\kappa_1), \dots, i(\kappa_n+1), \dots, i_k} \delta_{1, \dots, \lambda_1, \dots, \lambda_n+1, \dots, l}^{j_1, \dots, j(\lambda_1), \dots, j(\lambda_n+1), \dots, j_l} \\
&\cdot \mathbf{P} T^{(\kappa_1|\lambda_1)}(x_{i(\kappa_1)}, \dots, x_{i_1} | x'_{j_1}, \dots, x'_{j(\lambda_1)}) \mathbf{P} (1 - \delta_{\kappa_1, 0} \delta_{\lambda_1, 0}) \\
&\cdot \mathbf{P} T^{(\kappa_2 - \kappa_1 | \lambda_2 - \lambda_1)}(x_{i(\kappa_2)}, \dots, x_{i(\kappa_1+1)} | x'_{j(\lambda_1+1)}, \dots, x'_{j(\lambda_2)}) \mathbf{P} (1 - \delta_{\kappa_2 - \kappa_1, 0} \delta_{\lambda_2 - \lambda_1, 0}) \\
&\vdots \\
&\cdot \mathbf{P} T^{(\kappa_n - \kappa_{n-1} | \lambda_n - \lambda_{n-1})}(x_{i(\kappa_n)}, \dots, x_{i(\kappa_{n-1}+1)} | x'_{j(\lambda_{n-1}+1)}, \dots, x'_{j(\lambda_n)}) \mathbf{P} (1 - \delta_{\kappa_n - \kappa_{n-1}, 0} \delta_{\lambda_n - \lambda_{n-1}, 0}) \\
&\cdot \mathbf{P} T^{(k - \kappa_n | l - \lambda_n)}(x_{i_k}, \dots, x_{i(\kappa_n+1)} | x'_{j(\lambda_n+1)}, \dots, x'_{j_l}) \mathbf{P} (1 - \delta_{k - \kappa_n, 0} \delta_{l - \lambda_n, 0}).
\end{aligned} \tag{3.25}$$

Die Anzahl der Summanden bei festem n und festem $i_1, \dots, i_k, j_1, \dots, j_l$ ist durch die Formel

$$\begin{aligned}
&\sum_{\kappa_1=0}^k \sum_{\kappa_2=\kappa_1}^k \dots \sum_{\kappa_n=\kappa_{n-1}}^k \sum_{\lambda_1=0}^l \sum_{\lambda_2=\lambda_1}^l \dots \sum_{\lambda_n=\lambda_{n-1}}^l (1 - \delta_{\kappa_1, 0} \delta_{\lambda_1, 0}) (1 - \delta_{\kappa_2 - \kappa_1, 0} \delta_{\lambda_2 - \lambda_1, 0}) \\
&\dots (1 - \delta_{\kappa_n - \kappa_{n-1}, 0} \delta_{\lambda_n - \lambda_{n-1}, 0}) (1 - \delta_{k - \kappa_n, 0} \delta_{l - \lambda_n, 0}) = \sum_{\mu=0}^n \binom{k+\mu}{\mu} \binom{l+\mu}{\mu} \binom{n+1}{n-\mu} (-1)^{n-\mu}
\end{aligned} \tag{3.26}$$

gegeben.

(II) ζ -Regel mit Zwischenzuständen:

$$\begin{aligned}
\mathbf{P} T^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x_1', \dots, x_l') &= \mathbf{P} Z_P^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x_1', \dots, x_l') \\
&+ \sum_{n=1}^{k+l-1} (-1)^{n+1} \sum_{i_1, \dots, i_k=1}^k \sum_{\kappa_1=0}^k \sum_{\kappa_2=\kappa_1}^k \dots \sum_{\kappa_n=\kappa_{n-1}}^k \sum_{j_1, \dots, j_l=1}^l \sum_{\lambda_1=0}^l \sum_{\lambda_2=\lambda_1}^l \dots \sum_{\lambda_n=\lambda_{n-1}}^l \\
&\cdot (-1)^{\sum_{\mu=1}^n (\kappa_\mu - \kappa_{\mu-1} + \lambda_\mu - \lambda_{\mu-1}) (k - \kappa_\mu)} \delta_{1, \dots, \kappa_1, \dots, \kappa_n+1, \dots, k}^{i_1, \dots, i(\kappa_1), \dots, i(\kappa_n+1), \dots, i_k} \delta_{1, \dots, \lambda_1, \dots, \lambda_n+1, \dots, l}^{j_1, \dots, j(\lambda_1), \dots, j(\lambda_n+1), \dots, j_l} \\
&\cdot \mathbf{P} T^{(\kappa_1|\lambda_1)}(x_{i(\kappa_1)}, \dots, x_{i_1} | x'_{j_1}, \dots, x'_{j(\lambda_1)}) \mathbf{P} (1 - \delta_{\kappa_1, 0} \delta_{\lambda_1, 0}) \\
&\cdot \mathbf{P} T^{(\kappa_2 - \kappa_1 | \lambda_2 - \lambda_1)}(x_{i(\kappa_2)}, \dots, x_{i(\kappa_1+1)} | x'_{j(\lambda_1+1)}, \dots, x'_{j(\lambda_2)}) \mathbf{P} (1 - \delta_{\kappa_2 - \kappa_1, 0} \delta_{\lambda_2 - \lambda_1, 0}) \\
&\vdots \\
&\cdot \mathbf{P} T^{(\kappa_n - \kappa_{n-1} | \lambda_n - \lambda_{n-1})}(x_{i(\kappa_n)}, \dots, x_{i(\kappa_{n-1}+1)} | x'_{j(\lambda_{n-1}+1)}, \dots, x'_{j(\lambda_n)}) \mathbf{P} (1 - \delta_{\kappa_n - \kappa_{n-1}, 0} \delta_{\lambda_n - \lambda_{n-1}, 0}) \\
&\cdot \mathbf{P} T^{(k - \kappa_n | l - \lambda_n)}(x_{i_k}, \dots, x_{i(\kappa_n+1)} | x'_{j(\lambda_n+1)}, \dots, x'_{j_l}).
\end{aligned} \tag{3.27}$$

Das Vorzeichen

$$(-1)^{\sum_{\mu=1}^n (\kappa_\mu - \kappa_{\mu-1} + \lambda_\mu - \lambda_{\mu-1}) (k - \kappa_\mu)} \quad (\kappa_0 = \lambda_0 = 0) \tag{3.28}$$

in (3.25) und (3.27) entsteht durch Umordnen der Funktionalableitungen des Ausdrucks (2.25). Für $P = |0\rangle\langle 0|$ gehen die Gln. (3.25) und (3.27) in die von Dürr und Wagner angegebenen Gleichungen über⁸.3.3. Die η -Regel mit Zwischenzuständen für den Fall $(k, l) = (3, 1)$

Wir geben die η -Regel mit Zwischenzuständen für die Vierpunkt-Green-Funktionen mit $(k, l) = (3, 1)$ an, um die Ergebnisse des Abschnitts 3.2 zu verdeutlichen und einen Eindruck vom Ausmaß der Verallgemeinerung zu vermitteln:

$$\begin{aligned}
\mathbf{P} T^{(3|1)}(x_3, x_2, x_1 | x_1') \mathbf{P} &= \mathbf{P} H_P^{(3|1)}(x_3, x_2, x_1 | x_1') \mathbf{P} \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{i_1, i_2, i_3=1}^3 [-\delta_{1, 2, 3}^{i_1, i_2, i_3} \mathbf{P} T^{(0|1)}(x_1') \mathbf{P} T^{(3|0)}(x_{i_3}, x_{i_2}, x_{i_1}) \mathbf{P} + \delta_{1, 2, 3}^{i_1, i_2, i_3} \mathbf{P} T^{(3|0)}(x_{i_3}, x_{i_2}, x_{i_1}) \mathbf{P} T^{(0|1)}(x_1') \mathbf{P} \\
&+ \delta_{1, 2, 3}^{i_1, i_2, i_3} \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_1}) \mathbf{P} T^{(2|1)}(x_{i_3}, x_{i_2} | x_1') \mathbf{P} - \delta_{1, 2, 3}^{i_1, i_2, i_3} \mathbf{P} T^{(2|1)}(x_{i_3}, x_{i_2} | x_1') \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_1}) \mathbf{P} \\
&+ \delta_{1, 2, 3}^{i_1, i_2, i_3} \mathbf{P} T^{(1|1)}(x_{i_1} | x_1') \mathbf{P} T^{(2|0)}(x_{i_3}, x_{i_2}) \mathbf{P} + \delta_{1, 2, 3}^{i_1, i_2, i_3} \mathbf{P} T^{(2|0)}(x_{i_3}, x_{i_2}) \mathbf{P} T^{(1|1)}(x_{i_1} | x_1') \mathbf{P}] \\
&- \frac{1}{3} \sum_{i_1, i_2, i_3=1}^3 [-\delta_{1, 2, 3}^{i_1, i_2, i_3} \mathbf{P} T^{(1|1)}(x_{i_1} | x_1') \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_2}) \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_3}) \mathbf{P} \\
&+ \delta_{1, 2, 3}^{i_1, i_2, i_3} \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_1}) \mathbf{P} T^{(1|1)}(x_{i_2} | x_1') \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_3}) \mathbf{P} - \delta_{1, 2, 3}^{i_1, i_2, i_3} \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_1}) \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_2}) \mathbf{P} T^{(1|1)}(x_{i_3} | x_1') \mathbf{P} \\
&- \delta_{1, 2, 3}^{i_1, i_2, i_3} \mathbf{P} T^{(0|1)}(x_1') \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_1}) \mathbf{P} T^{(2|0)}(x_{i_3}, x_{i_2}) \mathbf{P} - \delta_{1, 2, 3}^{i_1, i_2, i_3} \mathbf{P} T^{(0|1)}(x_1') \mathbf{P} T^{(2|0)}(x_{i_2}, x_{i_1}) \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_3}) \mathbf{P} \\
&+ \delta_{1, 2, 3}^{i_1, i_2, i_3} \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_1}) \mathbf{P} T^{(0|1)}(x_1') \mathbf{P} T^{(2|0)}(x_{i_3}, x_{i_2}) \mathbf{P} - \delta_{1, 2, 3}^{i_1, i_2, i_3} \mathbf{P} T^{(2|0)}(x_{i_3}, x_{i_2}) \mathbf{P} T^{(0|1)}(x_1') \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_3}) \mathbf{P} \\
&+ \delta_{1, 2, 3}^{i_1, i_2, i_3} \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_1}) \mathbf{P} T^{(2|0)}(x_{i_3}, x_{i_2}) \mathbf{P} T^{(0|1)}(x_1') \mathbf{P} + \delta_{1, 2, 3}^{i_1, i_2, i_3} \mathbf{P} T^{(2|0)}(x_{i_2}, x_{i_1}) \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_3}) \mathbf{P} T^{(0|1)}(x_1') \mathbf{P}] \\
&+ \frac{1}{4} \sum_{i_1, i_2, i_3=1}^3 \delta_{1, 2, 3}^{i_1, i_2, i_3} [\mathbf{P} T^{(0|1)}(x_1') \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_1}) \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_2}) \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_3}) \mathbf{P} \\
&- \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_1}) \mathbf{P} T^{(0|1)}(x_1') \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_2}) \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_3}) \mathbf{P} + \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_1}) \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_2}) \mathbf{P} T^{(0|1)}(x_1') \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_3}) \mathbf{P} \\
&- \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_1}) \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_2}) \mathbf{P} T^{(1|0)}(x_{i_3}) \mathbf{P} T^{(0|1)}(x_1') \mathbf{P}] .
\end{aligned}$$

Unterscheidet man „Bose-artige“ oder „Fermi-artige“ Anregungszustände, je nachdem die angeregten Zustände durch geradzahlige oder ungeradzahlige Produkte von Feldoperatoren aus einem Referenzzustand erzeugt werden, so verschwinden alle ungeraden Kontraktionen

$$\mathbf{P} T^{(k|l)}(x_k, \dots, x_l | x_1', \dots, x_l') \mathbf{P}$$

($k+l$ ungerade) nur dann nicht, wenn der Unter-raum \mathcal{H}_P sowohl „bosonische“ als auch „fermionische“ Anregungszustände enthält. Für die nicht-relativistische Vielteilchentheorie bedeutet das, daß \mathcal{H}_P Zustände mit geraden und ungeraden Teilchenzahldifferenzen enthalten muß. Man wird allerdings bestrebt sein, die Dimension von \mathcal{H}_P möglichst klein zu halten, damit die Zahl der Terme nicht zu groß wird. Man beschränkt sich daher meistens auf gerade Kontraktionen; d.h. \mathcal{H}_P enthält entweder nur Zustände mit gerader Teilchenzahl oder mit ungerader Teilchenzahl. Mit dieser Einschränkung nimmt Gl. (3.29) die Form

$$\begin{aligned}
\mathbf{P} T^{(3|1)}(x_3, x_2, x_1 | x_1') \mathbf{P} &= \mathbf{P} H_P^{(3|1)}(x_3, x_2, x_1 | x_1') \mathbf{P} \\
&= \frac{1}{2} \sum_{i_1, i_2, i_3=1}^3 [\delta_{1, 2, 3}^{i_1, i_2, i_3} \mathbf{P} T^{(1|1)}(x_{i_1} | x_1') \mathbf{P} T^{(2|0)}(x_{i_3}, x_{i_2}) \mathbf{P} \\
&+ \delta_{1, 2, 3}^{i_1, i_2, i_3} \mathbf{P} T^{(2|0)}(x_{i_3}, x_{i_2}) \mathbf{P} T^{(1|1)}(x_{i_1} | x_1') \mathbf{P}] \quad (3.30)
\end{aligned}$$

an. Wenn man in (3.30)

$$P = |0, \mathcal{N}\rangle \langle 0, \mathcal{N}| + |0, \mathcal{N}+2\rangle \langle 0, \mathcal{N}+2|$$

setzt und die Vierpunkt- η -Funktion vernachlässigt, erhält man eine symmetrisierte Form der Gorkov-Faktorisierung¹⁵ von

$$\langle 0, \mathcal{N} | T \Psi(x_3) \Psi(x_2) \Psi(x_1) \Psi^\dagger(x_1') | 0, \mathcal{N}+2 \rangle .$$

4. Anwendungen der Neuen Tamm-Dancoff-Methode mit Zwischenzuständen auf das nicht-relativistische Vielteilchenproblem

4.1. Die Bewegungsgleichung für das erzeugende Funktional der Mehrpunkt-Green-Funktionen

Bisher wurde auf die Dynamik kein Bezug genommen. Die Gültigkeit der in Abschnitt 3 entwickelten Wick-Regeln erstreckt sich deshalb auf nicht-relativistische wie auch relativistische Vielteilchensysteme, allerdings nur bei Fermionen. Obgleich sich Bosonen, wenigstens formal, leicht in diesen Formalismus einbeziehen lassen, verzichten wir an dieser Stelle auf eine solche Ergänzung und betrachten die Konsequenzen unserer Erweiterung für die Neue Tamm-Dancoff-Methode. Wir beschränken uns auf nicht-relativistische Vielteilchensysteme, weil einerseits die Bewegungsgleichungen als bekannt vorausgesetzt werden können, und andererseits die untersten Ordnungen der Neuen Tamm-Dancoff-Methode auf so bekannte Näherungsverfahren wie die Hartree-Fock-Theorie und die RPA führten. Deshalb sind Erweiterungen dieses Näherungsverfahrens von besonderem Interesse,

zumal sich das allgemeine Schema der Neuen Tamm-Dancoff-Methode nicht ändert, die Güte der Näherung aber nicht nur durch den Übergang zu höheren Ordnungen, sondern auch durch die Wahl geeigneter Zwischenzustände beeinflusst werden kann.

In der Green-Funktionen-Methode liegt das Hauptgewicht weniger auf der Bestimmung der

Wellenfunktion eines Vielteilchensystems als vielmehr auf der Berechnung von Matrixelementen. Ausgangspunkt sind daher die Bewegungsgleichungen für die Fermi-Feldoperatoren:

$$i \frac{\partial \Psi(x)}{\partial t} = [\Psi(x), H]; \quad i \frac{\partial \Psi^\dagger(x')}{\partial t'} = [\Psi^\dagger(x'), H]. \quad (4.1)$$

Aus den beiden Gln. (4.1) folgen die Bewegungsgleichungen für die zeitgeordneten Produkte der Feldoperatoren:

$$i \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \dots + \frac{\partial}{\partial t_k} + \frac{\partial}{\partial t'_1} + \dots + \frac{\partial}{\partial t'_l} \right) T(\Psi(x_k) \dots \Psi(x_1) \Psi^\dagger(x'_1) \dots \Psi^\dagger(x'_l)) \\ = [T(\Psi(x_k) \dots \Psi(x_1) \Psi^\dagger(x'_1) \dots \Psi^\dagger(x'_l)), H], \quad (4.2)$$

und daraus, nach Erweiterung mit den Hilfsfeldern u, \bar{u} und nach Integration bzw. Summation, die äquivalente Funktionalgleichung

$$\sum_{k,l=0}^{\infty} \frac{i^{k+l}}{k!l!} \bar{u}_{x_k} \dots \bar{u}_{x_1} u_{x'_1} \dots u_{x'_l} i \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \dots + \frac{\partial}{\partial t_k} + \frac{\partial}{\partial t'_1} + \dots + \frac{\partial}{\partial t'_l} \right) \\ \cdot \langle I | T \Psi(x_k) \dots \Psi(x_1) \Psi^\dagger(x'_1) \dots \Psi^\dagger(x'_l) | J \rangle \\ = \sum_{k,l=0}^{\infty} \frac{i^{k+l}}{k!l!} \bar{u}_{x_k} \dots \bar{u}_{x_1} u_{x'_1} \dots u_{x'_l} \langle I | [T(\Psi(x_k) \dots \Psi(x_1) \Psi^\dagger(x'_1) \dots \Psi^\dagger(x'_l)), H) | J \rangle \quad (4.3)$$

für beliebige Vielteilchenzustände $|I\rangle, |J\rangle$.

Nun erlaubt es der Funktionalalkül globalen Observablen des Hilbert-Raums funktionale Observable zuzuordnen^{14, 16, 17}. Für Gl. (4.3) bedeutet das, daß es Funktionaloperatoren \mathfrak{P}_0 und \mathfrak{S} gibt mit

$$\mathfrak{P}_0(\mathbf{T}_{IJ}) = \sum_{k,l=0}^{\infty} \frac{i^{k+l}}{k!l!} \bar{u}_{x_k} \dots \bar{u}_{x_1} u_{x'_1} \dots u_{x'_l} i \left(\frac{\partial}{\partial t_1} + \dots + \frac{\partial}{\partial t_k} + \frac{\partial}{\partial t'_1} + \dots + \frac{\partial}{\partial t'_l} \right) \\ \cdot \langle I | T \Psi(x_k) \dots \Psi(x_1) \Psi^\dagger(x'_1) \dots \Psi^\dagger(x'_l) | J \rangle; \quad (4.4)$$

$$\mathfrak{S}(\mathbf{T}_{IJ}) = \sum_{k,l=0}^{\infty} \frac{i^{k+l}}{k!l!} \bar{u}_{x_k} \dots \bar{u}_{x_1} u_{x'_1} \dots u_{x'_l} \langle I | [T(\Psi(x_k) \dots \Psi(x_1) \Psi^\dagger(x'_1) \dots \Psi^\dagger(x'_l)), H) | J \rangle. \quad (4.5)$$

In diesen Operatoren nimmt das gekoppelte System der Integrodifferentialgleichungen für die Mehrpunkt-Green-Funktionen die Kurzform

$$\mathfrak{P}_0(\mathbf{T}_{IJ}) = \mathfrak{S}(\mathbf{T}_{IJ}) \quad (4.6)$$

an.

Während \mathfrak{P}_0 durch

$$\mathfrak{P}_0 = i \delta_{x'x} (\bar{u}_{x'} \bar{\partial}_x - u_x \partial_{x'}) \quad (4.7)$$

gegeben ist, wobei

$$\delta_{x'x} = \frac{\partial}{\partial t'} (\delta_{x'x}) = \frac{\partial}{\partial t'} \\ \cdot (\delta^{(3)}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \delta(t' - t) \delta_{\sigma'\sigma} \delta_{\tau'\tau}) \quad (4.8)$$

ist, geht in \mathfrak{S} die explizite Form der Bewegungsgleichungen ein. Für nicht-relativistische Vielteil-

chensysteme haben die Bewegungsgleichungen (4.1) die Gestalt:

$$i \frac{\partial \Psi(x')}{\partial t'} = t_{x'x} \Psi(x) + \frac{1}{2} v_{x'y',xy} \Psi^\dagger(y') \Psi(y) \Psi(x); \quad (4.9)$$

$$- i \frac{\partial \Psi^\dagger(x)}{\partial t} = t_{xx'} \Psi^\dagger(x') \\ + \frac{1}{2} v_{x'y',xy} \Psi^\dagger(x') \Psi^\dagger(y') \Psi(y),$$

mit

$$t_{x'x} = - \frac{1}{2m} \Delta_{\mathbf{r}'} (\delta_{x'x}); \quad (4.10)$$

$$v_{x_1'x_2',x_1x_2} = V(\mathbf{r}'_1, \sigma'_1, \tau'_1, \mathbf{r}'_2, \sigma'_2, \tau'_2; \mathbf{r}_1, \sigma_1, \tau_1, \mathbf{r}_2, \sigma_2, \tau_2) \\ \cdot \delta(t'_1 - t'_2) \delta(t'_2 - t_1) \delta(t_1 - t_2);$$

$$v_{x_1'x_2',x_1x_2} = -v_{x_2'x_1',x_1x_2} = -v_{x_1'x_2',x_2x_1} = v_{x_1,x_1'x_2'x_2}^*.$$

Da die Reihenfolge der Feldoperatoren auf der rechten Seite der Gl. (4.9) eindeutig festgelegt ist, ist bei der Bildung von zeitgeordneten Produkten darauf zu achten, daß diese Reihenfolge gewahrt bleibt. Im Spezialfall (4.9) ist

$$\begin{aligned}\mathfrak{S} &= \mathfrak{T} + \mathfrak{B}; \\ \mathfrak{T} &= t_{x'x}(\bar{u}_{x'}\bar{\partial}_x - u_x\partial_{x'}); \\ \mathfrak{B} &= \frac{1}{2}v_{x'y',xy}(\bar{u}_{x'}\bar{\partial}_x - u_x\partial_{x'})\partial_{y'}\bar{\partial}_y.\end{aligned}\quad (4.11)$$

Die „Einteilchenoperatoren“ \mathfrak{P}_0 und \mathfrak{T} ändern nicht die Punktezahlen der Koeffizienten eines Funktionals, während der „Zweiteilchenoperator“ \mathfrak{B} sie um zwei erhöht. Bezeichne $\mathbf{T}_{IJ}^{(k|l)}$ den Term des \mathbf{T}_{IJ} -Funktionals mit der Punktezahl (k, l) :

$$\mathbf{T}_{IJ}^{(k|l)} = \frac{i^{k+l}}{k!l!} \bar{u}_{x_k} \dots \bar{u}_{x_l} u_{x_1'} \dots u_{x_l'} \cdot \tau_{IJ}^{(k|l)}(x_k, \dots, x_1 | x_1', \dots, x_l'), \quad (4.12)$$

so daß

$$\mathbf{T}_{IJ} = \sum_{k,l=0}^{\infty} \mathbf{T}_{IJ}^{(l|k)} \quad (4.13)$$

ist, dann gilt Gl. (4.6) auch termweise:

$$(\mathfrak{P}_0 - \mathfrak{T}) \mathbf{T}_{IJ}^{(k|l)} = \mathfrak{B} \mathbf{T}_{IJ}^{(k+1|l+1)}; \quad k, l = 0, 1, 2, \dots \quad (4.14)$$

Dabei überführt der Funktionaloperator \mathfrak{B} ein Funktional der Stufe $(k+1, l+1)$ in ein Funktional der Stufe (k, l) (bezogen auf die Anzahl der \bar{u} und u ; die Punktezahlen der Mehrpunkt-Green-Funktionen bleiben natürlich erhalten, da \mathfrak{B} nur auf die \bar{u} und u wirkt).

Die Gln. (4.6) und (4.14) gelten für beliebige Zustände $|I\rangle, |J\rangle$. Daher gelten sie auch für das in Abschnitt 2.2 definierte Matrixfunktional \mathbf{T} und damit für \mathbf{PTQ} , wo \mathbf{P} ein beliebiger Projektionsoperator und $\mathbf{Q} = \mathbf{P}$ oder $\mathbf{Q} = \mathbf{1} - \mathbf{P}$ sind:

$$(\mathfrak{P}_0 - \mathfrak{T}) \mathbf{PTQ} = \mathfrak{B} \mathbf{PTQ}; \quad (4.15)$$

$$(\mathfrak{P}_0 - \mathfrak{T}) \mathbf{PTQ}^{(k|l)} = \mathfrak{B} \mathbf{PTQ}^{(k+1|l+1)}; \quad (4.16)$$

$$k, l = 0, 1, 2, \dots$$

Diese beiden Gleichungen bilden den Ausgangspunkt der Neuen Tamm-Dancoff-Methode, einschließlich ihrer Erweiterung auf Zwischenzustände.

4.2. Das allgemeine Schema des Abschneideverfahrens

Der Neuen Tamm-Dancoff-Näherung liegt, wie eingangs erwähnt, das Prinzip zugrunde, aus dem gekoppelten Gleichungssystem der Mehrpunkt-

Green-Funktionen (Gl. (4.16)) ein in sich geschlossenes System „herauszuschneiden“, indem man Mehrpunkt-Green-Funktionen höherer Punktezahl als Produkte von Mehrpunkt-Green-Funktionen geringerer Punktezahl darstellt. Diese Faktorisierung wird erreicht mit Hilfe der in Abschnitt 3.2 angegebenen, erweiterten Wick-Regeln; dabei fügt sich das Konzept des Raums der Zwischenzustände zwanglos in das bisherige Schema der Neuen Tamm-Dancoff-Methode ein. Im einzelnen:

M sei die Maximalpunktezahl der Mehrpunkt-Green-Funktionen in einem zu konstruierenden, in sich abgeschlossenen Gleichungssystem, und $\mathbf{T}^{(M)}$ bezeichne den Teil des \mathbf{T} -Funktionals, der nur Mehrpunkt-Green-Funktionen der Stufe $k+l=M$ enthält:

$$\mathbf{T}^{(M)} = \sum_{k,l=0}^{\infty} \delta_{M,k+l} \mathbf{T}^{(k|l)}. \quad (4.17)$$

Damit kann man das Gleichungssystem (4.16) in die Form

$$\left. \begin{aligned} (\mathfrak{P}_0 - \mathfrak{T}) \mathbf{PTQ}^{(1)} &= \mathfrak{B} \mathbf{PTQ}^{(3)}; \\ (\mathfrak{P}_0 - \mathfrak{T}) \mathbf{PTQ}^{(2)} &= \mathfrak{B} \mathbf{PTQ}^{(4)}; \\ &\vdots \\ (\mathfrak{P}_0 - \mathfrak{T}) \mathbf{PTQ}^{(M-2)} &= \mathfrak{B} \mathbf{PTQ}^{(M)}; \end{aligned} \right\} \text{A)}$$

$$\left. \begin{aligned} (\mathfrak{P}_0 - \mathfrak{T}) \mathbf{PTQ}^{(M-1)} &= \mathfrak{B} \mathbf{PTQ}^{(M+1)}; \\ (\mathfrak{P}_0 - \mathfrak{T}) \mathbf{PTQ}^{(M)} &= \mathfrak{B} \mathbf{PTQ}^{(M+2)}; \end{aligned} \right\} \text{B)}$$

$$\left. \begin{aligned} (\mathfrak{P}_0 - \mathfrak{T}) \mathbf{PTQ}^{(M+1)} &= \mathfrak{B} \mathbf{PTQ}^{(M+3)}; \\ &\vdots \end{aligned} \right\} \text{C)}$$

$$(4.18)$$

bringen. Während Teil A) der Gleichungen beibehalten wird, da nur Mehrpunkt-Green-Funktionen bis zur maximalen Punktezahl M auftreten, müssen die im Wechselwirkungsterm stehenden Mehrpunkt-Green-Funktionen des Teils B) faktorisiert werden, um A) und B) vom Rest C), der vernachlässigt wird, zu entkoppeln. Dazu geht man von den Umkehrungen (3.24) der erweiterten η - und ζ -Regel (3.10) und (3.11) aus. Man unterscheidet zwei Fälle: 1) $\mathbf{Q} = \mathbf{P}$ und 2) $\mathbf{Q} = \mathbf{1} - \mathbf{P}$. Im ersten Fall setzt man $\mathbf{PH}_P \mathbf{P}^{(M+1)} = \mathbf{PH}_P \mathbf{P}^{(M+2)} = 0$, so daß die rechten Seiten von B) gemäß

$$\mathbf{PTP}^{(M+1)} = \sum_{\nu=2}^{\infty} \frac{(-1)^{\nu}}{\nu} (\mathbf{PT}'\mathbf{P})^{\nu(M+1)}; \quad (4.19)$$

$$\mathbf{PTP}^{(M+2)} = \sum_{\nu=2}^{\infty} \frac{(-1)^{\nu}}{\nu} (\mathbf{PT}'\mathbf{P})^{\nu(M+2)}$$

faktorisiert werden, im zweiten Fall

$$\mathbf{PZ}_P \mathbf{Q}^{(M+1)} = \mathbf{PZ}_P \mathbf{Q}^{(M+2)} = 0,$$

was die Faktorisierungsformeln

$$\begin{aligned} \mathbf{P} \mathbf{T} \mathbf{Q}^{(M+1)} &= \sum_{\nu=1}^{\infty} (-1)^{\nu+1} (\mathbf{P} \mathbf{T}' \mathbf{P})^{\nu} \mathbf{P} \mathbf{T} \mathbf{Q}^{(M+1)}; \\ \mathbf{P} \mathbf{T} \mathbf{Q}^{(M+2)} &= \sum_{\nu=1}^{\infty} (-1)^{\nu+1} (\mathbf{P} \mathbf{T}' \mathbf{P})^{\nu} \mathbf{P} \mathbf{T} \mathbf{Q}^{(M+2)} \end{aligned} \quad (4.20)$$

ergibt. Gleichung (4.19) führt zu einem nicht-linearen Gleichungssystem für die Mehrpunkt-Green-Funktionen, die ausschließlich zum Raum der Zwischenzustände \mathcal{H}_P gehören, Gl. (4.20) dagegen zu einem linearen Gleichungssystem für die Mehrpunkt-Green-Funktionen zwischen den Zuständen von \mathcal{H}_P und \mathcal{H}_Q , wobei man die zuerst genannten Mehrpunkt-Green-Funktionen als bekannt voraussetzen muß.

4.3. Die Bedeutung der Zwischenzustände für die Neue Tamm-Dancoff-Methode

Bei der Beschreibung des Abbruchverfahrens für das Gleichungssystem der Mehrpunkt-Green-Funktionen wurden bislang keine Aussagen über die Projektionsoperatoren \mathbf{P} gemacht. Die dazugehörigen Teilräume \mathcal{H}_P unterliegen deshalb noch keiner Einschränkung. Sie könnten z.B. Zustände sowohl mit gerader als auch mit ungerader Teilchenzahl enthalten, die dann durch den Faktorisierungsprozeß miteinander gekoppelt werden. Enthält jedoch \mathcal{H}_P nur Zustände mit den Teilchenzahlen \mathcal{N} , $\mathcal{N} \pm 2$, $\mathcal{N} \pm 4, \dots$, so ergeben sich einige wesentliche Vereinfachungen, weil dann im Funktional $\mathbf{P} \mathbf{T} \mathbf{P}$ nur Mehrpunkt-Green-Funktionen mit gerader Punktezahl vorkommen. Außerdem machen wir die Wirkung der Projektionsoperatoren deutlich, indem wir die Zustände von \mathcal{H}_P und \mathcal{H}_Q explizit in die Bewegungsgleichungen einführen:

Wenn $|I_1\rangle, |I_2\rangle, \dots, |I_m\rangle \in \mathcal{H}_P$ und $|A\rangle \in \mathcal{H}_Q$ orthonormierte Eigenzustände des Hamilton-Operators H mit den Eigenwerten $\Omega_1, \Omega_2, \dots, \Omega_m$ und \mathcal{E}_A sind, kann man setzen

$$\mathbf{P} = \sum_{i=1}^m |I_i\rangle \langle I_i| \quad (4.21)$$

und

$$\begin{aligned} \mathfrak{P}_0 \mathbf{T}_{I_i I_j} &= (\Omega_j - \Omega_i) \mathbf{T}_{I_i I_j}; \quad \mathfrak{P}_0 \mathbf{T}_{I_i A} = (\mathcal{E}_A - \Omega_i) \mathbf{T}_{I_i A}; \\ i, j &= 1, \dots, m. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Wir betrachten wieder die beiden Fälle 1) $\mathbf{Q} = \mathbf{P}$ und 2) $\mathbf{Q} = \mathbf{1} - \mathbf{P}$.

1) η -Methode ($\mathcal{H}_Q = \mathcal{H}_P$)

Das Gleichungssystem (4.18) nimmt bei Berücksichtigung der Gl. (3.24) und (2.27) und mit obiger Einschränkung für P die folgende Gestalt an:

$$\begin{aligned} k+l < M &: (\Omega_j - \Omega_i - \mathfrak{T}) \mathbf{T}_{I_i I_j}^{(k|l)} = \mathfrak{P} \mathbf{T}_{I_i I_j}^{(k+1|l+1)}; \\ k+l = M &: (\Omega_j - \Omega_i - \mathfrak{T}) \mathbf{T}_{I_i I_j}^{(k|l)} \\ &= \mathfrak{P} \sum_{\nu=2}^{\infty} \frac{(-1)^{\nu}}{\nu} \sum_{p_1, \dots, p_r=0}^{k+1} \sum_{q_1, \dots, q_r=0}^{l+1} \quad (4.23) \\ &\quad \cdot \delta_{k+1, p_1 + \dots + p_r} \delta_{l+1, q_1 + \dots + q_r} \sum_{j_1, \dots, j_r=1}^m \\ &\quad \cdot \mathbf{T}_{I_i I_{j_1}}^{(p_1|q_1)} \mathbf{T}_{I_{j_1} I_{j_2}}^{(p_2|q_2)} \dots \mathbf{T}_{I_{j_{r-1}} I_{j_r}}^{(p_r|q_r)}; \\ &\quad p_r + q_r = 2, 4, 6, \dots; \quad r = 1, 2, \dots, \nu. \end{aligned}$$

Gleichung (4.23) stellt ein hoch nicht-lineares Gleichungssystem dar, bei dem alle Zustände von \mathcal{H}_P untereinander gekoppelt sind, wie die Gleichung für $k+l=M$ zeigt.

2) ζ -Methode ($\mathcal{H}_Q = \text{Komplement von } \mathcal{H}_P$)

Das Gleichungssystem (4.18) nimmt bei Berücksichtigung der Gl. (3.24) und (2.27) und mit obiger Einschränkung für P die folgende Gestalt an:

$$\begin{aligned} k+l < M &: (\mathcal{E}_A - \Omega_i - \mathfrak{T}) \mathbf{T}_{I_i A}^{(k|l)} = \mathfrak{P} \mathbf{T}_{I_i A}^{(k+1|l+1)}; \\ k+l = M &: (\mathcal{E}_A - \Omega_i - \mathfrak{T}) \mathbf{T}_{I_i A}^{(k|l)} \\ &= \mathfrak{P} \sum_{\nu=1}^{\infty} (-1)^{\nu+1} \sum_{p_1, \dots, p_{r+1}=0}^{k+1} \sum_{q_1, \dots, q_{r+1}=0}^{l+1} \quad (4.24) \\ &\quad \cdot \delta_{k+1, p_1 + \dots + p_{r+1}} \delta_{l+1, q_1 + \dots + q_{r+1}} \sum_{j_1, \dots, j_r=1}^m \\ &\quad \mathbf{T}_{I_i I_{j_1}}^{(p_1|q_1)} \dots \mathbf{T}_{I_{j_{r-1}} I_{j_r}}^{(p_r|q_r)} \mathbf{T}_{I_{j_r} A}^{(p_{r+1}|q_{r+1})}; \\ &\quad p_r + q_r = 2, 4, 6, \dots; \quad r = 1, 2, \dots, \nu+1. \end{aligned}$$

Man sieht sofort, daß das Gleichungssystem den Zustand $|A\rangle \in \mathcal{H}_Q$ nicht an andere Elemente aus \mathcal{H}_Q koppelt. Es handelt sich somit um ein lineares Gleichungssystem, sofern die Energien Ω_i und die Kontraktionen $\mathbf{T}_{I_i I_j}^{(k|l)}$ bekannt sind, etwa indem sie mit der η -Methode berechnet worden sind.

Die Gln. (4.23) und (4.24) geben nun in funktionaler Form die Gleichungen der Neuen Tamm-Dancoff-Methode für jede beliebige Ordnung dieses Näherungsverfahrens an. Das nichtlineare Gleichungssystem (4.23) entspricht den höheren Ordnungen einer erweiterten Hartree-Fock-Theorie, das lineare Gleichungssystem (4.24) den höheren Ordnungen einer erweiterten RPA. Wenn der Raum der Zwischenzustände \mathcal{H}_P nur aus dem Grundzustand

des betrachteten Vielteilchensystems besteht, erhält man die Resultate der üblichen Neuen Tamm-Dancoff-Methode, in unterster Näherung also die Hartree-Fock-Theorie und die RPA. Die Erweiterungen dieser beiden wichtigen Näherungen durch Aufnahme von \mathcal{N} -Teilchen-Zwischenzuständen ergeben sich aus den untersten Ordnungen der Gleichungen (4.23) und (4.24).

1) Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen

$$(\Omega_j - \Omega_i - \mathfrak{T}) \mathbf{T}_{I_i I_j}^{(1|1)} = \frac{1}{2} \mathfrak{B} \sum_{j_1=1}^m \mathbf{T}_{I_i I_{j_1}}^{(1|1)} \mathbf{T}_{I_{j_1} I_j}^{(1|1)}; \quad (4.25)$$

$$i, j = 1, \dots, m.$$

2) RPA mit Zwischenzuständen

$$(\mathcal{E}_A - \Omega_i - \mathfrak{T}) \mathbf{T}_{I_i A}^{(1|1)} = \mathfrak{B} \sum_{j_1=1}^m \mathbf{T}_{I_i I_{j_1}}^{(1|1)} \mathbf{T}_{I_{j_1} A}^{(1|1)};$$

$$i = 1, \dots, m. \quad (4.26)$$

$|A\rangle$ ist ein \mathcal{N} -Teilchen-Zustand aus \mathcal{H}_Q .

Die Gln. (4.25) und (4.26) nehmen für nicht-relativistische Vielteilchensysteme, wo man zum Einzeitformalismus übergehen kann, eine besonders einfache Form an. Wir haben in den vorangehenden Arbeiten die Strukturen dieser nicht-relativistischen Versionen untersucht:

1) Die Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen

$$2(\Omega_i - \Omega_j) \varrho_{I_i I_j}^{ac} = \sum_k \sum_{j_1=1}^m (\varrho_{I_i I_{j_1}}^{ak} \mathcal{H}_{I_{j_1} I_j}^{kc} - \mathcal{H}_{I_i I_{j_1}}^{ak} \varrho_{I_{j_1} I_j}^{kc} + \varrho_{I_{j_1} I_j}^{ak} \mathcal{H}_{I_i I_{j_1}}^{kc} - \mathcal{H}_{I_{j_1} I_j}^{ak} \varrho_{I_i I_{j_1}}^{kc});$$

$$\sum_k \varrho_{I_i I_i}^{kk} = \mathcal{N}, \quad (4.27)$$

ist ein nicht-lineares, hermitisches Gleichungssystem für die verallgemeinerte Dichtematrix

$$\varrho_{I_i I_j}^{ac} = \langle I_i | a_c^\dagger a_a | I_j \rangle; \quad i, j = 1, \dots, m, \quad (4.28)$$

die Übergangsamplituden für alle \mathcal{N} -Teilchen-Zwischenzustände $|I_1\rangle, |I_2\rangle, \dots, |I_m\rangle$ enthält. Sie ist nicht-linear, weil ϱ auch in der verallgemeinerten Hartree-Fock-Matrix

$$\mathcal{H}_{I_i I_j}^{ac} = \mathcal{F}^{ac} \delta_{ij} + \sum_{l, l'} V^{al', cl} \varrho_{I_i I_j}^{ll'}; \quad i, j = 1, \dots, m, \quad (4.29)$$

vorkommt.

2) Die RPA mit Zwischenzuständen

$$\sum_{r,s} \sum_{j_1=1}^m W_{I_i I_{j_1}}^{qp, sr} \langle I_{j_1} | a_s^\dagger a_r | A \rangle = (\mathcal{E}_A - \Omega_{i_0}) \langle I_i | a_q^\dagger a_p | A \rangle; \quad (4.30)$$

$i = 1, \dots, m$; i_0 beliebig, aber fest;

$$W_{I_i I_j}^{qp, sr} = (\Omega_i - \Omega_{i_0}) \delta_{ij} \delta_{pr} \delta_{sq} + \mathcal{H}_{I_i I_j}^{pr} \delta_{sq} - \mathcal{H}_{I_i I_j}^{sq} \delta_{pr} + \sum_t V^{ps, tr} \varrho_{I_i I_j}^{tq} - \sum_t V^{ts, qr} \varrho_{I_i I_j}^{pt},$$

ist ein lineares, nicht-hermitisches Gleichungssystem für die Übergangsamplituden $\langle I_i | a_s^\dagger a_r | A \rangle$ zwischen den Zwischenzuständen $|I_1\rangle, |I_2\rangle, \dots, |I_m\rangle$ und dem angeregten Zustand $|A\rangle$ mit $\langle I_i | A \rangle = 0$ für $i = 1, \dots, m$. Dabei wird die Matrix W aus Größen gebildet, die von der Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen bekannt sind.

5. Schluß

Die Erweiterung der Methode der erzeugenden Funktionale durch das Konzept der Matrixfunktionale liefert eine Fülle von neuen Näherungsverfahren, da die Güte der Näherungen außer durch den Übergang zu einer höheren Ordnung in der Punktezahl noch zusätzlich durch die Wahl des Raums der Zwischenzustände beeinflusst werden kann. Im Fall des nicht-relativistischen Vielteilchenproblems führen die untersten Ordnungen der so erweiterten Neuen Tamm-Dancoff-Methode im Spezialfall auf erweiterte Hartree-Fock- und RPA-Gleichungen, die vielseitig anwendbar sind: Rotationsbanden von Atomen, Molekülen und Kernen; Phasenübergänge in Vielteilchensystemen; Einbau von Erhaltungssätzen und Behandlung entarteter Niveaus^{1, 2}. Die Neue Tamm-Tamm-Dancoff-Methode mit Zwischenzuständen ist ein kovariantes Näherungsverfahren. So ist sie für die Heisenbergsche nicht-lineare Spinortheorie⁹ von Nutzen: Die relativistische Version der Hartree-Fock-Theorie mit Zwischenzuständen ermöglicht eine selbstkonsistente Berechnung von Vakuum und Bosonenzuständen.

Bis jetzt haben wir nur fermionische Variablen berücksichtigt. In den heute gebräuchlichen Modellen der Quantenfeldtheorie kommen aber neben fermionischen auch mesonische Variablen vor. Es ist nicht schwer, die Funktionalmethode mit Zwischenzuständen auf solche Modelle auszudehnen¹⁴: man muß nur, genau wie vorher bei fermionischen Variablen, skalare Funktionale durch Matrixfunktionale ersetzen. Auch diese Erweiterung wird eine Fülle neuer Näherungsverfahren liefern, so z.B. einen neuen Zugang zu dem heute sehr aktuellen Problem der Pion-Kondensation^{18, 19}.

- ¹ A. Friedrich, W. Gerling u. K. Bleuler, *Z. Naturforsch.* **30 a**, 142 [1975].
- ² A. Friedrich u. W. Gerling, *Z. Physik A* **277**, 47 [1976].
- ³ C. Bloch and J. Horowitz, *Nucl. Phys.* **8**, 91 [1958].
- ⁴ T. T. S. Kuo, S. Y. Lee, and K. F. Ratcliff, *Nucl. Phys. A* **176**, 65 [1971].
- ⁵ F. Dyson, *Phys. Rev.* **91**, 1543 [1953].
- ⁶ W. P. Silin u. W. J. Fainberg, *Fortschritte der Physik* **4**, 233 [1956].
- ⁷ N. N. Bogoliubov u. D. V. Shirkov- *Introduction to the Theory of Quantized Fields*, Interscience Publishers, New York 1959, pp. 159–168.
- ⁸ H. P. Dürr u. F. Wagner, *Nuovo Cim.* **46**, 223 [1966].
- ⁹ W. Heisenberg, *Einführung in die einheitliche Feldtheorie der Elementarteilchen*, pp. 48–80, Hirzel, Stuttgart 1967.
- ¹⁰ K. Bleuler, A. Friederich, H.-R. Petry, and D. Schütte, in: *Quanten und Felder*, Verlag Vieweg, Braunschweig 1971, pp. 267–277.
- ¹¹ M. Baranger, in: *Cargèse lectures in theoretical physics 1962*, pp. 61–89, ed. by M. Lévy, W. A. Benjamin, Inc., New York 1963.
- ¹² L. P. Gorkov, *J. Exp. Theor. Phys.* **7**, 505 [1958].
- ¹³ A. B. Migdal, *Nuclear Theory: the Quasiparticle Method*, W. A. Benjamin, Inc., New York, Amsterdam 1968, p. 35.
- ¹⁴ Y. V. Novozhilov and A. V. Tulub, *The Method of Functionals in the Quantum Theory of Fields*, Gordon and Breach, New York 1961.
- ¹⁵ W. Brenig and H. Wagner, *Z. Physik* **173**, 484 [1963].
- ¹⁶ H. Stumpf, K. Scheerer and H. G. Märkl, *Z. Naturforsch.* **25 a**, 1556 [1970].
- ¹⁷ H. Stumpf, *Acta Physica Austriaca*, Suppl. **IX**, 195 [1972].
- ¹⁸ A. B. Migdal, *Nucl. Phys. A* **210**, 421 [1973].
- ¹⁹ G. Baym and C. Pethick, *Ann. Rev. Nucl. Sci.* **25**, 27 [1975].