Eine kanonische Transformation als Lösungsvorschlag für eine Funktionalgleichung

F. Wahl

Institut für Theoretische Physik der Universität Tübingen

Z. Naturforsch. **35a**, 567–578 (1980); eingegangen am 31. März 1980

Herrn Prof. Dr. F. Bopp zum 70. Geburtstag gewidmet

A Canonical Transformation as a Proposal of the Solution of a Functional Equation

Starting with a functional equation of the New Tamm-Dancoff procedure for electronic states of defects in solids we describe an attempt to transform this equation. The aim is to extract a one-particle equation as a projection which is a good approximation for the case of a defect. The transformation usedi s a simple approach to more general canonical transformations leading to inequivalent representations of the many-body problem. It is compared with the elimination procedure given in a first paper [1] which treated the manyelectron problem occuring with the storage of hydrogen in metals.

Zur Untersuchung von Störstellen in Festkörpern, insbesondere von Wasserstoffkernen in Metallen, wurde für das Vielelektronenproblem in einer früheren Arbeit [1]* die Funktionalgleichung des Neuen-Tamm-Dancoff-Systems (NTD-System) aufgestellt. Zur Herleitung einer Einteilchenschrödingergleichung für die Störstelle aus dem hochdimensionalen „φ-System" wurde ein Eliminationsverfahren benutzt. Wir stellen uns hier die Frage, ob nicht durch eine direkte Behandlung der Funktionalgleichung mit Hilfe einer kanonischen Transformation ein vergleichbares Ergebnis gewonnen werden kann, wobei unter Umständen sogar durch die größere Allgemeinheit des Verfahrens eine Verbesserung der Lösungstheorie erreichbar ist. Es gibt in der Tat eine solche Transformation, die im wesentlichen zum selben Ergebnis führt, darüber hinaus aber auch noch eine selbstkonsistente Bestimmung der Entwicklungsfunktionen für das Vielteilchenproblem zuläßt. Sie soll hier so geschildert werden, daß gegebenenfalls Untersuchungen zu einer weiteren Verallgemeinerung der Lösungstheorie angeregt werden.

§ 1. Herleitung der Funktionalgleichung

Der Vollständigkeit halber sei hier die Aufstellung der Funktionalgleichung kurz geschildert. Wie in (I, 2.1) gehen wir aus vom Hamiltonoperator des Elektronensystems

$$\begin{aligned}\mathscr{H} = \int \mathrm{d}^3x\, \psi^+(\boldsymbol{x}) \Big(&- \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\mathrm{W}}(\boldsymbol{x}) \\ &+ V_{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x}) \Big) \psi(\boldsymbol{x}) \\ &+ \tfrac{1}{2} \iint \mathrm{d}^3x\, \mathrm{d}^3x'\, \psi^+(\boldsymbol{x})\, \psi^+(\boldsymbol{x}') \frac{e^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|} \psi(\boldsymbol{x}')\psi(\boldsymbol{x}) ,\end{aligned} \tag{1.1}$$

wobei wir unter $V_{\mathrm{W}}(\boldsymbol{x})$ das Potential der Wirtsgitteratome, bzw. Ionen, und unter $V_{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x})$ das Potential der Störstellen verstehen wollen. Mit Hilfe von hermetischen Feldoperatoren

$$\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}) = U^+ \begin{pmatrix} \psi(\boldsymbol{x}) \\ \psi^+(\boldsymbol{x}) \end{pmatrix} ;$$

$$\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})^T = \hat{\Psi}^+(\boldsymbol{x}) = {}^{(\psi^+(\boldsymbol{x}),\ \ \psi(\boldsymbol{x})}\, U ; \tag{1.2 a}$$

$$\{\hat{\Psi}_\sigma(\boldsymbol{x}), \hat{\Psi}_\varrho(\boldsymbol{x}')\}_+ = \delta_{\sigma,\varrho}\, \delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') , \quad \sigma, \varrho = 1, 2 , \tag{1.2 b}$$

wo $$U^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{pmatrix} , \tag{1.2 c}$$

geben wir den Hamilton-Operator in einer für die allgemeinen Untersuchungen zweckmäßigen „doppelkomponentigen" Darstellung an [2], [3]:

$$\begin{aligned}\mathscr{H} =: \hat{\mathscr{H}} = \frac{1}{2} \int \mathrm{d}^3x\, \hat{\Psi}(\boldsymbol{x})^T (\hat{H}(\boldsymbol{x}) &+ \hat{B}(\boldsymbol{x}))\, \hat{\Psi}(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{4} \frac{e^2}{2} \iint \mathrm{d}^3x\, \mathrm{d}^3x'\, \hat{\Psi}(\boldsymbol{x})^T \\ &\cdot \hat{\Psi}(\boldsymbol{x}')^T \frac{\hat{E} \otimes \hat{E}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|} \hat{\Psi}(\boldsymbol{x}')\, \hat{\Psi}(\boldsymbol{x}) + C .\end{aligned} \tag{1.3}$$

Reprint requests to Prof. F. Wahl, Institut für Theoretische Physik der Universität Tübingen, Auf der Morgenstelle 14, D-7400 Tübingen.

* Wird in dieser Arbeit als (I) zitiert.

0340-4811 / 80 / 0600-0567 $ 01.00/0. — Please order a reprint rather than making your own copy.

Hier sind

$$\hat{E} = U^+ \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix} U, \tag{1.4}$$

$$\begin{aligned} \hat{H}(x) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\mathrm{w}}(\boldsymbol{x}) + V_{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x}) \right) \hat{E} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \hat{\Delta} + \hat{V}_{\mathrm{w}}(\boldsymbol{x}) + \hat{V}_{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x}), \end{aligned} \tag{1.5}$$

und

$$\begin{aligned} \hat{B}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2} \int \Bigg(& \frac{e^2}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|} \delta(\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}') \\ & - \frac{e^2}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|} \delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') \Bigg) \hat{E} \, \mathrm{d}^3 x' \end{aligned} \tag{1.6}$$

schiefsymmetrische Matrizen, wobei $\hat{B}(\boldsymbol{x})$ ebenso wie

$$\begin{aligned} C = & \frac{1}{8} \iint \mathrm{d}^3 x \, \mathrm{d}^3 x' \, \delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}) \frac{e^2}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|} \\ & \cdot \delta(\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}') + \frac{1}{2} \int \mathrm{d}^3 x \, \delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}) \\ & \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\mathrm{w}}(\boldsymbol{x}) + V_{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x}) \right) \end{aligned} \tag{1.7}$$

aufgrund der δ-Singularitäten divergente Größen darstellen. Sie werden jedoch bei der nachfolgenden Abbildung auf natürliche Weise so ergänzt, daß endliche und physikalisch sinnvolle Größen entstehen. Damit erübrigt sich eine Diskussion dieser Glieder an dieser Stelle. Die Vereinbarung, daß sich das erste $\hat{E}$ im letzten Glied von (1.3) auf das äußere Operatorpaar $\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})^T$, $\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})$, und das zweite $\hat{E}$ auf das innere Paar $\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}')^T$, $\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}')$ beziehen soll, wollen wir bei allen entsprechenden Ausdrücken in dieser Arbeit durchhalten.

Abweichend von (I) soll die Abbildung auf den „u-Raum" einer Funktionalgleichung für das NTD-System der Energiedifferenzen zwischen Idealkristall- und gestörten Kristallzuständen mit Hilfe eines schon normalgeordneten Erzeugenden Funktionals

$$\hat{\mathbb{W}} = e^{ia} e^{ib} \tag{1.8}$$

abgekürzt werden [4], [5]. Dabei sind

$$a = \iint \mathrm{d}^3 x \, \mathrm{d}^3 x' \, u^+(\boldsymbol{x}) \hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') \hat{\Psi}(\boldsymbol{x}'), \tag{1.9a}$$

$$b = \iint \mathrm{d}^3 x \, \mathrm{d}^3 x' \, u^+(\boldsymbol{x}) \hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') \hat{\Psi}(\boldsymbol{x}'), \tag{1.9b}$$

wo die Quellenoperatoren $u^+(\boldsymbol{x})$ zweikomponentige Fermioperatoren darstellen:

$$\{u_\sigma(\boldsymbol{x}), u_\varrho^+(\boldsymbol{x}')\}_+ = \delta_{\varrho,\sigma} \delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'), \quad \sigma, \varrho = 1, 2, \tag{1.10}$$

die mit dem Feldoperator $\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})$ antikommutieren

$$\begin{aligned} &\{u_0(\boldsymbol{x}), \hat{\Psi}_\varrho(\boldsymbol{x}')\}_+ = 0; \\ &\{u_0^+(\boldsymbol{x}), \hat{\Psi}_\varrho(\boldsymbol{x}')\}_+ = 0. \end{aligned} \tag{1.11}$$

Die Projektoren $\hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')$ und $\hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')$ mit den Eigenschaften

$$\begin{aligned} &\int \hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') \hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}'') \, \mathrm{d}^3 x' = \hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}''); \\ &\int \hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') \hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}'') \, \mathrm{d}^3 x' = 0, \\ &\int \hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') \hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}'') \, \mathrm{d}^3 x' = \hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}''), \end{aligned} \tag{1.12a}$$

$$\hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')^T = \hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}), \tag{1.12b}$$

setzen sich zusammen aus

$$\hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = U^+ \begin{pmatrix} S_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') & 0 \\ 0 & S_0(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}) \end{pmatrix} U, \tag{1.13a}$$

$$\hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = U^+ \begin{pmatrix} S_0(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') & 0 \\ 0 & S_1(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}) \end{pmatrix} U, \tag{1.13b}$$

wo $S_0(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')$ und $S_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')$ ebenfalls Projektoren sind mit den zu (1.12a) analogen Eigenschaften, für die eine Entwicklung nach einem vollständigen Satz von Einelektronenfunktionen $\chi_i(\boldsymbol{x})$ folgendermaßen festgelegt werden soll:

$$\begin{aligned} S_0(\boldsymbol{x}, x') &= \sum_i \chi_i(\boldsymbol{x}) f_i \chi_i^*(\boldsymbol{x}'), \\ S_0(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}) &= S_0^*(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'), \end{aligned} \tag{1.14a}$$

$$\begin{aligned} S_1(\boldsymbol{x}, x') &= \sum_i \chi_i(\boldsymbol{x}) g_i \chi_i^*(\boldsymbol{x}'), \\ S_1(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}) &= S_1^*(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'). \end{aligned} \tag{1.14b}$$

f_i sei die Fermi-Verteilung. Mit $g_i = 1 - f_i$ als Komplement gilt

$$S_0(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') + S_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'). \tag{1.15}$$

In dieser Form einer Vollständigkeitsrelation sollen auch die δ-Singularitäten in (1.6) und (1.7) verstanden werden.

Mit dieser Vorgabe der Einteilchenentwicklung (1.14) beschreibt das Erzeugende Funktional (1.8) eine Normalordnung bezüglich eines Ausgangszustands, der durch einen Satz von Einelektronenzuständen unterhalb der Fermi-Kante charakterisiert wird, z.B. durch ein volles Valenzband bei Halbleitermodellen oder ein teilweise gefülltes Leitungsband bei Metallen.

Die Funktionalgleichung des NTD-Verfahrens entsteht durch die Berechnung von

$$\begin{aligned}&\langle \mathfrak{o}|\hat{\mathbb{W}}\mathscr{H}_h - \mathscr{H}_0\hat{\mathbb{W}}|h\rangle \\ &= (E_h - E_0)\langle \mathfrak{o}|\hat{\mathbb{W}}|h\rangle\end{aligned} \tag{1.16}$$

Hier stehen E_0 und $|\mathfrak{o}\rangle$ für Eigenwerte und Zustände des Schrödinger-Problems beim ungestörten Kristall

$$\mathscr{H}_0|\mathfrak{o}\rangle = E_0|\mathfrak{o}\rangle \tag{1.17}$$

und E_h, $|h\rangle$ für die entsprechenden Größen des gestörten Problems

$$\mathscr{H}_h|h\rangle = E_h|h\rangle \tag{1.18}$$

Projeziert man (1.16) auf das Vakuum $|0)$ des u-Raumes

$$u(\boldsymbol{x})|0) = 0 \tag{1.19}$$

und definiert

$$\omega_{0h} := E_h - E_0, \tag{1.20a}$$

$$|\Phi_{0h}) := \langle \mathfrak{o}|\hat{\mathbb{W}}|h\rangle|0), \tag{1.20b}$$

sowie

$$\begin{aligned}&\mathbb{B}(u^+, u)|\Phi_{0h}) \\ &= \langle \mathfrak{o}|\hat{\mathbb{W}}\mathscr{H}_h\hat{\mathbb{W}}^{-1} - \mathscr{H}_0)\hat{\mathbb{W}}|h\rangle|0),\end{aligned} \tag{1.21}$$

so erhält man die Funktionalgleichung in Form eines linearen Eigenwertproblems für die Energiedifferenzen ω_{0h}:

$$\mathbb{B}(u^+, u)|\Phi) = \omega|\Phi). \tag{1.22}$$

Die Berechnung des Funktionaloperators $\mathbb{B}$ erfolgt am einfachsten mit Hilfe der leicht zu beweisenden Relationen*

$$\hat{\mathbb{W}}\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})\hat{\mathbb{W}}^{-1} = \hat{\Psi}(\boldsymbol{x}) + i\,u^{\#}(\boldsymbol{x}) \tag{1.23}$$

und

$$\begin{aligned}\hat{\mathbb{W}}u(\boldsymbol{x})\hat{\mathbb{W}}^{-1} = u(\boldsymbol{x}) &- i\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}) \\ &+ \int \hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')\,u^{\#}(\boldsymbol{x}')\,d^3x'.\end{aligned} \tag{1.24}$$

* Es ist $u^{\#}(\boldsymbol{x}) := u^+(\boldsymbol{x})^T$.

Durch Projektion von (1.24) auf $\mathbb{W}|0)$ entsteht aus (1.24) die Funktionalersetzung

$$\begin{aligned}&i\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})\hat{\mathbb{W}}|0) \\ &\quad= \left(u(\boldsymbol{x}) + \int \hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')\,u^{\#}(\boldsymbol{x}')\,d^3x'\right)\hat{\mathbb{W}}|0).\end{aligned} \tag{1.25}$$

Den mit (1.23) und (1.25) berechneten Funktionaloperator $\mathbb{B}$ zerlegen wir in die Anteile

$$\mathbb{B} = \mathbb{B}_0 + \mathbb{B}_{\mathrm{I}} + \mathbb{B}_{\mathrm{II}} + C' \tag{1.26}$$

mit

$$\mathbb{B}_0 = \mathbb{D}_0^{(0)} + \mathbb{R}_0, \tag{1.27a}$$

$$\mathbb{B}_{\mathrm{I}} = \mathbb{D}_0^{(a)} + \mathbb{D}_0^{(b)} - \mathbb{R}_0, \tag{1.27b}$$

$$\begin{aligned}\mathbb{B}_{\mathrm{II}} = \mathbb{D}_1^{(a)} + \mathbb{D}_1^{(b)} &+ \mathbb{D}_{-1}^{(0)} + \mathbb{D}_{-1}^{(a)} \\ &+ \mathbb{D}_{-1}^{(b)} + \mathbb{D}_{-2}^{(b)}.\end{aligned} \tag{1.27c}$$

Hier sind die Operatoren $\mathbb{D}_x^{(0,a,b)}$ identisch mit den Ausdrücken (I, 5.6—5.14). Wir stellen sie im Anhang nochmals zusammen. Allgemein gilt, daß die mit (a) oben indizierten Operatoren von Störungen der Idealgitterstruktur herrühren; die mit (b) indizierten sind ausschließlich Vierfermionenoperatoren; alle mit 0 unten indizierten Glieder sind ,,Diagonalblockoperatoren“ der Gestalt

$$\begin{aligned}\mathbb{D}_0^{(0,a)} = \iint &u^+(\boldsymbol{x}) \\ &\cdot \hat{D}_0^{(0,a)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')\,u(\boldsymbol{x}')\,d^3x\,d^3x'\end{aligned} \tag{1.28a}$$

bzw.

$$\begin{aligned}\mathbb{D}_0^{(b)} = \iiiint &u^+(\boldsymbol{x})\,u^+(\boldsymbol{x}')\,\hat{D}_0^{(b)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}'', \boldsymbol{x}''') \\ &\cdot u(\boldsymbol{x}'')\,u(\boldsymbol{x}''')\,d^3x \ldots d^3x'''.\end{aligned} \tag{1.28b}$$

Die übrigen haben die Struktur von ,,Nebendiagonalblockgliedern“

$$\begin{aligned}\mathbb{D}_1^{(a)} = \iint &u(\boldsymbol{x})^T\,\hat{D}_1^{(a)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') \\ &\cdot u(\boldsymbol{x}')\,d^3x\,d^3x',\end{aligned} \tag{1.29a}$$

$$\begin{aligned}\mathbb{D}_1^{(b)} = \iiiint &u^+(\boldsymbol{x})\,u(\boldsymbol{x}')^T\,\hat{D}_1^{(b)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}'', \boldsymbol{x}''') \\ &\cdot u(\boldsymbol{x}''),\ u(\boldsymbol{x}''')\,d^3x \ldots d^3x''',\end{aligned} \tag{1.29b}$$

$$\begin{aligned}\mathbb{D}_{-1}^{(0,a)} = \iint &u^+(\boldsymbol{x})\,\hat{D}_{-1}^{(0,a)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') \\ &\cdot u^{\#}(\boldsymbol{x}')\,d^3x\,d^3x',\end{aligned} \tag{1.30a}$$

$$\begin{aligned}\mathbb{D}_{-1}^{(b)} = \iiiint &u^+(\boldsymbol{x})\,u^+(\boldsymbol{x}')\,\mathbb{D}_{-1}^{(b)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}'', \boldsymbol{x}''') \\ &\cdot u^{\#}(\boldsymbol{x}'')\,u(\boldsymbol{x}''')\,d^3x \ldots d^3x''',\end{aligned} \tag{1.30b}$$

$$\begin{aligned}\mathbb{D}_{2-}^{(b)} = \iiiint &u^+(\boldsymbol{x})\,u^+(\boldsymbol{x}')\,\hat{D}_{-2}^{(b)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}'', \boldsymbol{x}''') \\ &\cdot u^{\#}(\boldsymbol{x}'')\,u^{\#}(\boldsymbol{x}''')\,d^3x \ldots d^3x'''.\end{aligned} \tag{1.31}$$

Der Ergänzungsoperator $\mathbb{R}_0$ hat die gleiche Struktur wie $\mathbb{D}_0$:

$$\mathbb{R}_0 = \iint u^+(\boldsymbol{x})\,\hat{R}_0(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')\,u(\boldsymbol{x}')\,d^3x\,d^3x'. \tag{1.32}$$

Während die Gestalt aller $D_x^{(0,a,b)}$ im Anhang angegeben ist, wollen wir $R_0(x, x')$ hier noch nicht festlegen, da dieses Matrixelement wesentlich von der Formulierung einer Selbstkonsistenzbedingung abhängt (siehe § 4).

Die Aufteilung (1.27) ist in gewisser Weise willkürlich. Es kann sich unter Umständen herausstellen, daß sich eine andere Aufteilung, etwa

$$\mathbb{B}_0 = \mathbb{D}_0^{(0)} + \mathbb{D}_0^{(a)} + \mathbb{R}_0, \tag{1.27d}$$

$$\mathbb{B}_{\mathrm{I}} = \mathbb{D}_0^{(b)} - \mathbb{R}_0, \tag{1.27e}$$

$$\mathbb{B}_{\mathrm{II}} = (1.27\mathrm{c}), \tag{1.27f}$$

als vorteilhafter erweist. Wir kommen in § 6 darauf zurück. Ein leitender Gesichtspunkt bei einer solchen Aufspaltung ist jedenfalls die Möglichkeit einer „Diagonalisierung" von $\mathbb{B}_0$ in der folgenden Form:

$$\mathbb{B}_0 = \iint d^3x\, d^3x'\, u^+(\boldsymbol{x})\, \hat{B}_0(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')\, u(\boldsymbol{x}') \tag{1.33}$$

mit

$$\hat{B}_0(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = U^+ \begin{pmatrix} B_0(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') & 0 \\ 0 & -B_0(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}) \end{pmatrix} U \tag{1.34}$$

und

$$B_0(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \sum_i \chi_i(\boldsymbol{x})\, \varepsilon_i\, \chi^*(\boldsymbol{x}'). \tag{1.35}$$

Hier seien die ε_i und $\chi_i(\boldsymbol{x})$ Eigenwerte und Eigenfunktionen eines Schrödinger-Problems, das jedoch erst nach der expliziten Vorgabe von $R_0(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')$ angegeben werden kann.

§ 2. Transformation der Funktionalgleichung

Multipliziert man (1.22) von links mit einem Operator

$$\mathbb{G} = e^{-\mathbb{K}}, \tag{2.1}$$

so erhält man eine transformierte Funktionalgleichung

$$\overline{\mathbb{B}}\,|\overline{\Phi}) = \omega\,|\overline{\Phi}) \tag{2.2}$$

mit

$$\overline{\mathbb{B}} = \mathbb{G}\,\mathbb{B}\,\mathbb{G}^{-1} \tag{2.2a}$$

und

$$|\overline{\Phi}) = \mathbb{G}\,|\Phi). \tag{2.2b}$$

Der transformierte Operator (2.2a) läßt sich darstellen durch die formale Reihe

$$\overline{\mathbb{B}} = \mathbb{B} - \frac{1}{1!}[\mathbb{K}, \mathbb{B}] + \frac{1}{2!}[\mathbb{K}, [\mathbb{K}, \mathbb{B}]] - + \cdots$$

$$= \mathbb{B}_0 + \mathbb{B}_{\mathrm{I}} + \mathbb{B}_{\mathrm{II}} - \frac{1}{1!}[\mathbb{K}, \mathbb{B}_0] - \frac{1}{1!}[\mathbb{K}, \mathbb{B}_{\mathrm{I}}] - \frac{1}{1!}[\mathbb{K}, \mathbb{B}_{\mathrm{II}}] + \frac{1}{2!}[\mathbb{K}, [\mathbb{K}, \mathbb{B}_0]] + \cdots. \tag{2.3}$$

Der Operator $\mathbb{K}$ soll nun so bestimmt werden, daß

$$\mathbb{B}_{\mathrm{II}} = [\mathbb{K}, \mathbb{B}_0]. \tag{2.4}$$

Dann verbleibt in (2.3) nur noch

$$\begin{aligned} \overline{\mathbb{B}} = \mathbb{B}_0 &- \left(\frac{1}{1!} - \frac{1}{2!}\right)[\mathbb{K}, [\mathbb{K}, \mathbb{B}_0]] \\ &+ \left(\frac{1}{2!} - \frac{1}{3!}\right)[\mathbb{K}, [\mathbb{K}\,[\mathbb{K}, \mathbb{B}_0]]] - + \cdots \\ &+ \mathbb{B}_{\mathrm{I}} - \frac{1}{1!}[\mathbb{K}, \mathbb{B}_{\mathrm{I}}] \\ &+ \frac{1}{2!}[\mathbb{K}, [\mathbb{K}, \mathbb{B}_{\mathrm{I}}]] - + \cdots. \end{aligned} \tag{2.5}$$

Mit Hilfe der Definition

$$[\mathbb{K}, \mathbb{B}]^{(n)} = \underbrace{[\mathbb{K}, [\mathbb{K}, [\mathbb{K}, \ldots, [\mathbb{K}}_{n\text{-mal}}, \mathbb{B}] \ldots] \tag{2.6}$$

kann man (2.5) zusammenfassen:

$$\begin{aligned} \overline{\mathbb{B}} &= \mathbb{B}_0 + \mathbb{B}_{\mathrm{I}} + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{1}{n!} \cdot \left\{\frac{n}{n+1}[\mathbb{K}, \mathbb{B}_0]^{(n+1)} + [\mathbb{K}, \mathbb{B}_{\mathrm{I}}]^{(n)}\right\} \\ &= [\mathbb{K}, e^{-\mathbb{K}}\,\mathbb{B}_0\, e^{\mathbb{K}}] + e^{-\mathbb{K}}(\mathbb{B}_0 + \mathbb{B}_{\mathrm{I}})\, e^{\mathbb{K}}. \end{aligned} \tag{2.7}$$

Wir beschränken uns hier auf die einfache Näherung [6]

$$\begin{aligned} \overline{\mathbb{B}} &\approx \mathbb{B}_0 + \mathbb{B}_{\mathrm{I}} - [\mathbb{K}, \mathbb{B}_{\mathrm{I}}] - \tfrac{1}{2}[\mathbb{K}, [\mathbb{K}, \mathbb{B}_0]] \\ &= \mathbb{B}_0 + \mathbb{B}_{\mathrm{I}} - [\mathbb{K}, \mathbb{B}_{\mathrm{I}}] - \tfrac{1}{2}[\mathbb{K}, \mathbb{B}_{\mathrm{II}}]. \end{aligned} \tag{2.8}$$

Nach den Erläuterungen von Arbeit (I) ist von besonderem Interesse der „Einteilchenanteil", den wir durch Einschieben des Projektors

$$\mathbb{P}_1 = \int d^3x\, u^+(\boldsymbol{x})\,|\,0)(0\,|\,u(\boldsymbol{x}) \tag{2.9}$$

in die Funktionalgleichung (2.2) erhalten. Für die Näherung (2.8) ergibt sich dann

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_1\,\overline{\mathbb{B}}\,\mathbb{P}_1\,|\overline{\Phi}) &= \mathbb{P}_1\,(\mathbb{B}_0 + \mathbb{B}_{\mathrm{I}} - [\mathbb{K}, \mathbb{B}_{\mathrm{I}}] \\ &\quad - \tfrac{1}{2}[\mathbb{K}, \mathbb{B}_{\mathrm{II}}])\,\mathbb{P}_1\,|\overline{\Phi}) \\ &= \omega\,\mathbb{P}_1\,|\overline{\Phi}). \end{aligned} \tag{2.10}$$

Aus den Erläuterungen des folgenden Paragraphen geht hervor, daß dabei der Anteil $\mathbb{P}_1\,[\mathbb{K}, \mathbb{B}_{\mathrm{I}}]\,\mathbb{P}_1$

verschwindet, so daß wir es in der Näherung (2.8) lediglich mit

$$\mathbb{P}_1(\mathbb{B}_0+\mathbb{B}_{\mathrm{I}}-\tfrac{1}{2}[\mathbb{K},\mathbb{B}_{\mathrm{II}}])\,\mathbb{P}_1\,|\overline{\Phi}) = \omega\,\mathbb{P}_1\,|\overline{\Phi}) \tag{2.11}$$

zu tun haben.

§ 3. Berechnung des Operators $\mathbb{K}$

Aus der Bestimmungsgleichung (2.4) und der Diagonalgestalt von $\mathbb{B}_0$ (1.34) geht hervor, daß $\mathbb{K}$ dieselbe Struktur wie $\mathbb{B}_{\mathrm{II}}$ haben muß:

$$\mathbb{K}=\mathbb{K}_1^{(\mathrm{a})}+\mathbb{K}_1^{(\mathrm{b})}+\mathbb{K}_{-1}^{(0)}+\mathbb{K}_{-1}^{(\mathrm{a})} + \mathbb{K}_{-1}^{(\mathrm{b})}+\mathbb{K}_{-2}^{(\mathrm{b})}. \tag{3.1}$$

Hier sind die $\mathbb{K}_x^{(0,\mathrm{a},\mathrm{b})}$ Operatoren der Gestalt (1.29)—(1.31). Aus der Tatsache, daß in dieser Aufzählung kein Diagonalblockglied enthalten ist, erklärt sich das zum Schluß des vorhergehenden Paragraphen angesprochene Verschwinden von $\mathbb{P}_1\,[\mathbb{K}_1,\mathbb{B}_{\mathrm{I}}]\mathbb{P}_1$. Für die Berechnung der $\mathbb{K}_x^{(0,\mathrm{a},\mathrm{b})}$ ist wesentlich, daß die zugehörigen Matrixelemente $\hat{K}_x^{(0,\mathrm{a},\mathrm{b})}$ in gleicher Weise wie $\hat{B}_0$ nach dem vollständigen Funktionalsystem $\chi_i(\boldsymbol{x})$ entwickelt werden können. Zu diesem Zweck stellen wir die in (I, 7.2)—(I, 7.7) angegebenen Hilfsmittel nochmals zusammen. Es sei

$$\hat{I}_i^{(+)}(\boldsymbol{x})=\chi_i(\boldsymbol{x})\,\hat{I}^{(+)};\quad \hat{I}_i^{(-)}(\boldsymbol{x})=\chi_i^*(\boldsymbol{x})\,\hat{I}^{(-)} \tag{3.2}$$

mit

$$\hat{I}^{(+)}=U^+\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}U;\quad \hat{I}^{(-)}=U^+\begin{pmatrix}0&0\\0&1\end{pmatrix}U;\quad \hat{I}=\hat{I}^{(+)}+\hat{I}^{(-)}. \tag{3.3}$$

Offensichtlich sind diese Größen Projektoren; für sie gilt

$$\hat{I}^{(+)}\hat{I}^{(+)}=\hat{I}^{(+)};\quad \hat{I}^{(-)}\hat{I}^{(-)}=\hat{I}^{(-)};\quad \hat{I}^{(+)}\hat{I}^{(-)}=\hat{I}^{(-)}\hat{I}^{(+)}=0. \tag{3.3 a}$$

Weiter definieren wir

$$\hat{A}_i^{(+)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}'):=\hat{I}_i^{(+)}(\boldsymbol{x})\,\hat{I}_i^{(+)}(\boldsymbol{x}')^+;\quad \hat{A}_i^{(-)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}'):=\hat{I}_i^{(-)}(\boldsymbol{x})\,\hat{I}_i^{(-)}(\boldsymbol{x}')^+. \tag{3.4}$$

Es gelten die Relationen

$$(\hat{I}_i^{(\pm)}(\boldsymbol{x}))^T=\hat{I}_i^{(\mp)}(\boldsymbol{x})^+;\quad \hat{A}_i^{(\pm)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')^T=\hat{A}_i^{(\mp)}(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x}), \tag{3.5}$$

$$\int\hat{I}_i^{(+)}(\boldsymbol{x})^+I_{i'}^{(+)}(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}^3x=\delta_{i,i'}\,\hat{I}^{(+)};\quad \int\hat{I}_i^{(-)}(\boldsymbol{x})^+\hat{I}_{i'}^{(-)}(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}^3x=\delta_{i,i'}\,\hat{I}^{(-)};\quad \int\hat{I}_i^{(+)}(\boldsymbol{x})\,\hat{I}_{i'}^{(-)}(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}^3x=0, \tag{3.6}$$

$$\int\hat{I}_i^{(+)}(\boldsymbol{x})^+A_{i'}^{(+)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\,\mathrm{d}^3x = \delta_{i,i'}\,\hat{I}_i^{(+)}(\boldsymbol{x}')^+;\quad \text{usw.} \tag{3.7}$$

Mit (3.4) kann man $\hat{B}_0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$ in (1.34) folgendermaßen schreiben:

$$\hat{B}_0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=\sum_i\varepsilon_i(\hat{A}_i^{(+)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_i') - \hat{A}_i^{(-)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')). \tag{3.8}$$

Die Berechnung der $\mathbb{K}_x^{(0,\mathrm{a},\mathrm{b})}$ sei exemplarisch an $\mathbb{K}_1^{(\mathrm{a})}$ ausführlich dargestellt. Wir machen den Ansatz

$$\mathbb{K}^{(\mathrm{a})}=\iint u(\boldsymbol{x})^T\hat{K}_1^{(\mathrm{a})}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') \cdot u(\boldsymbol{x}')\,\mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x', \tag{3.9}$$

mit

$$\hat{K}_1^{(\mathrm{a})}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=\sum_{\pm\pm}\sum_{i,j}\hat{I}_i^{(\pm)}(\boldsymbol{x}) \cdot K_{ij}^{\pm\pm}\,\hat{I}_i^{(\pm)}(\boldsymbol{x}')^+. \tag{3.10}$$

Die Summe über $\pm\pm$ bedeutet Summation über die vier möglichen Kombinationen

$$\hat{I}_i^{(+)}(\boldsymbol{x})\,K_{ij}^{++}\,\hat{I}_j^{(+)}(\boldsymbol{x}')^+,\quad \hat{I}_i^{(+)}(\boldsymbol{x})\,K_{ij}^{+-}\,\hat{I}_j^{(-)}(\boldsymbol{x}')^+,\ \ldots\quad \text{usw.}$$

Es ist

$$\begin{aligned}\mathbb{D}_1^{(\mathrm{a})}&=[\mathbb{K}_1^{(\mathrm{a})},\mathbb{B}_0]\\ &=\iiint u(\boldsymbol{x})^T(\hat{K}_1^{(\mathrm{a})}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\,\hat{B}_0(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}') - \hat{B}_0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\,\hat{K}_1^{(\mathrm{a})}(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}') \cdot u(\boldsymbol{x}')\,\mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x'\,\mathrm{d}^3y\\ &=\iint u^T(\boldsymbol{x})\,\hat{D}_1^{(\mathrm{a})}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\,u(\boldsymbol{x}')\end{aligned} \tag{3.11}$$

erfüllbar durch die Berechnung von $\hat{K}_1^{(\mathrm{a})}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ aus

$$\begin{aligned}&\int\mathrm{d}^3y\,(\hat{K}_1^{(\mathrm{a})}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\,\hat{B}_0(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}')-\hat{B}_0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\,\hat{K}_1^{(\mathrm{a})}(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}'))=\hat{D}_1^{(\mathrm{a})}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\\ &=\sum_{i,j}\{\hat{I}_i^{(+)}(\boldsymbol{x})\,K_{ij}^{++}\,\hat{I}_j^{(+)}(\boldsymbol{x}')^+(\varepsilon_j-\varepsilon_i)+\hat{I}_i^{(-)}(\boldsymbol{x})\,K_{ij}^{-+}\,\hat{I}_j^{(+)}(\boldsymbol{x}')^+(\varepsilon_j+\varepsilon_i)\\ &\quad-\hat{I}_i^{(+)}(\boldsymbol{x})\,K_{ij}^{+-}\,\hat{I}_j^{(-)}(\boldsymbol{x}')^+(\varepsilon_j+\varepsilon_i)-\hat{I}_i^{(-)}(\boldsymbol{x})\,K_{ij}^{--}\,\hat{I}_j^{(-)}(\boldsymbol{x}')^+(\varepsilon_j-\varepsilon_i)\}.\end{aligned} \tag{3.12}$$

Multipliziert man der Reihe nach von links mit $\hat{I}_k^{(+)}(\boldsymbol{x})^+$ bzw. $\hat{I}_k^{(-)}(\boldsymbol{x})^+$, von rechts mit $\hat{I}_l^{(+)}(\boldsymbol{x}')$ bzw. $\hat{I}_l^{(-)}(\boldsymbol{x}')$ und integriert über $\boldsymbol{x}$ und $\boldsymbol{x}'$, so erhält man die vier Gleichungen

$$\hat{I}^{(\pm)}\,K_{kl}^{\pm\pm}\,\hat{I}^{(\pm)}((\pm\,\varepsilon_l)-(\pm\,\varepsilon_k))=\iint\mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x'\,\hat{I}_k^{(\pm)}(\boldsymbol{x})^+\hat{D}_1^{(\mathrm{a})}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\,\hat{I}_l^{(\pm)}(\boldsymbol{x}). \tag{3.13}$$

Dividiert man durch den jeweiligen Faktor $(\pm\varepsilon_l)-(\pm\varepsilon_k)$, multipliziert wieder von links mit $\hat{I}_k^{(+)}(\boldsymbol{z})$ bzw. $\hat{I}_k^{(-)}(\boldsymbol{z})$, von rechts mit $\hat{I}_l^{(+)}(\boldsymbol{z}')^+$ bzw. $\hat{I}_l^{(-)}(\boldsymbol{z}')^+$, summiert über alle k, l und addiert schließlich die vier Anteile über $\pm$, $\pm$, so entsteht

$$\hat{K}_1^{(\mathrm{a})}(\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}') = -\sum_{\pm\pm}\sum_{kl}\iint \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x'\,\frac{\hat{A}_k^{(\pm)}(\boldsymbol{z},\boldsymbol{x})\,\hat{D}_1^{(\mathrm{a})}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\,\hat{A}_l^{(\pm)}(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{z}')}{(\pm\varepsilon_k)-(\pm\varepsilon_l)}\,; \tag{3.14}$$

$\hat{D}_1^{(\mathrm{a})}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$ entnehmen wir (A.6).

In gleicher Weise gewinnt man

$$\mathbb{K}_1^{(\mathrm{b})} = \iiiint \mathrm{d}^3z\,\mathrm{d}^3z'\,\mathrm{d}^3z''\,\mathrm{d}^3z'''\,u^+(\boldsymbol{z})\,u(\boldsymbol{z}')^T\,\hat{K}_1^{(\mathrm{b})}(\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}',\boldsymbol{z}'',\boldsymbol{z}''')\,u(\boldsymbol{z}'')\,u(\boldsymbol{z}'''), \tag{3.15}$$

wenn man einen entsprechenden Ansatz für $K_1^{(\mathrm{b})}$ macht:

$$\hat{K}_1^{(\mathrm{b})}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x}'',\boldsymbol{x}''') = \sum_{\pm\pm\pm\pm}\sum_{i,i',j,j'} \hat{I}_i^{(\pm)}(\boldsymbol{x})\,\hat{I}_j^{(\pm)}(\boldsymbol{x}')\,K_{ijj'i'}^{\pm\pm\pm\pm}\,\hat{I}_{j'}^{(\pm)}(\boldsymbol{x}'')^+\,\hat{I}_{i'}^{(\pm)}(\boldsymbol{x}''')^+ . \tag{3.16}$$

Das Ergebnis ist

$$\hat{K}_1^{(\mathrm{b})}(\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}',\boldsymbol{z}'',\boldsymbol{z}''') = \frac{1}{2}\sum_{\pm\pm\pm\pm}\sum_{k,k',l,l'}\iint \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x'$$
$$\cdot\,\frac{\hat{A}_k^{(\pm)}(\boldsymbol{z},\boldsymbol{x})\,\hat{E}\,\hat{A}_{k'}^{(\pm)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{z}''')\,\dfrac{e^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\,\hat{A}_l^{(\pm)}(\boldsymbol{z}',\boldsymbol{x}')\,\hat{E}\,\hat{A}_{l'}^{(\pm)}(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{z}'')}{(\pm\varepsilon_k)+(\pm\varepsilon_l)-(\pm\varepsilon_{l'})-(\pm\varepsilon_{k'})}\,. \tag{3.17}$$

Die weiteren Beiträge sind

$$\mathbb{K}_{-1}^{(0,\mathrm{a})} = \iint u^+(\boldsymbol{z})\,\hat{K}_{-1}^{(0,\mathrm{a})}(\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}')\,u^{\#}(\boldsymbol{z}')\,\mathrm{d}^3z\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{z}' \tag{3.18}$$

mit

$$\hat{K}_{-1}^{(0,\mathrm{a})}(\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}') = -\sum_{\pm\pm}\sum_{kl}\iint \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x'\,\frac{\hat{A}_k^{(\pm)}(\boldsymbol{z},\boldsymbol{x})\,\hat{D}_{-1}^{(0,\mathrm{a})}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\,\hat{A}_l^{(\pm)}(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{z}')}{(\pm\varepsilon_k)-(\pm\varepsilon_l)} \tag{3.19}$$

und $\hat{D}_{-1}^{(0)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$ bzw. $\hat{D}_{-1}^{(\mathrm{a})}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$ aus (A.8) und (A.9).

$$\mathbb{K}_{-1}^{(\mathrm{b})} = \iiiint \mathrm{d}^3z\,\mathrm{d}^3z'\,\mathrm{d}^3z''\,\mathrm{d}^3z'''\,u^+(\boldsymbol{z})\,u^+(\boldsymbol{z}')\,\hat{K}_{-1}^{(\mathrm{b})}(\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}',\boldsymbol{z}'',\boldsymbol{z}''')\,u^{\#}(z'')\,u(z''') \tag{3.20}$$

mit

$$\hat{K}_{-1}^{(\mathrm{b})}(\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}',\boldsymbol{z}'',\boldsymbol{z}''') = \frac{1}{2}\sum_{\pm\pm\pm\pm}\sum_{k,k',l,l'}\iiiiint \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x'\,\mathrm{d}^3y\,\mathrm{d}^3y'\,\mathrm{d}^3y'' \tag{3.21}$$
$$\cdot\left\{\frac{\hat{A}_k^{(\pm)}(\boldsymbol{z},\boldsymbol{y})\,\hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x})\,\hat{E}\,\hat{A}_{k'}^{(\pm)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{z}''')\,\dfrac{e^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\,\hat{A}_l^{(\pm)}(\boldsymbol{z}',\boldsymbol{y}')\,\Lambda^{(+)}(\boldsymbol{y}',\boldsymbol{x}')\,\hat{E}\,\hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{x}'\,\boldsymbol{y}'')\,\hat{A}_{l'}^{(\pm)}(\boldsymbol{y}'',\boldsymbol{z}'')}{(\pm\varepsilon_k)+(\pm\varepsilon_l)-(\pm\varepsilon_{l'})-(\pm\varepsilon_{k'})}\right.$$
$$\left.+\frac{\hat{A}_k^{(\pm)}(\boldsymbol{z},\boldsymbol{y})\,\hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x})\,\hat{E}\,\hat{A}_{k'}^{(\pm)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{z}''')\,\dfrac{e^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\,\hat{A}_l^{(\pm)}(\boldsymbol{z}',\boldsymbol{y}')\,\hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{y}',\boldsymbol{x}')\,\hat{E}\,\Lambda^{(+)}(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{y}'')\,\hat{A}_{l'}^{(\pm)}(\boldsymbol{y}'',\boldsymbol{z}'')}{(\pm\varepsilon_k)+(\pm\varepsilon_l)-(\pm\varepsilon_{l'})-(\pm\varepsilon_{k'})}\right\}$$

und schließlich

$$\mathbb{K}_{-2}^{(\mathrm{b})} = \iiiint \mathrm{d}^3z\,\mathrm{d}^3z'\,\mathrm{d}^3z''\,\mathrm{d}^3z'''\,u^+(\boldsymbol{z})\,u^+(z')\,\hat{K}_{-2}^{(\mathrm{b})}(\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}',\boldsymbol{z}'',\boldsymbol{z}''')\,u^{\#}(\boldsymbol{z}'')\,u^{\#}(\boldsymbol{z}''') \tag{3.22}$$

mit

$$\hat{K}_{-2}^{(\mathrm{b})}(\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}',\boldsymbol{z}'',\boldsymbol{z}''') = -\frac{1}{8}\sum_{\pm\pm\pm\pm}\sum_{k,k',l,l'}\int\cdots\int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x'\,\mathrm{d}^3y\,\mathrm{d}^3y'\,\mathrm{d}^3y''\,\mathrm{d}^3y''' \tag{3.23}$$
$$\cdot\left\{\frac{\hat{A}_k^{(\pm)}(\boldsymbol{z},\boldsymbol{y})\hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x})\hat{E}\hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}''')\hat{A}_{k'}^{(\pm)}(\boldsymbol{y}''',\boldsymbol{z}''')\dfrac{e^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\hat{A}_l^{(\pm)}(\boldsymbol{z}',\boldsymbol{y})\hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{y}',\boldsymbol{x}')\hat{E}\hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{y}'')\hat{A}_{l'}^{(\pm)}(\boldsymbol{y}'',\boldsymbol{z}'')}{(\pm\varepsilon_k)+(\pm\varepsilon_l)-(\pm\varepsilon_{l'})-(\pm\varepsilon_{k'})}\right.$$
$$\left.-\frac{\hat{A}_k^{\pm}(\boldsymbol{z},\boldsymbol{y})\hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x})\hat{E}\hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}''')\hat{A}_{k'}^{(\pm)}(\boldsymbol{y}''',\boldsymbol{z}''')\dfrac{e^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\hat{A}_l^{(\pm)}(\boldsymbol{z}',\boldsymbol{y}')\hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{y}',\boldsymbol{x}')\hat{E}\hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{y}'')\hat{A}_{l'}^{(\pm)}(\boldsymbol{y}'',\boldsymbol{z}'')}{(\pm\varepsilon_k)+(\pm\varepsilon_l)-(\pm\varepsilon_{l'})-(\pm\varepsilon_{k'})}\right\}.$$

Mit der Berechnung der einzelnen Anteile zum Operator $\mathbb{K}$ ist es möglich, den Kommutator in (2.11)

$$\mathbb{C} = -\tfrac{1}{2}\,\mathbb{P}_1\,[\mathbb{K}, \mathbb{B}_{\mathrm{II}}]\,\mathbb{P}_1 \tag{3.24}$$

auszuwerten. Hierzu ist für $\mathbb{B}_{\mathrm{II}}$ die Aufteilung (1.27c) und für $\mathbb{K}$ die Aufteilung (3.1) einzusetzen. Da es sich dabei um eine zwar umfangreiche, aber rein formale Rechnung handelt, verzichten wir auf eine detaillierte Schilderung der Rechenschritte und beschränken uns auf die Angabe der Ergebnisse einer Auswertung, die von der Entwicklung der Projektoren (1.13) bzw. (1.14) nach einem vollständigen Einelektronensystem $\chi_i(\boldsymbol{x})$ Gebrauch macht. Da wir uns wie in (I) zunächst nur für die „obere" Gleichung interessieren, welche die Energiedifferenz eines „Einteilchenzustandes" im gestörten Kristall bezüglich des Idealkristalls beschreibt, sei diese durch den Projektor

$$\mathbb{I}^+ = \int u^+(\boldsymbol{x})\,\hat{I}^{(+)}\,u(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}^3x \tag{3.25}$$

aus (3.24) ausgeblendet. Damit verbleibt die Berechnung von

$$\begin{aligned}\mathbb{I}^+\mathbb{C} &= -\tfrac{1}{2}\,\mathbb{I}^+\,\mathbb{P}_1\,[\mathbb{K}_1^{(a)} + \cdots + \mathbb{K}_{-2}^{(b)}, \mathbb{D}_1^{(a)} + \cdots + \mathbb{D}_{-2}^{(b)}]\,\mathbb{P}_1 \\ &= -\tfrac{1}{2}\,\mathbb{I}^+\,\mathbb{P}_1\,\{[\mathbb{K}_1^{(a)} + \mathbb{K}_1^{(b)}, \mathbb{D}_{-1}^{(0)} + \mathbb{D}_{-1}^{(a)} + \mathbb{D}_{-1}^{(b)}] + [\mathbb{K}_{-1}^{(0)} + \mathbb{K}_{-1}^{(a)} + \mathbb{K}_{-1}^{(b)}, \mathbb{D}_1^{(a)} + \mathbb{D}_1^{(b)}]\}\,\mathbb{P}_1\,.\end{aligned} \tag{3.26}$$

§ 4. Abschirmungsbeiträge bei fehlenden Störstellen

Bei fehlenden Störstellen treten die mit (a) indizierten Operatoren nicht auf. (3.26) vereinfacht sich daher zu

$$\mathbb{I}^+\mathbb{C}^{(0)} = -\tfrac{1}{2}\,\mathbb{I}^+\,\mathbb{P}_1\,\{[\mathbb{K}_1^{(b)}, \mathbb{D}_{-1}^{(0)} + \mathbb{D}_{-1}^{(b)}] + [\mathbb{K}_{-1}^{(0)} + \mathbb{K}_{-1}^{(b)}, \mathbb{D}_1^{(b)}]\}\,\mathbb{P}_1\,. \tag{4.1}$$

Die Auswertung führt auf das folgende Ergebnis:

1.

$$\begin{aligned}&-\tfrac{1}{2}\,\mathbb{I}^+\,\mathbb{P}_1\,[\mathbb{K}_1^{(b)}, \mathbb{D}_{-1}^{(0)}]\,\mathbb{P}_1 \\ &= -\tfrac{1}{2}\sum_{kk'll'}\iint\cdots\int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x'\,\mathrm{d}^3y\,\mathrm{d}^3y'\,\mathrm{d}^3z\,\mathrm{d}^3z'\,\frac{1}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k'} + \varepsilon_l - \varepsilon_{l'}}\,\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\,w^+(\boldsymbol{z})\,\chi_k(\boldsymbol{z})\,\chi_k^*(\boldsymbol{x})\,\chi_{k'}(\boldsymbol{x}) \\ &\quad\cdot\{[\chi_{k'}^*(\boldsymbol{y})\,D_0(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}')\,\chi_l(\boldsymbol{y}')\,f_l - f_{k'}\,\chi_{k'}^*(\boldsymbol{y})\,D_0(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}')\,\chi_l(\boldsymbol{y}')]\,\chi_l^*(\boldsymbol{x}')\,\chi_{l'}(\boldsymbol{x}')\,\chi_{l'}^*(\boldsymbol{z}')\,w(\boldsymbol{z}') \\ &\quad - \chi_{k'}^*(\boldsymbol{z}')\,\omega(\boldsymbol{z}')\cdot\chi_{l'}(\boldsymbol{x}')\,[\chi_{l'}^*(\boldsymbol{y})\,D_0(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}')\,\chi_l(\boldsymbol{y}')\,f_l - f_{l'}\,\chi_{l'}^*(\boldsymbol{y})\,D_0(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}')\,\chi_l(\boldsymbol{y}')]\,\chi_l^*(\boldsymbol{x}')\}\,.\end{aligned} \tag{4.2}$$

2.

$$\begin{aligned}&-\tfrac{1}{2}\,\mathbb{I}^+\,\mathbb{P}_1\,[\mathbb{K}_{-1}^{(0)}, \mathbb{D}_1^{(b)}]\,\mathbb{P}_1 \\ &= \sum_{kl}\iiiint \mathrm{d}^3z\,\mathrm{d}^3z'\,\mathrm{d}^3y\,\mathrm{d}^3y'\,\frac{1}{\varepsilon_k - \varepsilon_l}\,w^+(\boldsymbol{z})\,\frac{e^2}{|\boldsymbol{z}-\boldsymbol{z}'|} \\ &\cdot\{\chi_k(\boldsymbol{z})\,[\chi_k^*(\boldsymbol{y})\,D_0(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}')\,\chi_l(\boldsymbol{y}')\,f_l - f_k\,\chi_k^*(\boldsymbol{y})\,D_0(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}')\,\chi_l(\boldsymbol{y}')]\,\chi_l(\boldsymbol{z}')\,w(\boldsymbol{z}') \\ &\quad - w(\boldsymbol{z})\cdot\chi_l(\boldsymbol{z}')\,[\chi_k^*(\boldsymbol{y})\,D_0(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}')\,\chi_l(\boldsymbol{y}')\,f_l - f_k\,\chi_k^*(\boldsymbol{y})\,D_0(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}')\,\chi_l(\boldsymbol{y}')]\,\chi_l^*(\boldsymbol{z}')\}\,.\end{aligned} \tag{4.3}$$

Dabei ist in (4.2) und (4.3) für $D_0(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}')$ der Hartree-Fock-Ausdruck

$$D_0(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}') = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta_y + V_{\mathrm{W}}^0(\boldsymbol{y}) + e^2\sum_i\int \mathrm{d}^3x\,\frac{\chi_i(\boldsymbol{x})\,f_i\,\chi_i^*(\boldsymbol{x})}{|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}|}\right)\delta(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}') - e^2\sum_i\frac{\chi_i(\boldsymbol{y})\,f_i\,\chi_i^*(\boldsymbol{y}')}{|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}'|} \tag{4.4}$$

zu verwenden.

3.

$$\begin{aligned}&-\tfrac{1}{2}\,\mathbb{I}^+\,\mathbb{P}_1\,[\mathbb{K}_1^{(b)}, \mathbb{D}_{-1}^{(b)}]\,\mathbb{P}_1 \\ &= -\tfrac{1}{2}\sum_{kk'll'}\int\cdots\int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x'\,\mathrm{d}^3y\,\mathrm{d}^3z\,\mathrm{d}^3z'\,\frac{g_{k'}\,f_l\,g_{l'} + f_{k'}\,g_l\,f_{l'}}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k'} + \varepsilon_l - \varepsilon_{l'}}\,w^+(\boldsymbol{z})\,\chi_k(\boldsymbol{z})\,\chi_k^*(\boldsymbol{x})\,\chi_{k'}(\boldsymbol{x})\,\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|} \\ &\quad\cdot\{\chi_{k'}^*(\boldsymbol{x}')\,\chi_l(\boldsymbol{x}')\,\chi_l^*(\boldsymbol{y})\,\chi_{l'}(\boldsymbol{y})\,\chi_{l'}^*(\boldsymbol{z}')\,w(\boldsymbol{z}') - \chi_{k'}^*(\boldsymbol{z}')\,w(\boldsymbol{z}')\cdot(\chi_{l'}(\boldsymbol{y})\,\chi_{l'}^*(\boldsymbol{x}')\,\chi_l(\boldsymbol{x}')\,\chi_l^*(\boldsymbol{y}))\}\,\frac{e^2}{|\boldsymbol{z}'-\boldsymbol{x}'|}\,.\end{aligned} \tag{4.5}$$

4.

$$-\tfrac{1}{2}\,\mathbb{I}^+\,\mathbb{P}_1[\mathbb{K}_{-1}^{(\mathrm{b})},\mathbb{D}_1^{(\mathrm{b})}]\,\mathbb{P}_1 = \tfrac{1}{2}\sum_{kk'll'}\int\cdots\int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x'\,\mathrm{d}^3y\,\mathrm{d}^3z\,\mathrm{d}^3z'\,\frac{g_l f_{l'} g_k + f_l g_{l'} f_k}{\varepsilon_l - \varepsilon_{l'} + \varepsilon_k - \varepsilon_{k'}}$$
$$\cdot\frac{e^2}{|\boldsymbol{z}-\boldsymbol{x}'|}\,\{w^+(\boldsymbol{z})\,\chi_l(\boldsymbol{z})\,\chi_l{}^*(\boldsymbol{y})\,\chi_{l'}(\boldsymbol{y})\,\chi_{l'}^*(\boldsymbol{x}')\,\chi_k(\boldsymbol{x}')\,\chi_k{}^*(\boldsymbol{x})\,\chi_{k'}(\boldsymbol{x})\,\chi_{k'}^*(\boldsymbol{z}')\,w(\boldsymbol{z}')$$
$$-\,w^+(\boldsymbol{z})\,\chi_k(\boldsymbol{z})\,\chi_k{}^*(\boldsymbol{x})\,\chi_{k'}(\boldsymbol{x})\,\chi_{k'}^*(\boldsymbol{z}')\,w(\boldsymbol{z}')\cdot(\chi_l(\boldsymbol{x}')\,\chi_{l'}^*(\boldsymbol{y})\,\chi_{l'}(\boldsymbol{y})\,\chi_{l'}^*(\boldsymbol{x}'))\}\,\frac{e^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|}\,. \tag{4.6}$$

(4.6) ist offensichtlich zu (4.5) hermitesch konjugiert. Man erkennt dies, wenn man in (4.6) die Bezeichnungsänderung $k \leftrightarrow k'$, $l \leftrightarrow l'$ und $\boldsymbol{z} \leftrightarrow \boldsymbol{z}'$ vornimmt.

Definiert man

$$\mathbb{T}^+\,\mathbb{P}_1|\overline{\Phi}) =: \int \mathrm{d}^3x\,\varphi(\boldsymbol{x})\,w^+(\boldsymbol{x})\,|\,0)\,, \tag{4.7}$$

so bekommt die Schrödinger-Gleichung (2.11) für das ungestörte Problem die Gestalt

$$\begin{aligned}&\mathbb{I}^+\,\mathbb{P}_1(\mathbb{B}_0 + \mathbb{B}_\mathrm{I} + \mathbb{C}^{(0)})\,\mathbb{P}_1|\overline{\Phi})\\ &= \omega\int \mathrm{d}^3x\,w^+(\boldsymbol{x})\,\varphi(\boldsymbol{x})\,|\,0)\\ &= \iint \mathrm{d}^3z\,\mathrm{d}^3z'\,w^+(\boldsymbol{z})\,(D_0(\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}')\\ &\quad + R_0(\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}'))\,\varphi(\boldsymbol{z}')\,|\,0)\\ &\quad + \mathbb{I}^+(\mathbb{P}_1\,\mathbb{C}^{(0)}\,\mathbb{P}_1 - \mathbb{R}_0)\\ &\quad \cdot\int \mathrm{d}^3x\,w^+(\boldsymbol{x})\,\varphi(\boldsymbol{x})\,|\,0)\,.\end{aligned} \tag{4.8}$$

Man kann nun eine Vereinbarung über die Gestalt von $\mathbb{R}_0$ treffen. Setzt man z.B.

$$\mathbb{R}_0 = 0\,, \tag{4.9}$$

so bedeutet dies die Entwicklung der Abschirmungsbeiträge (4.2)—(4.6) nach den Bloch-Funktionen $\chi_i(\boldsymbol{x})$ des Hartree-Fock-Problems

$$\int D_0(\boldsymbol{z},\boldsymbol{x})\,\chi_i(\boldsymbol{x})\,\mathrm{d}^3x = \varepsilon_i\,\chi_i(\boldsymbol{z})\,. \tag{4.10}$$

Es ist bekannt, daß die Hartree-Fock-Näherung für Metalle keine guten Ergebnisse liefert [7]. Ob die Abschirmungsbeiträge (4.2)—(4.6), die die Rolle von Korrelationsenergien spielen, diese Situation in ausreichendem Maße verbessern, bleibt allerdings einer speziellen Untersuchung vorbehalten.

Eine andere Möglichkeit liegt in der selbstkonsistenten Berechnung der $\chi_i(x)$ durch ein sehr viel komplizierteres Hartree-Fock-Problem, das wir erhalten, wenn wir

$$\mathbb{R}_0 = \mathbb{P}_1\,\mathbb{C}^{(0)}\,\mathbb{P}_1 \tag{4.11}$$

setzen und dadurch den zweiten Anteil von (4.8) zum Verschwinden bringen. Es verbleibt dann die Schrödinger-Gleichung

$$\begin{aligned}&\int B_0(\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}')\,\varphi(\boldsymbol{z}')\,\mathrm{d}^3z := \int(D_0(\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}')\\ &\quad + R_0(\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}'))\,\varphi(\boldsymbol{z}')\,\mathrm{d}^3z' = \omega\,\varphi(\boldsymbol{z})\end{aligned} \tag{4.12}$$

bei der die implizit enthaltenen Energiewerte ε_i mit den Eigenlösungen ω_{vi} zu identifizieren sind. Diese Möglichkeit ist ebenfalls noch nicht erprobt. Es sollte jedoch möglich sein, am einfachen Beispiel des Elektronengases Einblick in die Struktur und die Bedeutung der Abschirmungsglieder (4.2)—(4.6) zu bekommen, so daß wir in nächsten Paragraphen kurz andeuten wollen, welches Problem in diesem Fall zu lösen wäre.

§ 5. Überschuß- und Defektelektron im Elektronengas

Im Fall des Elektronengases vereinfacht sich die Schrödinger-Gleichung (4.12) erheblich. Bekanntlich kompensieren sich in (4.4) das als positiver Ladungshintergrund gewählte Potential $V_\mathrm{W}^0(\boldsymbol{x})$ mit dem nachfolgenden Coulomb-Glied der Elektron-Elektron-Wechselwirkung, sofern man für die Elektronenfunktionen ebene Wellen

$$\chi_l(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\,e^{i\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{x}} \tag{5.1}$$

benützen kann [8], was aufgrund der Translationsinvarianz des Problems selbstverständlich gegeben ist. Es verbleibt damit für $D_0(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}')$ lediglich

$$\begin{aligned}D_0(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}') &= \delta(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}')\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_y\right)\\ &\quad - \frac{e^2}{(2\pi)^3}\sum_l f_l\,\frac{e^{i\boldsymbol{l}\cdot(\boldsymbol{y}'-\boldsymbol{y})}}{|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}'|}\,,\end{aligned} \tag{5.2}$$

wobei im Fall $T = 0$ die Fermi-Verteilung zu

$$f_l = \Theta(\xi - |\boldsymbol{l}|) \tag{5.3}$$

entartet. In (5.3) ist ξ die Fermi-Kante.

Ebenfalls aus Gründen der Translationsinvarianz verschwinden die Ausdrücke (4.2) und (4.3) in $\mathbb{R}_0$.

Denn mit

$$D_0(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}') = D_0(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}') \tag{5.4}$$

ist dort

$$\iint \mathrm{d}^3y\, \mathrm{d}^3y' \left[g_{k'}\, \chi^*_{k'}(\boldsymbol{y})\, D_0(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}')\, \chi_l(\boldsymbol{y}')\, f_l - f_{k'}\, \chi^*_{k'}(\boldsymbol{y})\, D_0(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}')\, \chi_l(\boldsymbol{y}')\, g_l\right] \tag{5.5}$$
$$= \frac{1}{(2\pi)^3}\, (g_{k'} f_l - g_l f_{k'}) \int e^{i(\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{l})\cdot \boldsymbol{y}}\, \mathrm{d}^3y \int \mathrm{d}^3y'\, D_0(\boldsymbol{y}')\, e^{i\boldsymbol{l}\cdot \boldsymbol{y}'} = \delta_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{l}}(g_{k'} f_l - g_l f_{k'}) \int \mathrm{d}^3y'\, D_0(\boldsymbol{y}')\, e^{i\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{y}'} = 0\,.$$

Die Anteile (4.5) und (4.6) kann man auswerten, wenn man für die Coulomb-Wechselwirkungen die Fourier-Entwicklung benützt

$$\frac{1}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|} = \frac{1}{2\pi^2} \int \mathrm{d}^3k\, \frac{e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}')}}{k^2}\,. \tag{5.6}$$

Insgesamt ergibt sich aus dem Schrödinger-Problem (4.12) die Energie für ein Überschuß- bzw. Defektelektron im Elektronengas zu

$$\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - 2\cdot \frac{e^2}{2\pi^2} \int \mathrm{d}^3l\, f_l\, \frac{1}{|\boldsymbol{k} - \boldsymbol{l}|^2}$$
$$- 4\cdot \left(\frac{e^2}{2\pi^2}\right)^2 \iint \mathrm{d}^3l\, \mathrm{d}^3q\, \frac{1}{q^2} \left(\frac{1}{(\boldsymbol{q} - \boldsymbol{k} + \boldsymbol{l})^2} - \frac{1}{q^2}\right) \frac{g_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}\, f_l\, g_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} + f_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}\, g_l\, f_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}}{\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}} - \varepsilon^0_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} + \varepsilon^0_{\boldsymbol{l}} - \varepsilon^0_{\boldsymbol{q}+\boldsymbol{l}}}\,, \tag{5.7}$$

je nachdem, ob sich $\boldsymbol{k}$ außerhalb oder innerhalb der Fermi-See befindet. Die Faktoren 2 und 4 vor dem zweiten bzw. dritten Glied berücksichtigen die Spinentartung.

Bei (5.7) handelt es sich um ein implizites Eigenwertproblem, das man nur iterativ lösen kann. Man wird zunächst die Substitution

$$\varepsilon^0_{\boldsymbol{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \lambda_k{}^0 \tag{5.8}$$

in (5.7) einführen. Das ergibt

$$\lambda^0_{\boldsymbol{k}} = -A_{\boldsymbol{k}} - I_{\boldsymbol{k}} \tag{5.9}$$

mit

$$A_{\boldsymbol{k}} = \frac{e^2}{\pi^2} \int \mathrm{d}^3l\, f_l\, \frac{1}{|\boldsymbol{k} - \boldsymbol{l}|^2} \tag{5.10}$$

und

$$I_{\boldsymbol{k}} = \frac{e^4}{\pi^4} \iint \mathrm{d}^3l\, \mathrm{d}^3q\, \frac{1}{q^2}\left(\frac{1}{(\boldsymbol{q} - \boldsymbol{k} + \boldsymbol{l})^2} - \frac{1}{q^2}\right) \frac{g_{k-q}\, f_l\, g_{l+q} + f_{k-q}\, g_l\, f_{l+q}}{\lambda^0_{\boldsymbol{k}} - \lambda^0_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} + \lambda^0_{\boldsymbol{l}} - \lambda^0_{\boldsymbol{l}+\boldsymbol{q}} + \frac{\hbar^2}{2m}(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{l} - \boldsymbol{q})\cdot \boldsymbol{q}}\,. \tag{5.11}$$

Vernachlässigt man zunächst

$$\lambda := -\lambda^0_{\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k}} + \lambda^0_{\boldsymbol{l}} - \lambda^0_{\boldsymbol{l}+\boldsymbol{q}} \tag{5.12}$$

im Nenner des Integrals (5.11), so wird (5.9) eine nichtlineare Gleichung in λ^0_k. Nach ihrer Lösung kann man versuchen, die vernachlässigten Beiträge (5.12) iterativ zu berücksichtigen. Inwieweit etwa (5.11) mit dem Austauschglied (5.10) zu einer abgeschirmten Wechselwirkung zusammengefaßt werden kann, ist im einzelnen jedoch noch nicht geklärt.

§ 6. Das vollständige Problem einschließlich der Störglieder

Wir wenden uns zunächst der Frage zu, inwieweit das Ergebnis der kanonischen Transformation mit dem Ergebnis des Eliminationsverfahrens in (I) übereinstimmt. Da dort das zur Entwicklung verwendete Funktionensystem aus einem Hartree-Fock-Problem der Form (4.10) stammt, beziehen wir diesen Vergleich auf die Möglichkeit (4.9) und beginnen mit den Ausdrücken (4.2)—(4.6), die ja bei ausgeschalteter wie eingeschalteter Störung der Form nach gleich bleiben. Betrachtet man zunächst (4.5) und vergleicht mit dem entsprechenden Ausdruck (I, 9.6), so erkennt man, daß sie ineinander übergehen, wenn man ε_k mit $\omega - C'$ und k' mit $(\boldsymbol{p}, i)$ identifiziert,

$$\sum_k \chi_k(\boldsymbol{z})\,\chi_k{}^*(\boldsymbol{x}) = \delta(\boldsymbol{z} - \boldsymbol{x}) \tag{6.1}$$

berücksichtigt und den Operator $w^+(\boldsymbol{z})$ wegläßt. Der Faktor $\frac{1}{2}$ wird zu eins ergänzt durch den hermitesch konjugierten Beitrag von (4.6). Natürlich ist C' im Fall fehlender Störstellen gleich Null.

In gleicher Weise erkennt man die Verwandtschaft von (4.2) mit (I, 9.5), wenn man dort $W_{\boldsymbol{p}i,\boldsymbol{l}n} = 0$ setzt und wieder ε_k mit $\omega - C'$, k' mit $(\boldsymbol{p}, i)$ identifiziert. Etwas problematischer ist es, den Zusammenhang zwischen (4.3) und (4.2) zu erkennen, um den Faktor $\frac{1}{2}$ loszuwerden. Es zeigt sich, daß man in (4.2) $\varepsilon_k = \varepsilon_l{}'$ setzen muß, um auf den hermitesch konjugierten Ausdruck von (4.3) zu kommen. Das ist eine erhebliche Spezialisierung, die man nur noch als qualitative Übereinstimmung von (I, 9.5 mit (4.3) interpretieren kann.

Diese Betrachtung für den störungsfreien Fall ist zu ergänzen durch die Diskussion der Glieder, die durch eingeschaltete Störungen hinzukommen:

$$\begin{aligned}\mathbb{I}^+\mathbb{C}^{(\mathrm{a})} = -\tfrac{1}{2}\,\mathbb{I}^+\mathbb{P}_1\{&[\mathbb{K}_1^{(\mathrm{b})}, \mathbb{D}_{-1}^{(\mathrm{a})}] + [\mathbb{K}_{-1}^{(\mathrm{a})}, \mathbb{D}_1^{(\mathrm{b})}] + [\mathbb{K}_1^{(\mathrm{a})}, \mathbb{D}_{-1}^{(0)} + \mathbb{D}_{-1}^{(\mathrm{a})} + \mathbb{D}_{-1}^{(\mathrm{b})}] \\ &+ [\mathbb{K}_{-1}^{(0)} + \mathbb{K}_{-1}^{(\mathrm{a})} + \mathbb{K}_{-1}^{(\mathrm{b})}, \mathbb{D}_1^{(\mathrm{a})}]\}\,\mathbb{P}_1\,.\end{aligned} \tag{6.2}$$

Hier sind die ersten beiden Kommutatoren die Ergänzung von (4.2) und (4.3) durch

$$\delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}')\,g_k\,\chi_k{}^*(\boldsymbol{x})\,W(\boldsymbol{x})\,\chi_{k'}(\boldsymbol{x})\,f_{k'}$$

in den eckigen Klammern, was erst zum vollen Vergleich mit (I, 9.5) führt. Sie lauten

$$\begin{aligned}-\tfrac{1}{2}\,\mathbb{I}^+\mathbb{P}_1[\mathbb{K}_1^{(\mathrm{b})}, \mathbb{D}_{-1}^{(\mathrm{a})}]\,\mathbb{P}_1 &= -\tfrac{1}{2}\sum_{k,k',l,l'}\int\cdots\int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x'\,\mathrm{d}^3y\,\mathrm{d}^3z\,\mathrm{d}^3z'\,\frac{1}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k'} + \varepsilon_l - \varepsilon_{l'}}\,\frac{e^2}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|} \\ &\cdot w^+(\boldsymbol{z})\,\chi_k(\boldsymbol{z})\,\chi_k{}^*(\boldsymbol{x})\,\chi_{k'}(\boldsymbol{x})\,\{g_{k'}\,\chi_{k'}^*(\boldsymbol{y})\,W(\boldsymbol{y})\,\chi_l(\boldsymbol{y})\,f_l\,\chi_l{}^*(\boldsymbol{x}')\,\chi_{l'}(\boldsymbol{x}')\,\chi_{l'}^*(\boldsymbol{z}')\,w(\boldsymbol{z}') - \chi_{k'}^*(\boldsymbol{z}')\,w(z') \\ &\cdot(\chi_{l'}(x')\,g_{l'}\,\chi_{l'}^*(\boldsymbol{y})\,W(\boldsymbol{y})\,\chi_l(\boldsymbol{y})\,f_l\,\chi_l{}^*(\boldsymbol{x}'))\}\end{aligned} \tag{6.3}$$

und

$$\begin{aligned}-\tfrac{1}{2}\,\mathbb{I}^+\mathbb{P}_1[\mathbb{K}_{-1}^{(\mathrm{a})}, \mathbb{D}_1^{(\mathrm{b})}]\,\mathbb{P}_1 &= \tfrac{1}{2}\sum_{k,l}\iiint \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3x'\,\mathrm{d}^3y\,w^+(\boldsymbol{x})\,\frac{e^2}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|}\,\frac{1}{\varepsilon_k - \varepsilon_l} \\ &\cdot\{\chi_k(\boldsymbol{x})\,g_k\,\chi_k{}^*(\boldsymbol{y})\,W(\boldsymbol{y})\,\chi_l(\boldsymbol{y})\,f_l\,\chi_l{}^*(\boldsymbol{x}')\,w(\boldsymbol{x}') - w(\boldsymbol{x})\cdot(\chi_k(\boldsymbol{x}', g_k\,\chi_k{}^*(\boldsymbol{y})\,W(\boldsymbol{y})\,\chi_l(\boldsymbol{y})\,f_l\,\chi_l{}^*(\boldsymbol{x}'))\}\,.\end{aligned} \tag{6.4}$$

Da es sich bei (6.3) und (6.4) lediglich um die Ergänzungen zu (4.2) und (4.3) für den Störfall handelt, gelten für den Zusammenhang mit (I, 9.5) die gleichen Argumente wie oben.

Zusätzlich haben wir jetzt noch die weiteren Störglieder

$$\begin{aligned}-\tfrac{1}{2}\,\mathbb{I}^+\mathbb{P}_1[\mathbb{K}_1^{(\mathrm{a})}, \mathbb{D}_{-1}^{(0)} + \mathbb{D}_{-1}^{(\mathrm{a})}] &= -\sum_{k,k',l}\int\cdots\int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3y\,\mathrm{d}^3y'\,\mathrm{d}^3z\,\mathrm{d}^3z'\,\frac{1}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}}\,w^+(\boldsymbol{z})\,\chi_l(\boldsymbol{z}) \\ &\cdot[\chi_l{}^*(\boldsymbol{y})\,D_0(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}')\,\chi_k(\boldsymbol{y}')\,f_k - f_l\,\chi_l{}^*(\boldsymbol{y})\,D_0(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}')\,\chi_k(\boldsymbol{y}') + \delta(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}')\,g_l\,\chi_l{}^*(\boldsymbol{y})\,W(\boldsymbol{y})\,\chi_k(\boldsymbol{y})\,f_k] \\ &\cdot\chi_k{}^*(\boldsymbol{x})\,W(\boldsymbol{x})\,\chi_{k'}(\boldsymbol{x})\,\chi_{k'}^*(\boldsymbol{z}')\,w(\boldsymbol{z}') + \sum_{k\,k'}\iiint \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3y\,\mathrm{d}^3y'\,\frac{1}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}}\,[\chi_{k'}^*(\boldsymbol{y})\,D_0(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}')\,\chi_k(\boldsymbol{y}')\,f_k \\ &- f_{k'}\,\chi_{k'}^*(\boldsymbol{y})\,D_0(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}')\,\chi_k(\boldsymbol{y}') + \delta(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}')\,g_{k'}\,\chi_{k'}^*(\boldsymbol{y})\,W(\boldsymbol{y})\,\chi_k(\boldsymbol{y})\,f_k]\,\chi_k{}^*(\boldsymbol{x})\,W(\boldsymbol{x})\,\chi_{k'}(\boldsymbol{x})\end{aligned} \tag{6.5}$$

und

$$\begin{aligned}-\tfrac{1}{2}\,\mathbb{I}^+\mathbb{P}_1[\mathbb{K}_{-1}^{(0)} + \mathbb{K}_{-1}^{(\mathrm{a})}, \mathbb{D}_1^{(\mathrm{a})}] &= \tfrac{1}{2}\sum_{k,k'}\iiiint \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3y\,\mathrm{d}^3y'\,\mathrm{d}^3z\,\frac{1}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}}\,w^+(\boldsymbol{z})\,\chi_k(\boldsymbol{z}') \\ &\cdot[\chi_k{}^*(\boldsymbol{y})\,D_0(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}')\,\chi_{k'}(\boldsymbol{y}')\,f_{k'} - f_k\,\chi_k{}^*(\boldsymbol{y})\,D_0(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}')\,\chi_{k'}(\boldsymbol{y}') + \delta(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}')\,g_k\,W(\boldsymbol{y})\,\chi_{k'}(\boldsymbol{y})\,f_{k'}] \\ &\cdot\chi_{k'}^*(\boldsymbol{x})\,W(\boldsymbol{x})\,w(\boldsymbol{x}) - \tfrac{1}{2}\sum_{k,k'}\iiint \mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3y\,\mathrm{d}^3y'\,\frac{1}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}}\,\chi_{k'}^*(\boldsymbol{x})\,W(\boldsymbol{x})\,\chi_k(\boldsymbol{x}) \\ &\cdot[\chi_k{}^*(\boldsymbol{y})\,D_0(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}')\,\chi_{k'}(\boldsymbol{y}')\,f_{k'} - f_k\,\chi_k{}^*(\boldsymbol{y})\,D_0(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}')\,\chi_{k'}(\boldsymbol{y}') + g_k\,\chi_k^*(\boldsymbol{y})\,W(\boldsymbol{y})\,\chi_{k'}(\boldsymbol{y})\,f_{k'}]\,.\end{aligned} \tag{6.6}$$

Hier läßt sich (6.6) nicht vollständig auf (6.5) zurückführen. Nur jeweils die zweiten, also die skalaren Anteile sind identisch. Jedoch ist die Ähnlichkeit auch der ersten, der Operatoranteile, offensichtlich. Der Zusammenhang von (6.5) mit (I, 9.3) wird vermittelt durch die Identifikation von $k \leftrightarrow \boldsymbol{l}$, n, $k' \leftrightarrow \boldsymbol{l}'$, n' und $l \leftrightarrow \boldsymbol{p}$, i sowie der Einschränkung auf

$$\varepsilon_{pi} = \omega - C' \tag{6.7}$$

in (I, 9.3), so daß sich dieser Ausdruck in (I) wieder als allgemeiner erweist.

Schließlich haben wir noch

$$\begin{aligned} -\tfrac{1}{2}\,\mathbb{I}^+ \mathbb{P}_1 [\mathbb{K}_1^{(a)}, \mathbb{D}_{-1}^{(b)}] &= \tfrac{1}{2} \sum_{k,k',l} \iiiint \mathrm{d}^3x\, \mathrm{d}^3x'\, \mathrm{d}^3y\, \mathrm{d}^3z \, \frac{g_l f_k g_{k'} + f_l g_k f_{k'}}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}} \, \frac{e^2}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|} \\ &\cdot w^+(\boldsymbol{z})\, \chi_l(\boldsymbol{z})\, \chi_l^*(\boldsymbol{x}) \{\chi_k(\boldsymbol{x})\, \chi_k^*(\boldsymbol{y})\, W(\boldsymbol{y})\, \chi_{k'}(\boldsymbol{y})\, \chi_{k'}^*(\boldsymbol{x}')\, w(\boldsymbol{x}') - w(\boldsymbol{x}) \cdot (\chi_k^*(\boldsymbol{y})\, W(\boldsymbol{y})\, \chi_{k'}(\boldsymbol{y})\, \chi_{k'}^*(\boldsymbol{x}')\, \chi_k(\boldsymbol{x})\} \end{aligned} \tag{6.8}$$

und

$$\begin{aligned} -\tfrac{1}{2}\,\mathbb{I}^+ \mathbb{P}_1 [\mathbb{K}_{-1}^{(b)}, \mathbb{D}_1^{(a)}]\, \mathbb{P}_1 &= -\tfrac{1}{2} \sum_{k,k',ll'} \int \cdots \int \mathrm{d}^3x\, \mathrm{d}^3x'\, \mathrm{d}^3y\, \mathrm{d}^3z\, \mathrm{d}^3z' \, \frac{g_k f_{l'} g_l + f_k g_{l'} f_l}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k'} + \varepsilon_l - \varepsilon_{l'}} \\ &\cdot w^+(\boldsymbol{z})\, \chi_k(\boldsymbol{z})\, \chi_k^*(\boldsymbol{x}) \frac{e^2}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|} \{\chi_{l'}(\boldsymbol{x})\, \chi_{l'}^*(\boldsymbol{y})\, W(\boldsymbol{y})\, \chi_l(\boldsymbol{y})\, \chi_l^*(\boldsymbol{x}')\, \chi_{k'}(\boldsymbol{x}')\, \chi_{k'}^*(\boldsymbol{z}')\, w(\boldsymbol{z}') \\ &- \chi_{k'}(\boldsymbol{x})\, \chi_{k'}^*(\boldsymbol{z}')\, w(\boldsymbol{z}')\, (\chi_{l'}^*(\boldsymbol{y})\, W(\boldsymbol{y})\, \chi_l(\boldsymbol{y})\, \chi_l^*(\boldsymbol{x}')\, \chi_{l'}(\boldsymbol{x}'))\} \,. \end{aligned} \tag{6.9}$$

Identifiziert man in (6.9) und (I, 9.4), $l' \leftrightarrow \boldsymbol{l}$, n, $l \leftrightarrow \boldsymbol{l}'$, n', $k \leftrightarrow \boldsymbol{p}$, i und $\varepsilon_{k'}$ mit $(\omega - C')$, so entsprechen sich wieder beide Ausdrücke bis auf den Faktor $\frac{1}{2}$, der durch (6.8) näherungsweise zu eins ergänzt wird. Denn (6.8) entsteht aus (6.9) durch die Bezeichnungsänderung $k \leftrightarrow l$, $k' \leftrightarrow l'$ und der Spezialisierung $\varepsilon_l = \varepsilon_{l'}$.

Insgesamt haben wir dadurch den Nachweis, daß die hier untersuchte kanonische Transformation zwar nicht mit dem Eliminationsverfahren aus (I) identisch ist, aber ihm doch sehr nahe kommt. Beide Verfahren haben ihre Vor- und Nachteile. Während das Eliminationsverfahren auf ein nichtlineares Eigenwertproblem führt, das die Zustandsberechnung mit dynamischen Potentialen gestattet, bringt die kanonische Transformation die Möglichkeit, das vollständige Funktionensystem durch ein Selbstkonsistenzverfahren besser anzupassen, wobei man über das hier geschilderte Vorgehen hinaus gehen und bei starken Störungen, etwa durch eine Aufteilung der Art (1.27d)—(1.27f), schon Störglieder mit einbeziehen kann. Beide Verfahren sind jedoch noch nicht ausreichend erprobt, was weiteren Arbeiten zu entsprechenden Störmodellen vorbehalten sein soll.

Anhang

Aus (I, 5.6)—(I, 5.14) übernehmen wir die Gestalt der Matrixelemente in (1.28)—(1.31). Es ist

$$\hat{D}_0^{(0)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \hat{\Delta} + \hat{V}_{\mathrm{W}}^0(\boldsymbol{x}) + \frac{e^2}{2} \int \mathrm{d}^3y \frac{\hat{E}}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|} \operatorname{Sp}[\hat{E}\, \hat{S}_0(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y})] \right) \delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') - e^2 \frac{\hat{S}_0(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|} \tag{A.1}$$

mit

$$\hat{S}_0(\boldsymbol{x}\, \boldsymbol{x}') = U^+, \begin{pmatrix} S_0(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') & 0 \\ 0 & -S_0(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}) \end{pmatrix} U \tag{A.2}$$

und $S_0(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')$ aus (1.14) ein Hartree-Fock-Operator mit dem Coulomb-Glied

$$\frac{e^2}{2} \int \mathrm{d}^3y \frac{\hat{E}}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|} \operatorname{Sp}[\hat{E}\, \hat{S}_0(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y})]$$

und dem Austauschglied

$$-e^2 \frac{\hat{S}_0(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}')}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|} \,.$$

Weiter ist

$$\hat{D}_0^{(a)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = \hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\,\hat{W}(\boldsymbol{x}') \tag{A.3}$$

mit

$$\hat{W}(\boldsymbol{x}) = \hat{V}_{\mathrm{W}}(\boldsymbol{x}) - \hat{V}_{\mathrm{W}}^0(\boldsymbol{x}) + \hat{V}_{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x}). \tag{A.4}$$

Da $\hat{V}_{\mathrm{w}}(\boldsymbol{x})$ das Potential der Wirtsgitteratome im deformierten Gitter, $\hat{V}_w^0(\boldsymbol{x})$ das Potential im Idealgitter und $\hat{V}_{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x})$ das Potential der Störstellen ist, stellt $\hat{W}(\boldsymbol{x})$ das gesamte Zusatzpotential im gestörten Gitter dar, das durch den Projektor $\hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$ als Ausdruck einer Vielelektronenwechselwirkung abgeschirmt wird. Es ist weiter

$$\begin{aligned}\hat{D}_0^{(b)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x}'',\boldsymbol{x}''') = \frac{e^2}{2}\hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}''')\,\hat{E}\frac{\otimes}{|\boldsymbol{x}'''-\boldsymbol{x}''|}\hat{E}\,\hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x}'') - \hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}''')\,\hat{E}\frac{\otimes}{|\boldsymbol{x}'''-\boldsymbol{x}''|}\\ \cdot\hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x}'')\,\hat{E} + \tfrac{1}{2}\int \mathrm{d}^3y\,[\hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\,\hat{E}\,\hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}') - \hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\,\hat{E}\,\hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}')]\frac{\otimes}{|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}'''|}\hat{E}\,\delta(\boldsymbol{x}''-\boldsymbol{x}''')\end{aligned} \tag{A.5}$$

die Wechselwirkung zwischen abgeschirmten Elektronen, und

$$\hat{D}_1^{(a)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = -\,\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\,\tfrac{1}{2}\,\hat{W}(\boldsymbol{x}), \tag{A.6}$$

$$\hat{D}_1^{(b)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x}'',\boldsymbol{x}''') = -\,\frac{e^2}{2}\,\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}''')\,\frac{\hat{E}\otimes\hat{E}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\,\delta(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}''), \tag{A.7}$$

$$\hat{D}_{-1}^0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = -\tfrac{1}{2}\iint \mathrm{d}^3y\,\mathrm{d}^3y'\,\{\hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\,\hat{D}_0(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}')\,\hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{y}',\boldsymbol{x}') - \hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\,D_0(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}')\,\hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{y}',\boldsymbol{x}')\}, \tag{A.8}$$

$$\hat{D}_{-1}^{(a)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = -\,\tfrac{1}{2}\int \mathrm{d}^3y\,\hat{\Lambda}^{+}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\,\hat{W}(\boldsymbol{y})\,\Lambda^{(-)}(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}'), \tag{A.9}$$

$$\begin{aligned}\hat{D}_{-1}^{(b)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x}'',\boldsymbol{x}''') = -\,\frac{e^2}{2}\int \mathrm{d}^3y\,\Big\{&\hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}''')\,\hat{E}\frac{\otimes}{|\boldsymbol{x}'''-\boldsymbol{y}|}\hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{y})\,\hat{E}\,\hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}'')\\ &+\hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}''')\,\hat{E}\frac{\otimes}{|\boldsymbol{x}'''-\boldsymbol{y}|}\hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{y})\,\hat{E}\,\hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}'')\Big\},\end{aligned} \tag{A.10}$$

$$\begin{aligned}\hat{D}_{-2}^{(b)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x}'',\boldsymbol{x}''') = \frac{e^2}{8}\iint \mathrm{d}^3y\,\mathrm{d}^3y'\,\Big\{&\hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\,\hat{E}\,\hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}''')\frac{\otimes}{|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}'|}\hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{y}')\,\hat{E}\,\hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{y}',\boldsymbol{x}'')\\ &-\hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\,\hat{E}\,\hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}''')\frac{\otimes}{|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}'|}\hat{\Lambda}^{(-)}(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{y}')\,\hat{E}\,\hat{\Lambda}^{(+)}(\boldsymbol{y}',\boldsymbol{x}'')\Big\}.\end{aligned} \tag{A.11}$$

Der Skalar C' ist schließlich

$$C' = \tfrac{1}{2}\int \mathrm{d}^3x\,\mathrm{Sp}\,[S_0(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})\,\hat{W}(\boldsymbol{x})]. \tag{A.12}$$

[1] F. Wahl u. G. Baumann, Z. Naturforsch. **34a**, 1373 (1979) (wird als (I) zitiert).
[2] H. P. Dürr u. F. Wagner, Nuovo Cim. **10**, 46, 223 (1966).
[3] H. Krauß, Diplomarbeit, Tübingen 1977.
[4] E. Müller, Diplomarbeit, Tübingen 1976.
[5] W. Feist, Diplomarbeit, Tübingen 1979.
[6] Siehe z.B. O. Madelung, Introduction to Solid-State Theory, Springer-Verlag, Berlin 1978, Kap. 3.1.5, S. 110. C. Kittel, Quantum Theory of Solids, John Wiley, New York 1963, Kap. 7, 99, S. 148.
[7] A. Haug, Theoretische Festkörperphysik I, Franz Deuticke, Wien 1964, § 28.
[8] A. L. Fetter u. J. D. Walecka, Quantum Theory of Many-Particle Systems, McGraw-Hill, London 1971, Chapter 3.