Inhaltsverzeichnis

Einleitung

Die Lösung von Vielteilchenproblemen, denen man immer wieder in unterschiedlichsten Bereichen der Physik begegnet, ist stets eine aktuelle Herausforderung für Physiker geblieben. Aufgrund der großen Anzahl von an solchen Problemen beteiligten Variablen ist man in der Regel schon bei recht geringen Teilchenzahlen auf Näherungen angewiesen. Nur für sehr kleine Teilchenzahlen können manchmal Methoden verwendet werden, die — soweit sie im Einzelfall auf lösbare Probleme führen — im Prinzip exakte Resultate liefern. Man denke dabei beispielsweise an die Faddeev–Gleichungen für drei Teilchen oder ihre Erweiterungen auf vier Teilchen. Für sehr große Teilchenzahlen ist dagegen eine statistische Betrachtungsweise in der Regel ausreichend. Die Vielteilchentheorie beschäftigt sich mit Teilchenzahlen, die zu groß sind für eine exakte Behandlung, und zu klein für eine statistische.

Eine verbreitete Methode zur Lösung der Eigenwertgleichungen von Vielteilchenoperatoren in der Quantenmechanik ist der Mean–Field–Ansatz der Hartree–Fock–Näherung. Darin wird das Vielteilchenproblem approximativ auf ein Einteilchenproblem abgebildet. Dieser Ansatz, auf zeitabhängige Gleichungen angewendet, führt zum *zeitabhängigen* Hartree–Fock–Verfahren (Time Dependent Hartree–Fock, TDHF), welches vor allem in der Streutheorie verwendet wird. In der zeitunabhängigen Formulierung der quantenmechanischen Streutheorie begegnet man stattdessen *inhomogenen*, zeitunabhängigen Gleichungen. In Analogie zum Hartree–Fock–Verfahren überträgt die *zeitunabhängige* Mean–Field–Theorie (Time Independent Mean Field, TIMF) den Mean–Field–Ansatz auf die Lösung inhomogener Gleichungen bzw. das Invertieren von Operatoren. Sie wurde für Anwendungen in der Streutheorie entwickelt und stellt ein Variationsverfahren dar, in dessen zugrundeliegendem Funktional die Ein– und Ausgangskanäle explizit angegeben werden. Die inhomogenen Seiten der zu lösenden Variationsgleichungen werden damit durch die Ein– und Ausgangskanäle definiert. Das ältere, zeitabhängige Hartree–Fock–Verfahren (TDHF) hat im Gegensatz zur TIMF Schwierigkeiten bei der Definition der exakten Streukanäle und damit beim quantenmechanischen Konzept von Streuamplitude und Streuquerschnitt. Obwohl die zeitabhängige und zeitunabhängige Formulierung der Streutheorie äquivalent sind und sich im wesentlichen nur durch eine Fouriertransformation unterscheiden, gilt diese Äquivalenz — wegen der Nichtlinearität von Mean–Field–Verfahren — nicht mehr für die Näherungen der TDHF und TIMF, d.h. die TIMF–Lösungen sind nicht die Fouriertransformierten der TDHF–Lösungen.

Als Variationsverfahren geht die TIMF weit über eine störungstheoretische Behandlung hinaus.

Bei Eigenwertproblemen existieren eine Vielzahl von verbesserten Approximationen, die über die Hartree–Fock–Näherung hinausgehen. An erster Stelle ist dabei der Einbau von Teilchen–Loch–Korrelationen durch die Random Phase Approximation (RPA) zu nennen [1, 2, 3]. Das Hauptanliegen der vorliegenden Arbeit ist es nun, ein der RPA entsprechendes Verfahren auch für inhomogene quantenmechanische Vielteilchengleichungen — also das Invertieren von Vielteilchenoperatoren — zu entwickeln und seine praktische Anwendbarkeit zu zeigen.

Wir beginnen dazu im *1. Kapitel* mit einer Darstellung der antisymmetrisierten TIMF. Der Vorteil des Arbeitens mit Einteilchenfreiheitsgraden in einer Mean–Field–Theorie ist das auch bei großen Teilchenzahlen verhältnismäßig einfache Antisymmetrisieren mit Hilfe von Slaterdeterminanten. In Theorien wie der Resonating Group Method (RGM), die Jacobi–Koordinaten verwenden, entsteht dagegen bei etwas größeren Teilchenzahlen durch das Antisymmetrisieren eine nicht mehr handhabbare Anzahl von Termen. Bei der Berechnung einiger streutheoretisch interessanter Größen tauchen Zustände auf, die nicht total, sondern nur innerhalb einzelner Fragmente antisymmetrisiert sind. Dies führt auf spezielle damit verbundene Probleme, vor allem in Gestalt nicht simultan diagonalisierbarer Überlappmatrizen, welche eine wünschenswerte Vereinfachung der TIMF–Gleichungen verhindern. Im *Anhang A* werden diese Schwierigkeiten durch Einführen eines den einzelnen Kanälen zugeordneten „Kanalspins“ gelöst.

Für den Versuch einer Weiterentwicklung der TIMF ist eine Formulierung in zweiter Quantisierung unverzichtbar. Die Entwicklung dieser Formulierung für die TIMF in *Kapitel 2* ist ein Schwerpunkt dieser Arbeit. Die spezielle Komplikation der TIMF besteht dabei im Auftauchen von drei verschiedenen Typen von Matrixelementen mit vier verschieden Slaterdeterminanten. Will man eine möglichst einfache Formulierung finden, so muß man Erzeugungs– und Vernichtungsoperatoren verwenden, welche die vorkommenden Slaterdeterminanten als Quasiteilchenvakuum besitzen. Beim Standard–Hartree–Fock–Verfahren mit nur einer relevanten Slaterdeterminante kommt man mit *einem* Orthogonalsystem von Orbitalen aus, mit deren zugeordneten Erzeugungs– und Vernichtungsoperatoren sich alle Operatoren und Variationen ausdrücken lasssen. Bei der TIMF benötigt man für eine einfache Darstellung *drei* „ineinander verzahnte“ *Bi*orthogonalsysteme. Im *Anhang B* wird gezeigt, wie der Kanalspinformalismus durch die zweite Quantisierung eine einfache Form erhält.

Die Prinzipien der inhomogenen RPA finden sich in *Kapitel 3*. Man ist zunächst versucht, verschiedene Ansätze, die auf die Standard–RPA führen, direkt auf inhomogene Gleichungen zu übertragen. So läßt sich die homogene Standard–RPA beispielsweise gewinnen aus der Methode der Bewegungsgleichungen [4, 5], aus der Gaussian Overlap Approximation (GOA) im Rahmen der Generator Coordinate Method (GCM) [6, 7, 8, 9], als erste Stufe einer Boson–Entwicklung [10, 11] oder aus der Aufsummation von Ringdiagrammen wie in der e^S–Methode [12, 13, 14]. Dabei stößt man jedoch auf eine Schwierigkeit. Das Nähern der beteiligten Vielteilchenoperatoren durch Einteilchenoperatoren führt in der homogenen RPA auf ein Eigenwertproblem für Einteilchenoperatoren im Fockraum, welche durch die entsprechende Eigenwertgleichung im Einteilchenraum gelöst wird. Bei inhomogenen Gleichungen wird man dagegen auf die Inversion eines Einteilchenoperators im Fockraum geführt, und dies ist in der Praxis im allgemeinen *kein* lösbares Problem. Deshalb wird im ersten Abschnitt des dritten Kapitels mit einer Umformulierung des inhomogenen Problems in ein homogenes begonnen. Es wird gezeigt, wie eine Inversion im Fockraum zurückgeführt werden kann auf die Inversion einer komplexwertigen Funktion, welche sich aus der Lösung eines homogenen Problems ergibt. Dadurch erweist sich — bis auf die weiterhin notwendige Inversion einer komplexwertigen Funktion — die Äquivalenz der TIMF mit einer nichthermitischen Hartree–Fock–Rechnung. Im zweiten Abschnitt des dritten Kapitels wird gezeigt, daß sich die hermitische Standard–RPA auf den nichthermitischen Fall verallgemeinern läßt. Die Interpretation der hermitischen RPA als *unitäre kanonische Transformation* verallgemeinert sich bei der nichthermitischen RPA zu der einer (*nichtunitären*) kanonischen Transformation.

Das *4. Kapitel* beinhaltet eine erste Anwendung der inhomogenen RPA und die dazu erforderlichen technischen Details. Dabei muß die von der hermitischen RPA abgeleitete Vorgehensweise zur Konstruktion der Teilchenorbitale zu vorgegebenen Lochorbitalen im Falle der inhomogenen RPA noch modifiziert werden, um numerisch durchführbar zu sein. Im verbleibenden *Anhang C* werden die Möglichkeiten und Bedingungen zur Verwendung von Symmetrien in der TIMF systematisch untersucht. In Kapitel 4 wird entsprechend Gebrauch gemacht von diesen selbstkonsistenten Symmetrien.

Kapitel 1

Die zeitunabhängige Mean–Field–Methode (TIMF)

1.1 Grundlagen

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit Näherungslösungen für inhomogene Vielteilchengleichungen, wie sie beispielsweise in der Streutheorie auftreten. Homogene Gleichungen, in Form von Eigenwertgleichungen für einen Hamiltonoperator $\mathcal{H}$, tauchen üblicherweise bei Berechnung von Bindungszuständen auf. Enthält $\mathcal{H}$ dabei nicht nur Einteilchenoperatoren, so ist wegen der großen Zahl der in Vielteilchenwellenfunktionen enthaltenen Variablen eine direkte Lösung solcher Gleichungen in der Regel nicht möglich, und es muß auf Näherungen zurückgegriffen werden. Neben der Störungstheorie sind dazu Variationsverfahren geeignet, wie beispielsweise das auf einem Ritzschen Funktional basierende Hartree-(Fock-)Verfahren. In dieser Standardtechnik werden die in $\mathcal{H}$ enthaltenden Mehrteilchenoperatoren auf Einteilchenoperatoren abgebildet. Für solche Operatoren ist die Lösung im Einteilchen–Hilbertraum bereits hinreichend, um auch die Vielteilchenlösungen zu erhalten. Der Preis dafür sind in diesem Falle nichtlineare Gleichungen, die selbstkonsistent gelöst werden müssen.

Bei der Betrachtung von Streuproblemen wird man hingegen meist auf inhomogene Gleichungen der Gestalt $A|\Psi>=|\chi>$ geführt, wie z.B. auf die in vorliegender Arbeit behandelten Gleichungen

$$(E-\mathcal{H})|\Psi>=|\chi>, \tag{1.1}$$

mit fest vorgegebenen χ, aus deren Lösung Ψ sich Matrixelemente der Resolvente $\mathcal{G}=(E-\mathcal{H})^{-1}$ berechnen lassen, oder

$$(E-\mathcal{H})|\Psi>=V|\chi>, \tag{1.2}$$

woraus sich bei geeigneter Wahl von V als Kanalpotential Matrixelemente von $\Delta T = V'\mathcal{G}V$, dem nichttrivialen Teil der T-Matrix $T = V + V'\mathcal{G}V$, ergeben [15, 16, 17, 18, 19]. Spezielle sich dabei durch die Antisymmetrisierung ergebende Probleme bei der Definition von ΔT werden später diskutiert. Hierbei ist die Resolvente nur ein Beispiel eines Operatorinversen, dessen Matrixelemente bestimmt werden sollen. Es existieren viele weitere Vielteilchen–Inversionsprobleme, wie beispielsweise Faddeevgleichungen für das Dreiteilchenproblem, bei denen die nachfolgend geschilderte Methode anwendbar ist oder bereits angewendet wurde [20]. Die mit dem Hartree-(Fock-)Ansatz (HF) bei Eigenwertproblemen vergleichbare zeitunabhängige Mean-Field-Rechnung (TIMF) ist eine allgemein verwendbare Näherungsmethode zum Invertieren im Fockraum. Im Gegensatz zu Eigenwertproblemen ist bei inhomogenen Gleichungen jedoch bereits das Invertieren einer Summe von Einteilchenoperatoren ein kompliziertes Problem, da das Inverse einen Mehrteilchenoperator darstellt, wie beispielsweise die Resolvente des Operators der kinetischen Energie $(E - \mathcal{T})^{-1} = (E - \sum_i t_i)^{-1}$. Bezüglich der Streutheorie kommt als Schwierigkeit noch die Notwendigkeit von Grenzwertprozessen wie $\mathrm{Im}(E) \to 0$ sowie der Umgang mit nicht quadratintegrablen Wellenfunktionen hinzu. So ist es verständlich, daß die inhomogene Fockraumgleichungen betreffenden Näherungsmethoden nicht soweit entwickelt sind wie ihre homogenen Gegenstücke.

Im weiteren werden wir uns hauptsächlich mit den Gleichungen 1.1 und 1.2 beschäftigen. Die verwendeten Methoden, einschließlich der später eingeführten inhomogenen RPA, lassen sich aber auch auf andere inhomogene Fockraumgleichungen anwenden.

Wir beginnen mit der Berechnung von Matrixelementen $<\chi' \,|\, A^{-1} \,|\, \chi>$ des Inversen eines beliebigen Operators A zwischen beliebigen Wellenfunktionen χ, χ'. Wir denken dabei besonders an die Beispiele von Matrixelementen der Resolvente von $\mathcal{H}$

$$D = <\chi' \,|\, (E - \mathcal{H})^{-1} \,|\, \chi>, \tag{1.3}$$

bzw. nach der Ersetzung $|\, \chi> \to V |\, \chi>$ und $<\chi' \,| \to <\chi' \,| V'$ von Matrixelementen des ΔT-Operators

$$D_{\Delta T} = <\chi' \,|\, V'(E - \mathcal{H})^{-1} V \,|\, \chi>, \tag{1.4}$$

wobei χ die Wellenfunktion im Anfangskanal, χ' die Wellenfunktion im Endkanal sowie V und V' die im Anfangs- bzw. Endkanal zwischen den Fragmenten wirksamen „Prior“– bzw. „Post“–Potentiale darstellen sollen. Die Energie E ist dabei komplex mit nichtverschwindendem Imaginärteil anzusetzen und die Resolvente daher ein beschränkter Operator. Später wird dann auch der Limes $\mathrm{Im}(E) \to 0$ durchzuführen sein. Giraud und Nagarajan entwickelten das von zwei Versuchsfunktionen Ψ und Ψ' abhängige Funktional [21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39]

$$F_A(\Psi, \Psi') = <\Psi' \,|\, \chi> + <\chi' \,|\, \Psi> - <\Psi' \,|\, A \,|\, \Psi>, \tag{1.5}$$

oder für die erwähnten Beispiele

$$F(\Psi, \Psi') = <\Psi' \,|\, \chi> + <\chi' \,|\, \Psi> - <\Psi' \,|\, (E - \mathcal{H}) \,|\, \Psi>, \tag{1.6}$$

und

$$F_{\Delta T}(\Psi, \Psi') =< \Psi' \,|\, V \,|\, \chi > + < \chi' \,|\, V' \,|\, \Psi > - < \Psi' \,|\, (E - \mathcal{H}) \,|\, \Psi > . \quad (1.7)$$

Die Stationaritätsbedingungen werden durch Funktionalableitung nach den Versuchsfunktionen gewonnen, also z.B. bei uneingeschränkter Variation

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\delta F}{\delta < \Psi' \,|} = |\, \chi > -(E - \mathcal{H})|\, \Psi >, \\ 0 &= \frac{\delta F}{\delta |\, \Psi >} =< \chi' \,| - < \Psi' \,|(E - \mathcal{H}), \end{aligned} \quad (1.8)$$

oder

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\delta F_{\Delta T}}{\delta < \Psi' \,|} = V |\, \chi > -(E - \mathcal{H})|\, \Psi >, \\ 0 &= \frac{\delta F_{\Delta T}}{\delta |\, \Psi >} =< \chi' \,| V' - < \Psi' \,|(E - \mathcal{H}). \end{aligned} \quad (1.9)$$

Darin erkennt man die Gln.1.1 und 1.2. Setzt man die Lösungen

$$|\, \Psi >= \mathcal{G} |\, \chi >, \qquad \text{und} \qquad < \Psi' \,| =< \chi' \,| \mathcal{G}, \text{ bzw.} \quad (1.10)$$

$$|\, \Psi >= \mathcal{G} V |\, \chi > \qquad \text{und} \qquad < \Psi' \,| =< \chi' \,| V' \mathcal{G}, \quad (1.11)$$

in die Funktionale 1.6 oder 1.7 ein, so erhält man die jeweils gewünschten Matrixelemente 1.3 bzw. 1.4, welche damit also den stationären Wert der Funktionale darstellen. Oftmals günstiger ist es, mit den multiplikativen Funktionalen

$$F'(\Psi, \Psi') = \frac{< \Psi' \,|\, \chi >< \chi' \,|\, \Psi >}{< \Psi' \,|\, (E - \mathcal{H}) \,|\, \Psi >}, \quad (1.12)$$

oder

$$F'_{\Delta T}(\Psi, \Psi') = \frac{< \Psi' \,|\, V \,|\, \chi >< \chi' \,|\, V' \,|\, \Psi >}{< \Psi' \,|\, (E - \mathcal{H}) \,|\, \Psi >}, \quad (1.13)$$

zu arbeiten, deren Stationaritätsgleichungen zusätzliche konstante Faktoren vor χ und χ' aufweisen. Da diese sich beim Einsetzen in die Funktionale 1.12 oder 1.13 jedoch wieder herauskürzen, liefern sie auch bei beliebiger Normierung der Ψ, Ψ' die gleichen stationären Werte wie die additiven Funktionale 1.6 oder 1.7. Man verzichtet bei beliebiger Normierung allerdings auf die Gleichheit der drei Faktoren, wie z.B. bei Funktional 1.12 $< \Psi' \,|\, \chi > = < \chi' \,|\, \Psi > = < \Psi' \,|\, (E - \mathcal{H}) \,|\, \Psi >$, die bei Verwendung der Gleichungen 1.8 als zusätzliche Konsistenzbedingung für den stationären Fall nützlich sein können. Insbesondere können Lösungen der Stationaritätsgleichungen 1.8 bzw. 1.9 der additiven Funktionale F, $F_{\Delta T}$ auch in die multiplikativen Funktionale eingesetzt werden. Die Unempfindlichkeit der multiplikativen Funktionale gegenüber den Normen der Ψ, Ψ' macht diese für praktische Anwendungen angenehmer und ist zudem bedeutsam für die spätere Konstruktion einer inhomogenen RPA. Sind als Versuchsfunktionen alle Elemente des Hilbertraumes zugelassen, entsprechen die stationären Werte den exakten. Das Variationsverfahren besteht nun darin, sich auf einen eingeschränkten Versuchsfunktionenraum für die Ψ, Ψ' zu beschränken und die Stationaritätsgleichungen in diesem Raum zu lösen. Durch Einsetzen der erhaltenen Näherungslösungen Φ, Φ' in das Funktional erhält man die Näherungswerte für die Matrixelemente 1.3 oder 1.4. Da die Funktionale an der so erhaltenen Stelle bezüglich Variationen der Versuchsfunktionen stationär sind, sollte der Wert des Funktionals auch bei einem eingeschränkten Raum von Versuchsfunktionen Φ', Φ noch gut sein [40]. Im Unterschied zum Hartree-(Fock-)Verfahren für den Grundzustand handelt es sich bei den stationären Punkten der Funktionale jedoch um keine Minima, sondern um Sattelpunkte. Dies hat den Nachteil, daß nicht das in HF-Rechnungen gebräuchliche Minimumkriterium zur Auswahl der besten aus mehreren eventuell zur Verfügung stehenden Näherungen verwendet werden kann. Auf der anderen Seite jedoch haben Sattelpunkte gegenüber Minima den Vorteil, daß Abweichungen der Versuchsfunktionen von den exakten Lösungen in verschiedenen Richtungen sich aufgrund verschiedenen Vorzeichens teilweise gegenseitig kompensieren können und die Sattelpunktswerte damit verbessern.

Der Versuchsfunktionenraum kann beliebig gewählt werden. Ursprünglich wurden Linearkombinationen fest vorgegebener Funktionen

$$|\,\Phi>=\sum_i a_i|\,\Phi_i>, \text{ und } <\Phi'\,|=\sum_i <\Phi_i\,|a_i', \tag{1.14}$$

benutzt [24]. Die daraus folgenden Stationaritätsgleichungen sind linear und äquivalent einer Lösung des Problems im Unterraum der Φ_i. Bei Anwendungen in der Streutheorie werden hierbei typischerweise die Kanalwellenfunktionen χ, χ' durch quadratintegrable Wellenpakete angenähert, so daß auch die Φ, Φ' in der Regel quadratintegrabel und numerisch problemlos zu behandeln sind. Wie man daraus die exakten Kanalwellenfunktionen als ebene bzw. Coulomb–Welle wieder näherungsweise erhalten kann, wird weiter unten besprochen. Später wurden dann Produkte von Einteilchenfunktionen [26]

$$|\,\Phi>=\prod_{i=1}^{N}|\,\varphi_i>, \text{ und } <\Phi'\,|=\prod_{i=1}^{N}<\varphi_i'\,|, \tag{1.15}$$

oder Slaterdeterminanten wie beim HF–Verfahren verwendet [32]

$$|\,\Phi>=\sqrt{N!}\mathcal{A}\prod_{i=1}^{N}|\,\varphi_i>, \text{ und } <\Phi'\,|=\sqrt{N!}\left(\prod_{i=1}^{N}<\varphi_i'\,|\right)\mathcal{A}, \tag{1.16}$$

mit dem Antisymmetrisierer $\mathcal{A}$. Die Stationaritätsgleichungen werden dann nichtlinear und müssen selbstkonsistent gelöst werden. Es sind daher, wie oft bei nichtlinearen Gleichungen, mehrere konkurrierende Lösungen zu erwarten. Da, wie erwähnt, ein Minimumkriterium nicht zur Verfügung steht, müssen andere Methoden verwendet werden, um die physikalische Lösung auszusondern. Für χ, χ' eignen sich dabei am besten Produktfunktionen oder im antisymmetrisierten Fall Slaterdeterminanten. Die so aus den Funktionalen 1.6, 1.7, 1.12 oder 1.13 unter Verwendung von Produkten oder Slaterdeterminanten als Versuchs– und Kanalwellenfunktionen selbstkonsistent zu lösende Theorie bezeichnet man als zeitunabhängige Mean–Field–Theorie (TIMF). Dieser Name wurde in Anlehnung an das zeitabhängige Hartree–Fock–Verfahren (TDHF) gewählt, welches lange Zeit für Vielteilchenstreuprobleme verwendet wurde [41, 42]. Ein Problem der TDHF war lange Zeit das Fehlen einer sauberen Definition der Kanalzustände. Dieses Problem wurde zwar in [43] gelöst, aber auf Kosten komplizierter, in der Zeit nichtlokaler Gleichungen, von denen dem Verfasser dieser Arbeit keine konkrete Anwendung bekannt ist. Die TIMF arbeitet mit den Einteilchenkoordinaten, also nicht, wie z.B. die Resonating Group Method (RGM) [44, 45, 46], in Jacobi–Koordinaten. So kann ein Produkt von rein auslaufenden Einteilchenwellen, wie es z.B. bei $\mathcal{G}_{TIMF} = \prod_i g_i$, $g_i = (\eta_i - h_i)^{-1}$ im Falle 1.15 als TIMF–Lösung auftritt, durchaus auch geringe einlaufende Anteile enthalten, und es muß eventuell auf scharfe Relativkoordinaten projiziert werden. Im Vergleich zu den (linearen) RGM–Rechnungen besitzt die TIMF aber den Vorteil, einen wesentlich größeren Versuchsfunktionenraum zu benutzen und außer dem Anfangs– und Endkanal keine weiteren offenen Kanäle explizit mitnehmen zu müssen. Die TIMF existiert ebenfalls in einer antisymmetrisierten Fassung, wobei die dabei auftretenden Slaterdeterminanten wesentlich einfacher zu handhaben sind als die bei etwas größerer Teilchenzahl aus der Antisymmetrisierung entstehende riesige Zahl von Termen bei der RGM. Im Gegensatz zu dieser kann die TIMF deshalb auch bei hohen Energien, also vielen offenen Kanälen, und großer Teilchenzahl angewendet werden.

Es seien nun die Mean–Field–Gleichungen für $\mathcal{G}$ im nicht antisymmetrisierten Fall hergeleitet. Wenn wir Zweikörperkräfte zwischen N Teilchen annehmen, bekommt der Hamiltonoperator die Gestalt

$$\mathcal{H} = \mathcal{T} + \mathcal{V} = \sum_i^N t_i + \sum_{i>j=1}^N v_{ij}, \tag{1.17}$$

mit $v_{ij} = v$. Das additive Funktional mit den Produktversuchsfunktionen 1.15 und analogen Kanalfunktionen

$$|\,\chi> = \prod_i |\,\chi_i>, \text{ und } <\chi'\,| = \prod_i <\chi_i'\,|, \tag{1.18}$$

hat dann die Form:

$$\begin{aligned} F &= \prod_i <\varphi_i'\,|\,\chi_i> + \prod_i <\chi_i'\,|\,\varphi_i> \\ &- E\prod_i <\varphi_i'\,|\,\varphi_i> + \sum_i <\varphi_i'\,|\,t_i\,|\,\varphi_i> \prod_{j\neq i} <\varphi_j'\,|\,\varphi_j> \\ &+ \sum_{i>j} <\varphi_i'\varphi_j'\,|\,v_{ij}\,|\,\varphi_i\varphi_j> \prod_{k\neq i,j} <\varphi_k'\,|\,\varphi_k>\,. \end{aligned} \tag{1.19}$$

Die Stationaritätsbedingungen führen auf „inhomogene Hartree–Gleichungen“

$$\begin{aligned} (\eta_i - h_i)|\,\varphi_i\!> &= \lambda_i|\,\chi_i\!>, \\ <\!\varphi_i'\,|(\eta_i - h_i) &= \lambda_i' <\!\chi_i'\,|. \end{aligned} \tag{1.20}$$

Darin sind die η_i komplexe Selbstenergien

$$\eta_i = E - \sum_{j\neq i} \frac{<\!\varphi_j'\,|\,t_j\,|\,\varphi_j\!>}{<\!\varphi_j'\,|\,\varphi_j\!>} - \sum_{\substack{k>j\\ j,k\neq i}} \frac{<\!\varphi_j'\varphi_k'\,|\,v_{jk}\,|\,\varphi_j\varphi_k\!>}{<\!\varphi_j'\,|\,\varphi_j\!><\!\varphi_k'\,|\,\varphi_k\!>}, \tag{1.21}$$

und die $h_i = t_i + U_i$ Einteilchen–Hamiltonoperatoren mit dem Mean–Field–Potential

$$U_i = \sum_{j\neq i} \frac{<\cdot\,\varphi_j'\,|\,v_{ij}\,|\,\cdot\,\varphi_j\!>}{<\!\varphi_j'\,|\,\varphi_j\!>}. \tag{1.22}$$

Die Punkte stellen dabei Platzhalter für Hilbertraumvektoren dar, zwischen denen die Matrixelemente von U_i berechnet werden sollen. Da die Selbstenergien und Potentiale U_i invariant unter Umnormierungen der φ_i, φ_i' sind, kann man die beiden ursprünglichen $\lambda_i = \prod_{j\neq i} <\!\varphi_j'\,|\,\chi_j\!>$ und $\lambda_i' = \prod_{j\neq i} <\!\chi_j'\,|\,\varphi_j\!>$ bei Einsetzen in das multiplikative Funktional F' gleich 1 setzen.

Die Mean–Field–Approximation überführt das lineare, eindeutig lösbare Vielteilchenproblem in ein nichtlineares Einteilchenproblem, mit eventuell vielen möglichen Lösungen, aus denen die physikalische auszuwählen ist. Da bekannt ist, daß die Mean–Field–Lösung $\varphi_i = \chi_i/E$ und $\varphi_i' = \chi_i'/E$, für $\mathrm{Im}(E) \to \infty$ gleich der eindeutigen exakten wird [33], wird in numerischen Rechnungen im allgemeinen bei einem großen Imaginärteil der Energie begonnen und die dort erhaltene Lösung bis zur reellen E–Achse verfolgt. In mehreren numerischen Untersuchungen mit analytisch lösbaren Modellen [31, 33, 35, 36], bei denen die ganze Lösungsvielfalt überblickt werden kann, wurden Kriterien zur Auswahl der physikalischen Lösung aufgestellt, und insbesondere erwies sich dabei der Weg von $\mathrm{Im}(E)$ weit off–shell nach on–shell als gangbar, da dabei keine Kreuzungspunkte oder Bifurkationen auftraten. Die TIMF wurde bisher an verschiedenen 2–, 3– und 4–Teilchenmodellen mit der exakten Lösung verglichen und zeigte dabei jeweils sehr gute Übereinstimmungen [29, 31, 33, 37, 38, 47].

Bei Betrachtung von Matrixelementen von ΔT mit Hilfe des Funktionals $F_{\Delta T}$ ergeben sich offensichtlich nur Änderungen auf den rechten Seiten der inhomogenen TIMF–Gleichungen [26]. Wir schreiben die „Prior“– und „Post“–Potentiale, die nur zwischen den Fragmenten wirken sollen, als

$$\begin{aligned} V &= \sum_{i>j} \rho_{ij} v_{ij}\,, \\ V' &= \sum_{i>j} \rho_{ij}' v_{ij}\,, \end{aligned} \tag{1.23}$$

mit Hilfe der Matrizen ρ_{ij}, ρ_{ij}', die 1 sind, falls die Orbitale i, j zu verschiedenen Fragmenten im Eingangs– bzw. Ausgangskanal gehören, und sonst verschwinden. Damit erhalten wir

$$\begin{aligned}\frac{\delta < \Phi' \,|\, V \,|\, \chi >}{\delta < \varphi_i' \,|} &= \lambda_i \,(\omega_i + S_i)) \,|\, \varphi_i > , \\ \frac{\delta < \chi' \,|\, V' \,|\, \Phi >}{\delta |\, \varphi_i >} &= < \varphi_i' \,|\, (\omega_i' + S_i') \,\lambda_i' ,\end{aligned} \tag{1.24}$$

mit den Kanalselbstenergien ω_i, ω_i'

$$\begin{aligned}\omega_i &= \sum_{\substack{j>k \\ j,k\neq i}} \rho_{jk} \frac{< \varphi_j' \varphi_k' \,|\, v_{jk} \,|\, \chi_j \chi_k >}{< \varphi_j' \,|\, \chi_j >< \varphi_k' \,|\, \chi_k >} , \\ \omega_i' &= \sum_{\substack{j>k \\ j,k\neq i}} \rho_{jk}' \frac{< \chi_j' \chi_k' \,|\, v_{jk} \,|\, \varphi_j \varphi_k >}{< \chi_j' \,|\, \varphi_j >< \chi_k' \,|\, \varphi_k >} ,\end{aligned} \tag{1.25}$$

und Mean–Field–Kanalpotentialen S_i, S_i'

$$\begin{aligned}S_i &= \sum_j \rho_{ij} \frac{< \cdot\ \varphi_j' \,|\, v \,|\ \cdot\ \chi_j >}{< \varphi_j' \,|\, \chi_j >} , \\ S_i' &= \sum_j \rho_{ij}' \frac{< \cdot\ \chi_j' \,|\, v \,|\ \cdot\ \varphi_j >}{< \chi_j' \,|\, \varphi_j >} ,\end{aligned} \tag{1.26}$$

aber unveränderten λ_i, λ_i'

$$\lambda_i = \frac{< \Phi' \,|\, \chi >}{< \varphi_i' \,|\, \chi_i >} \quad \text{und} \quad \lambda_i' = \frac{< \chi' \,|\, \Phi >}{< \chi_i' \,|\, \varphi_i >} . \tag{1.27}$$

Auch hier kann man einen Fall finden, bei dem die TIMF exakt wird [48], und demzufolge eine ähnliche Lösungsprozedur verfolgen wie bei Berechnung vom $\mathcal{G}$–Matrixelementen. Erfolgreiche Anwendungen der TIMF auf den ΔT–Operator finden sich in [26, 32, 39].

1.2 Antisymmetrisierte TIMF

Die Verwendung von Slaterdeterminanten 1.16 als Versuchsfunktionen führt zu einer antisymmetrisierten TIMF. In der Streutheorie tritt in diesem Fall bei der Definition der T–Matrix ein besonderes Problem auf. Betrachten wir eine Kollision zweier Fragmente $a + b \rightarrow c + d$ zwischen insgesamt N–Nukleonen und jeweils N_a, N_b, N_c, N_d in den Fragmenten a, b, c, d. Die Definition der „Prior“– und „Post“–Potentiale

$$\begin{aligned}V &= \sum_{i\epsilon a, j\epsilon b} v_{ij} , \\ V' &= \sum_{i\epsilon c, j\epsilon d} v_{ij} ,\end{aligned} \tag{1.28}$$

setzt die Unterscheidbarkeit von Teilchen aus unterschiedlichen Fragmenten voraus, was für asymptotisch unendlich weit entfernte Wellenpakete zulässig ist [49]. Wir definieren die Antisymmetrisierer

$$\mathcal{A} = \frac{1}{N!}\sum_{\mathcal{P}}(-1)^{\mathcal{P}}\mathcal{P}\,,\ \mathrm{mit}\,\mathcal{A}^2 = \mathcal{A} \tag{1.29}$$

$$\mathcal{A}_a = \frac{1}{N_a!}\sum_{\mathcal{P}_a}(-1)^{\mathcal{P}_a}\mathcal{P}_a\,,\ \mathrm{mit}\,\mathcal{A}_a^2 = \mathcal{A}_a \tag{1.30}$$

$$\mathcal{A}_b = \frac{1}{N_b!}\sum_{\mathcal{P}_b}(-1)^{\mathcal{P}_b}\mathcal{P}_b\,,\ \mathrm{mit}\,\mathcal{A}_b^2 = \mathcal{A}_b \tag{1.31}$$

$$\mathcal{A}_{ab} = \frac{1}{N_{ab}!}\sum_{\mathcal{P}_{ab}}(-1)^{\mathcal{P}_{ab}}\mathcal{P}_{ab}\,,\ \mathrm{mit}\,\mathcal{A}_{ab}^2 \neq \mathcal{A}_{ab} \tag{1.32}$$

und analog für c, d. Hierbei bezeichnen $\mathcal{P}$ alle Permutationen, $\mathcal{P}_a$ diejenigen innerhalb des Fragments a, entsprechend $\mathcal{P}_b$ für Fragment b, und P_{ab} Permutationen zwischen den Fragmenten a und b, und es gilt $\mathcal{A} = \mathcal{A}_{ab}\mathcal{A}_a\mathcal{A}_b$. Die Kanalwellenfunktionen sind definiert als Produkte der antisymmetrisierten und auf 1 normierten Fragmentwellenfunktionen, die nicht zwischen den Fragmenten antisymmetrisiert sind, wie $\chi = \chi_a\chi_b$, wobei $\mathcal{A}_a\chi_a = \chi_a$ und $\mathcal{A}_b\chi_b = \chi_b$, aber i.a. $\mathcal{A}\chi \neq \chi = \mathcal{A}_a\mathcal{A}_b\chi$ gilt. Die Kanalpotentiale vertauschen aufgrund ihrer Definition 1.28 wohl mit $\mathcal{A}_a$, $\mathcal{A}_b$ oder entsprechend mit $\mathcal{A}_c$, $\mathcal{A}_d$, im allgemeinen aber nicht mit $\mathcal{A}_{ab}$ also auch nicht mit $\mathcal{A}$

$$\begin{aligned} [V, \mathcal{A}_{ab}]_- &\neq 0, \\ [V', \mathcal{A}_{ab}]_- &\neq 0. \end{aligned} \tag{1.33}$$

Um eine Schreibweise zu erhalten, die klar zwischen den jeweils verschieden antisymmetrisierten Zuständen unterscheidet, wird die folgende Notation eingeführt: Reine Produkte von normalisierten Einteilchenorbitalen werden mit runden Klammern, wie $|\chi)$ oder $(\chi|$, gekennzeichnet. Geschwungene Klammern werden für Kanalwellenfunktionen verwendet, die normalisiert und innerhalb der Fragmente a, b, c, d antisymmetrisiert sind:

$$|\chi\} = \sqrt{N_a!N_b!}\,\mathcal{A}_a\mathcal{A}_b|\chi), \tag{1.34}$$

$$\{\chi'| = \sqrt{N_c!N_d!}\,(\chi'|\mathcal{A}_c\mathcal{A}_d. \tag{1.35}$$

Eckige Klammern, wie in $|\,\Phi >$, sind reserviert für vollständig antisymmetrisierte Wellenfunktionen. Aus der Streutheorie [15, 50, 51] ergibt sich damit das Interesse an dem Matrixelement $\{\,\chi'\,|\,(V'\mathcal{A}+V'\mathcal{A}\mathcal{G}V)\,|\,\chi\,\}$ mit nur intern antisymmetrisierten Kanalfunktionen im retardierten On–Shell–Grenzwert $\mathrm{Im}(E) \to 0^+$, bzgl. ΔT also an folgender Zahl

$$D^{anti}_{\Delta T}(E) = \{\,\chi'\,|\,V'\mathcal{A}(E-\mathcal{H})^{-1}V\,|\,\chi\,\}. \tag{1.36}$$

Damit kann nicht direkt mit voll antisymmetrischen $|\chi>$ und $<\chi'|$ gearbeitet werden, was die sich ergebenden TIMF–Gleichungen etwas verkompliziert. Eine Methode diese Schwierigkeit zu umgehen wird im Anhang A vorgestellt. Als Approximation an die exakten Eigenzustände der Kanalhamiltonoperatoren werden intrafragment–antisymmetrisierte Produkte quadratintegrabler Einteilchenwellenfunktionen

$$\begin{aligned} |\,\chi\,\} &= \sqrt{N_a!N_b!}\,\mathcal{A}_a\mathcal{A}_b\prod_i|\,\chi_i>, \\ \{\,\chi'\,| &= \sqrt{N_c!N_d!}\prod_i<\chi_i'\,|\mathcal{A}_c\mathcal{A}_d, \end{aligned} \tag{1.37}$$

verwendet. Die Methode funktioniert aber auch mit allgemeineren χ, χ' solange $V|\,\chi\,\}$ und $\{\,\chi'\,|V'$ quadratintegrabel sind. Bei langreichweitigen Potentialen, wie der Coulombwechselwirkung, muß zu einer „distorted–wave"–Formulierung übergegangen werden [54]. Zur Berechnung von $\mathcal{G}$–Matrixelementen, in denen die Kanalpotentiale V, V' nicht auftauchen, können die TIMF–Funktionale unverändert bleiben, für Matrixelemente von ΔT müssen sie entsprechend modifiziert werden. Die Zahl $D_{\Delta T}^{anti}$ ist stationärer Wert der drei Funktionale [52]

$$F_{\Delta T}^{anti,1}(\Psi,\Psi') = \{\Psi'\mid\mathcal{A}V\mid\chi\}+\{\chi'\mid V'\mid\Psi>-\{\Psi'\mid(E-\mathcal{H})\mid\Psi>, \tag{1.38}$$

$$F_{\Delta T}^{anti,2}(\Psi,\Psi') = <\Psi'\mid V\mid\chi\}+\{\chi'\mid V'\mathcal{A}\mid\Psi\}-<\Psi'\mid(E-\mathcal{H})\mid\Psi\}, \tag{1.39}$$

$$F_{\Delta T}^{anti,3}(\Psi,\Psi') = <\Psi'\mid\mathcal{A}V\mid\chi\}+\{\chi'\mid V'\mathcal{A}\mid\Psi>-<\Psi'\mid(E-\mathcal{H})\mid\Psi>, \tag{1.40}$$

und der entsprechenden multiplikativen Varianten dieser Funktionale. Die Stationaritätsbedingungen bei uneingeschränkter Variation lauten in obiger Reihenfolge

$$\mathcal{A}V|\,\chi\,\}-(E-\mathcal{H})|\,\Psi>=0 \quad , \quad \{\,\chi'\,|V'-\{\,\Psi'\,|(E-\mathcal{H})=0, \tag{1.41}$$

$$V|\,\chi\,\}-(E-\mathcal{H})|\,\Psi\,\}=0 \quad , \quad \{\,\chi'\,|V'\mathcal{A}-<\Psi'\,|(E-\mathcal{H})=0, \tag{1.42}$$

$$\mathcal{A}V|\,\chi\,\}-(E-\mathcal{H})|\,\Psi>=0 \quad , \quad \{\,\chi'\,|V'\mathcal{A}-<\Psi'\,|(E-\mathcal{H})=0. \tag{1.43}$$

Bei komplexem E ist die Resolvente $\mathcal{G}=(E-\mathcal{H})^{-1}$ ein beschränkter, eindeutig definierter Operator, und die Lösungen sind die eindeutig definierten Paare

$$|\,\Psi>=\mathcal{G}\mathcal{A}V|\,\chi\,\} \quad \text{und} \quad \{\,\Psi'\,|=\{\,\chi'\,|V'\mathcal{G}, \tag{1.44}$$

$$|\,\Psi\,\}=\mathcal{G}V|\,\chi\,\} \quad \text{und} \quad <\Psi'\,|=\{\,\chi'\,|V'\mathcal{A}\mathcal{G}, \tag{1.45}$$

$$|\,\Psi>=\mathcal{G}\mathcal{A}V|\,\chi\,\} \quad \text{und} \quad <\Psi'\,|=\{\,\chi'\,|V'\mathcal{A}\mathcal{G}, \tag{1.46}$$

mit den Sattelpunktswerten

$$\hat{F}_{\Delta T}^{anti,1} = 2\{\,\chi'\,|\,V'\mathcal{G}\mathcal{A}V\,|\,\chi\,\}-\{\,\chi'\,|\,V'\mathcal{G}(E-\mathcal{H})\mathcal{G}\mathcal{A}V\,|\,\chi\,\}, \tag{1.47}$$

$$\hat{F}_{\Delta T}^{anti,2} = 2\{\,\chi'\,|\,V'\mathcal{A}\mathcal{G}V\,|\,\chi\,\}-\{\,\chi'\,|\,V'\mathcal{A}\mathcal{G}(E-\mathcal{H})\mathcal{G}V\,|\,\chi\,\}, \tag{1.48}$$

$$\hat{F}_{\Delta T}^{anti,3} = 2\{\,\chi'\,|\,V'\mathcal{A}\mathcal{G}\mathcal{A}V\,|\,\chi\,\}-\{\,\chi'\,|\,V'\mathcal{A}\mathcal{G}(E-\mathcal{H})\mathcal{G}\mathcal{A}V\,|\,\chi\,\}. \tag{1.49}$$

Wegen der Vertauschbarkeit von $\mathcal{A}$ mit $\mathcal{H}$ und $\mathcal{G}$ und der Idempotenz von $\mathcal{A}$ ergibt sich jedesmal der gleiche stationäre Wert $D_{\Delta T}^{anti}$. Bei Verwendung der Funktionale $F_{\Delta T}^{anti,1}$ und $F_{\Delta T}^{anti,2}$ wird nur eine der beiden Versuchsfunktionen als Slaterdeterminante angesetzt, während die andere nach den Gln.1.44 bis 1.46 entsprechend den χ, χ' nur partiell antisymmetrisiert bleibt. Aufgrund des explizit in den Funktionalen auftauchenden Antisymmetrisierers $\mathcal{A}$ sind jedoch auch die dazugehörigen drei stationären Mean–Field–Werte identisch, und wir wählen im weiteren aus Symmetriegründen $F_{\Delta T}^{anti,3}$, welches wir, da Verwechslungen mit dem nicht antisymmetrisierten Fall ausgeschlossen sind, kurz $F_{\Delta T}$ nennen.

Wir berechnen nun die antisymmetrischen TIMF–Gleichungen für $D_{\Delta T}^{anti}$ mit Slaterdeterminanten Φ und Φ' als Versuchsfunktionen und geboosteten Schalenmodell–Kanalfunktionen, wie sie auch als Anfangszustände in der TDHF verwendet werden. Bei Betrachtung der Matrixelemente von $\mathcal{G}$ ändern sich dabei nur die χ, χ' enthaltenden rechten Seiten der nachstehenden Mean–Field–Gleichungen. Dazu werden die Überlappmatrizen $\alpha_{ij} =< \varphi_i'|\chi_j >$, $\alpha_{ij}' =< \chi_i'|\varphi_j >$, $\beta_{ij} =< \varphi_i'|\varphi_j >$ und dazugehörigen Inversen $A_{ij} = (\alpha^{-1})_{ij}$, $A_{ij}' = (\alpha'^{-1})_{ij}$ und $B_{ij} = (\beta^{-1})_{ij}$ benötigt. Die Determinanten der aus den Überlappmatrizen durch Streichen von Spalte i und Zeile j sowie Multiplikation mit $(-1)^{i+j}$ entstehenden Matrizen bilden die Kofaktoren [53]

$$\begin{aligned} M_{ij} &= <\Phi' \,|\, \chi> A_{ji}, & (1.50)\\ M_{ij}' &= <\chi' \,|\, \Phi> A_{ji}', & (1.51)\\ N_{ij} &= <\Phi' \,|\, \Phi> B_{ji}, & (1.52) \end{aligned}$$

und entsprechend entstehen höhere Kofaktoren, wie

$$\begin{aligned} N_{ijlk} &= <\Phi' \,|\, \Phi> \ (B_{ki}B_{lj} - B_{kj}B_{li}) \\ &= <\Phi' \,|\, \Phi>^{-1} (N_{ik}N_{jl} - N_{jk}N_{il}), & (1.53) \end{aligned}$$

(also $N_{ijlk} = -N_{jilk} = -N_{ijkl} \neq \pm N_{lkij}$) oder

$$\begin{aligned} N_{ijknml} = & <\Phi' \,|\, \Phi>^{-2} [N_{il}(N_{jm}N_{kn} - N_{jn}N_{km}) \\ & - N_{im}(N_{jl}N_{kn} - N_{jn}N_{kl}) \\ & + N_{in}(N_{jl}N_{km} - N_{jm}N_{kl})] \,. & (1.54) \end{aligned}$$

Diese Entwicklung höherer Kofaktoren geschieht offensichtlich analog zu der nach Kontraktionen im Wickschen Theorem, und in der Tat ist sie eine spezielle Anwendung davon. Aus der Kofaktorentwicklung der Determinante nach Zeile i

$$\det \beta = \sum_j \beta_{ij} N_{ij} \,, \qquad (1.55)$$

und demzufolge

$$N_{kl} = \sum_j \beta_{ij} N_{kijl} \,, \qquad (1.56)$$

und

$$N_{klmn} = \sum_j \beta_{ij} N_{klijmn} \,, \tag{1.57}$$

folgt für die Ableitungen

$$\begin{aligned} \frac{\delta < \Phi' \,|\, \Phi >}{\delta < \varphi_i' \,|\, \varphi_j >} &= \frac{\delta \det \beta}{\delta < \varphi_i' \,|\, \varphi_j >} = N_{ij} \,, & (1.58) \\ \frac{\delta N_{nm}}{\delta < \varphi_i' \,|\, \varphi_j >} &= N_{nijm} \,, & (1.59) \\ \frac{\delta N_{klnm}}{\delta < \varphi_i' \,|\, \varphi_j >} &= N_{klijnm} \,, & (1.60) \end{aligned}$$

und entsprechendes für die χ_i, oder χ_i' enthaltenden Kofaktoren. Eine Slaterdeterminante ändert sich bei linearen Transformationen l ihrer Orbitale nur um den Faktor $\det l$. Sie ist daher invariant unter linearen Transformationen der Orbitale mit $\det l = 1$, und bei unitären Transformationen bekommt sie höchstens einen Phasenfaktor. Bei Verwendung eines multiplikativen Funktionals ist jede invertierbare lineare Transformation erlaubt, ohne den stationären Wert zu ändern, bei Verwendung eines additiven Funktionals muß der Faktor $\det l$ berücksichtigt werden. Diese Freiheit kann man nutzen, um die Kofaktormatrizen ganz oder teilweise zu diagonalisieren. Denn jede invertierbare Matrix A wird durch Rechts– bzw. Linksmultiplikation mit A^{-1} zur Einheitsmatrix, und daher stellt $l = A^{-1} \det A$ eine entsprechende lineare Transformation der Orbitale dar mit $\det l = 1$. Bei Berechnung von $\mathcal{G}$–Matrixelementen ist dies stets möglich, bzgl. ΔT nur teilweise, solange man keinen Kanalspinformalismus benutzt (siehe Anhang A). Setzen wir wie gewöhnlich einen Hamiltonoperator mit Zweiteilchenpotential gemäß 1.17 voraus, so erhalten wir für die Mean–Field–Funktionale

$$\begin{aligned} &< \Phi' \,|\, (E - \mathcal{H}) \,|\, \Phi >= & (1.61) \\ &\quad E \det \beta - \sum_{ij} N_{ij} < \varphi_i' \,|\, t \,|\, \varphi_j > - \frac{1}{4} \sum_{ijkl} < \varphi_i' \varphi_j' \,|\, v \,|\, \varphi_k \varphi_l > N_{ijlk} \,. \end{aligned}$$

Unter Berücksichtigung von

$$\begin{aligned} < \Phi' | V | \chi \} &= \sqrt{\frac{N_a! N_b!}{N!}} \sum_{\mathcal{P}} (-1)^{\mathcal{P}} (\Phi' | \mathcal{P} V | \chi) \,, & (1.62) \\ \{ \chi' | V' | \Phi > &= \sqrt{\frac{N_c! N_d!}{N!}} \sum_{\mathcal{P}} (-1)^{\mathcal{P}} (\chi' | V' \mathcal{P} | \Phi) \,, & (1.63) \end{aligned}$$

folgt für die „inhomogenen" Terme

$$\begin{aligned} < \Phi' | V | \, \chi \, \} &= \sqrt{\frac{N_a! N_b!}{N!}} \frac{1}{2} \sum_{ij\alpha\beta} < \varphi_i' \varphi_j' \,|\, v \,|\, \chi_\alpha \chi_\beta > M_{ij\beta\alpha} \,, & (1.64) \\ \{ \, \chi' \, | V' | \Phi > &= \sqrt{\frac{N_c! N_d!}{N!}} \frac{1}{2} \sum_{\gamma\delta ij} < \chi_\gamma' \chi_\delta' \,|\, v \,|\, \varphi_i \varphi_j > M'_{\gamma\delta ij} \,, & (1.65) \end{aligned}$$

bzw. bei den $\mathcal{G}$–Funktionalen

$$< \Phi' | \chi \} = \sqrt{\frac{N_a! N_b!}{N!}} \sum_j \alpha_{ij} M_{ij} \, , \tag{1.66}$$

$$\{ \chi' | \Phi > = \sqrt{\frac{N_c! N_d!}{N!}} \sum_j \alpha'_{ij} M'_{ij} . \tag{1.67}$$

Die lateinischen Indizes $i, j, k...$ laufen dabei über alle Teilchen, die griechischen $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ nur über jene aus den entsprechenden Fragmenten a, b, c, d. Die Funktionalableitungen nach den Einteilchenorbitalen φ, φ' lauten

$$\begin{aligned} \frac{\delta < \Phi' | V | \chi \}}{\delta < \varphi'_i |} = \sqrt{\frac{N_a! N_b!}{N!}} \Bigg(& \sum_{j\alpha\beta} < \cdot \, \varphi'_j \mid v \mid \chi_\alpha \chi_\beta > M_{ij\beta\alpha} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{jmn\alpha\beta} < \varphi'_m \varphi'_n \mid v \mid \chi_\alpha \chi_\beta > M_{mnij\beta\alpha} \mid \chi_j > \Bigg) \, , \end{aligned} \tag{1.68}$$

und

$$\begin{aligned} \frac{\delta \{ \chi' | V' | \Phi >}{\delta | \varphi_j >} = \sqrt{\frac{N_c! N_d!}{N!}} \Bigg(& \sum_{i\gamma\delta} < \chi'_\gamma \chi'_\delta \mid v \mid \cdot \, \varphi_i > M'_{\gamma\delta ij} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i\gamma\delta mn} < \chi'_\gamma \chi'_\delta \mid v \mid \varphi_m \varphi_n > M'_{\gamma\delta ijnm} < \chi'_i \mid \Bigg) \, . \end{aligned} \tag{1.69}$$

Dies legt die Definition folgender Mean–Field–Potentiale nahe

$$< \cdot \mid S_b \mid \chi_\alpha > \; = \; < \Phi' \mid \chi >^{-1} \sum_{j\beta} < \cdot \, \varphi'_j \mid v \mid \chi_\alpha \chi_\beta > M_{j\beta}, \tag{1.70}$$

$$< \cdot \mid S_a \mid \chi_\beta > \; = \; < \Phi' \mid \chi >^{-1} \sum_{j\alpha} < \cdot \, \varphi'_j \mid v \mid \chi_\beta \chi_\alpha > M_{j\alpha}, \tag{1.71}$$

$$< \chi'_\gamma \mid S_d \mid \cdot > \; = \; < \chi' \mid \Phi >^{-1} \sum_{\delta i} < \chi'_\gamma \chi'_\delta \mid v \mid \cdot \, \varphi_i > M'_{\delta i}, \tag{1.72}$$

$$< \chi'_\delta \mid S_c \mid \cdot > \; = \; < \chi' \mid \Phi >^{-1} \sum_{\gamma i} < \chi'_\delta \chi'_\gamma \mid v \mid \cdot \, \varphi_i > M'_{\gamma i}. \tag{1.73}$$

Hier ist hervorzuheben, daß S_b nur auf Orbitale aus Fragment a wirkt, während der Index b anzeigt, daß die Summe über β darin nur über Fragment b läuft. Entsprechend wirkt S_a ausschließlich auf Orbitale aus Fragment b. Deshalb können S_a und S_b zu einem dann für alle Orbitale χ_i definierten Potential S zusammengefaßt werden. Vollkommen analog definieren S_c und S_d zusammen S' für den Endkanal. Es verbleiben die Funktionalableitungen

$$\begin{aligned} \frac{\delta < \Phi' \mid (E - \mathcal{H}) \mid \Phi >}{\delta < \varphi'_i \mid} &= \sum_j (E - t) \mid \varphi_j > N_{ij} \\ & - \sum_{jkl} < \varphi'_k \mid t \mid \varphi_l > N_{kijl} \mid \varphi_j > \end{aligned}$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{jkl} < \cdot\ \varphi'_k \mid v \mid \varphi_j \varphi_l > N_{iklj}$$
$$-\ \frac{1}{4}\sum_{jmnkl} < \varphi'_m \varphi'_n \mid v \mid \varphi_k \varphi_l > N_{mnijlk} \mid \varphi_j >, \tag{1.74}$$

und

$$\frac{\delta < \Phi' \,|\, (E-\mathcal{H}) \,|\, \Phi >}{\delta \mid \varphi_j >} = \sum_i < \varphi'_i \mid (E-t) N_{ij}$$
$$-\sum_{ikl} < \varphi'_k \mid t \mid \varphi_l > N_{kijl} < \varphi'_i \mid$$
$$-\frac{1}{2}\sum_{ikl} < \varphi'_i \varphi'_k \mid v \mid \cdot \varphi_l > N_{iklj}$$
$$-\ \frac{1}{4}\sum_{imnkl} < \varphi'_m \varphi'_n \mid v \mid \varphi_k \varphi_l > N_{mnijlk} < \varphi'_i \mid . \tag{1.75}$$

Man entnimmt daraus folgende nichthermitische Mean–Field–Potentiale

$$< \cdot \mid U \mid \varphi_j > \;=\; < \Phi' \mid \Phi >^{-1} \sum_{kl} < \cdot\ \varphi'_k \mid v \mid \varphi_j \varphi_l > N_{kl}, \tag{1.76}$$
$$< \varphi'_i \mid U \mid \cdot > \;=\; < \Phi' \mid \Phi >^{-1} \sum_{kl} < \varphi'_i \varphi'_k \mid v \mid \cdot \varphi_l > N_{kl}. \tag{1.77}$$

Analog den gewöhnlichen antisymmetrisierten Hartree–Fock–Gleichungen hat man auch hier nur ein U, und nicht mehr, wie bei der nicht antisymmetrisierten Theorie, für jedes Orbital ein eigenes U_i. Das gleiche gilt für die selbstkonsistenten Kanalpotentiale S und S'. Durch die Einführung der S, S', U bekommen die Mean–Field–Gleichungen die Gestalt

$$\frac{\delta < \Phi' | V | \chi \}}{\delta < \varphi'_i \mid} =$$
$$\sqrt{\frac{N_a! N_b!}{N!}} < \Phi' \mid \chi > \left[\sum_j \left(S + \sum_{kl} < \varphi'_k \mid \frac{S}{2} \mid \chi_l > A_{lk} \right) \mid \chi_j > A_{ji} \right.$$
$$\left. - \sum_{jkl} < \varphi'_k \mid S \mid \chi_l > A_{li} A_{jk} \mid \chi_j > \right], \tag{1.78}$$

sowie

$$\frac{\delta \{ \chi' | V' | \Phi >}{\delta | \varphi_j >} =$$
$$\sqrt{\frac{N_c! N_d!}{N!}} < \chi' \mid \Phi > \left[\sum_i A'_{ji} < \chi'_i \mid \left(S' + \sum_{kl} < \chi'_k \mid \frac{S'}{2} \mid \varphi_l > A'_{lk} \right) \right.$$
$$\left. - \sum_{ikl} < \chi'_k \mid S' \mid \varphi_l > A'_{li} A'_{jk} < \chi'_i \mid \right], \tag{1.79}$$

und

$$\frac{\delta < \Phi' \,|\, (E - \mathcal{H}) \,|\, \Phi >}{\delta < \varphi_i' \,|} =$$
$$< \Phi' \mid \Phi > \Bigg[\sum_j \Bigg(E - t - U - \sum_{kl} < \varphi_k' \mid (t + \frac{U}{2}) \mid \varphi_l > B_{lk} \Bigg) B_{ji} \mid \varphi_j >$$
$$+ \sum_{jkl} < \varphi_k' \mid (t+U) \mid \varphi_l > B_{li} B_{jk} \mid \varphi_j > \Bigg], \tag{1.80}$$

$$\frac{\delta < \Phi' \,|\, (E - \mathcal{H}) \,|\, \Phi >}{\delta \mid \varphi_j >} =$$
$$< \Phi' \mid \Phi > \Bigg[\sum_i < \varphi_i' \mid B_{ij} \Bigg(E - t - U - \sum_{kl} < \varphi_k' \mid (t + \frac{U}{2}) \mid \varphi_l > B_{lk} \Bigg)$$
$$+ \sum_{ikl} < \varphi_k' \mid (t+U) \mid \varphi_l > B_{li} B_{jk} < \varphi_i' \mid \Bigg]. \tag{1.81}$$

Die Invarianz der Theorie unter linearen Transformationen der Einteilchenorbitale φ_i, φ_i' erlaubt es hier, die Überlappmatrizen $\alpha_{ij} =< \varphi_i' \,|\, \chi_j >$ und $\alpha_{ij}' =< \chi_i' \,|\, \varphi_j >$ zu diagonalisieren. Da damit auch die Kofaktormatrizen diagonal werden, vereinfachen sich die Gln.1.78, 1.79 zu

$$\frac{\delta < \Phi' | V \,|\, \chi \,\}}{\delta < \varphi_i' \,|} = \sqrt{\frac{N_a! N_b!}{N!}} < \Phi' \mid \chi >< \varphi_i' \mid \chi_i >^{-1} \;\times$$
$$\Bigg[\Bigg(S + \frac{1}{2} \sum_k \frac{< \varphi_k' \mid S \mid \chi_k >}{< \varphi_k' \mid \chi_k >} \Bigg) \mid \chi_i > - \sum_j \frac{< \varphi_j' \mid S \mid \chi_i >}{< \varphi_j' \mid \chi_j >} \mid \chi_j > \Bigg], \tag{1.82}$$

und

$$\frac{\delta \{ \, \chi' \, | V' | \Phi >}{\delta | \, \varphi_j >} = \sqrt{\frac{N_c! N_d!}{N!}} < \chi' \mid \Phi >< \chi_j' \mid \varphi_j >^{-1} \;\times$$
$$\Bigg[< \chi_j' \mid \Bigg(S' + \frac{1}{2} \sum_k \frac{< \chi_k' \mid S' \mid \varphi_k >}{< \chi_k' \mid \varphi_k >} \Bigg) - \sum_i \frac{< \chi_j' \mid S' \mid \varphi_i >}{< \chi_i' \mid \varphi_i >} < \chi_i' \mid \Bigg]. \tag{1.83}$$

Im Unterschied zur nicht antisymmetrisierten Theorie kann hier nicht ein $|\, \chi_i >$ oder $< \chi_j' \,|$ in der i–ten bzw. j–ten Gleichung als Partner des zugehörigen $|\, \varphi_i >$ oder $< \varphi_j' \,|$ nach rechts bzw. links ausgeklammert werden, die Orbitale sind also stärker explizit gekoppelt.

Alternativ kann, sofern die nichthermitische Matrix $h_{ij} =< \varphi_i' \,|\, h \,|\, \varphi_j >$ mit $h = t + U$ diagonalisierbar ist, dies durch eine lineare Transformation im Raum der φ_i, φ_i' erreicht werden. Einmal kann dies durch Diagonalisieren von h im Lochraum geschehen. Nehmen wir an, wir hätten solcherart Links– und Rechtseigenvektoren gefunden

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_h h \mathcal{P}_h | \varphi_i > &= \epsilon_i | \varphi_i >, \\ < \varphi'_j | \mathcal{P}_h h \mathcal{P}_h &= < \varphi'_i | \epsilon'_j, \end{aligned} \tag{1.84}$$

mit dem nichthermitischen (Schief–)Projektor auf die Lochräume

$$\mathcal{P}_h = \sum_{l=1}^{N} \frac{| \varphi_l >< \varphi'_l |}{< \varphi'_l | \varphi_l >}, \tag{1.85}$$

ausgedrückt in einer biorthogonalen Basis. Dann folgt aus

$$< \varphi'_j | \mathcal{P}_h h \mathcal{P}_h | \varphi_i > = < \varphi'_j | \varphi_i > \epsilon_i = < \varphi'_j | \varphi_i > \epsilon'_j \tag{1.86}$$

für $\epsilon_i \neq \epsilon'_j$ die Biorthogonalität zwischen Links– und Rechtseigenvektoren, $< \varphi'_i | \varphi_j > = < \varphi'_i | \varphi_i > \delta_{ij}$. Bei Entartung können die Links– und Rechtseigenvektoren wie üblich durch Bilden von entsprechenden Linearkombinationen ebenfalls biorthogonal gewählt werden. Äquivalent dazu ist es, die Überlappmatrix β_{ij} und h_{ij} jeweils unabhängig mit Hilfe der beiden Orbitalmengen φ_i, φ'_i zu diagonalisieren. In dieser Repräsentation lesen sich die Gln.1.80, 1.81

$$\begin{aligned} &\frac{\delta < \Phi' | (E - \mathcal{H}) | \Phi >}{\delta < \varphi'_i |} = \\ &\quad \frac{< \Phi' | \Phi >}{< \varphi'_i | \varphi_i >} \left(E - h - \sum_k \frac{< \varphi'_k | (t + \frac{U}{2}) | \varphi_k >}{< \varphi'_k | \varphi_k >} + \frac{< \varphi'_i | h | \varphi_i >}{< \varphi'_i | \varphi_i >} \right) | \varphi_i >, \end{aligned} \tag{1.87}$$

und

$$\begin{aligned} &\frac{\delta < \Phi' | (E - \mathcal{H}) | \Phi >}{\delta | \varphi_j >} = \\ &\quad \frac{< \Phi' | \Phi >}{< \varphi'_j | \varphi_j >} < \varphi'_j | \left(E - h - \sum_k \frac{< \varphi'_k | (t + \frac{U}{2}) | \varphi_k >}{< \varphi'_k | \varphi_k >} + \frac{< \varphi'_j | h | \varphi_j >}{< \varphi'_j | \varphi_j >} \right), \end{aligned} \tag{1.88}$$

mit der jeweils gleichen Selbstenergie

$$\begin{aligned} \eta_i &= E - \sum_k \frac{< \varphi'_k | (t + \frac{U}{2}) | \varphi_k >}{< \varphi'_k | \varphi_k >} + \frac{< \varphi'_i | (t + U) | \varphi_i >}{< \varphi'_i | \varphi_i >} \\ &= E - \frac{< \Phi' | \mathcal{H} | \Phi >}{< \Phi' | \Phi >} + \frac{< \varphi'_i | h | \varphi_i >}{< \varphi'_i | \varphi_i >} . \end{aligned} \tag{1.89}$$

Wie in Anhang A bewiesen wird, können in diesem Formalismus die α_{ij}, α'_{ij} und β_{ij} — aufgrund der nur partiellen Antisymmetrie der Kanalwellenfunktionen — leider nicht simultan diagonalisiert werden. Da die φ_i, φ'_i in den

Gleichungen 1.87 und 1.88 weniger gekoppelt sind als in 1.80 und 1.81, bietet es sich an, die Repräsentation als TIMF–Gleichung auszuwählen, bei der β_{ij} und h_{ij} diagonal sind

$$
\begin{aligned}
(\eta_i - h) \mid \varphi_i > \;=\;& \sqrt{\frac{N_a!N_b!}{N!}}\frac{< \Phi' \mid \chi >< \varphi'_i \mid \varphi_i >}{< \Phi' \mid \Phi >} \times \\
& \left[\sum_j \left(S + \sum_{kl} < \varphi'_k \mid \frac{S}{2} \mid \chi_l > A_{lk} \right) \mid \chi_j > A_{ji} \right. \\
& \left. - \sum_{jkl} < \varphi'_k \mid S \mid \chi_l > A_{li} A_{jk} \mid \chi_j > \right], \qquad (1.90)
\end{aligned}
$$

und

$$
\begin{aligned}
< \varphi'_j \mid (\eta_j - h) \;=\;& \sqrt{\frac{N_c!N_d!}{N!}}\frac{< \chi' \mid \Phi > < \varphi'_j \mid \varphi_j >}{< \Phi' \mid \Phi >} \times \\
& \left[\sum_i A'_{ji} < \chi'_i \mid \left(S' + \sum_{kl} < \chi'_k \mid \frac{S'}{2} \mid \varphi_l > A'_{lk} \right) \right. \\
& \left. - \sum_{ikl} < \chi'_k \mid S' \mid \varphi_l > A'_{li} A'_{jk} < \chi'_i \mid \right]. \qquad (1.91)
\end{aligned}
$$

Die vier anderen Matrizen $< \chi'_i | \varphi_j >$, $< \varphi'_i | \chi_j >$, $< \chi'_i | S' | \varphi_j >$ und $<\varphi'_i | S | \chi_j>$ bleiben i.a. nichtdiagonal. Eine leichte Verbesserung kann weiterhin erreicht werden, indem die Antisymmetrie der χ, χ' innerhalb der Fragmente dazu benutzt wird, α_{ij} und α'_{ij}, und damit die die Fragmentkofaktormatrizen M_{ij}, M'_{ij}, zumindest innerhalb der Fragmente zu diagonalisieren. Die antisymmetrisierte TIMF wurde in dieser Form bereits einmal erfolgreich auf die α–α–Streuung angewendet [48]. Im Anhang A wird gezeigt, wie auch bei nur partieller Antisymmetrisierung durch Einführen eines „Kanalspins“ trotzdem ausschließlich mit vollständig antisymmetrisierten Wellenfunktionen gearbeitet werden kann. Bei dem $\mathcal{G}$–Funktional, in dem mit vollständiger Antisymmetrisierung gearbeitet wird, können alle Überlappmatrizen α, α' und β simultan diagonalisiert werden und man erhält als TIMF–Gleichungen in diagonaler Darstellung

$$
(\eta_i - h)| \varphi_i >= \lambda_i | \chi_i >, \qquad (1.92)
$$
$$
<\varphi'_i |(\eta_i - h) = \lambda'_i <\chi'_i |, \qquad (1.93)
$$

mit einem im Gegensatz zum nicht antisymmetrisierten Fall 1.20 i–unabhängigen h und den nur bei Einsetzen in das additive Funktional bedeutsamen

$$
\lambda_i = \frac{\det \alpha}{\det \beta}\frac{<\varphi'_i | \varphi_i>}{<\varphi'_i | \chi_i>}, \quad \lambda'_i = \frac{\det \alpha'}{\det \beta}\frac{<\varphi'_i | \varphi_i>}{<\chi'_i | \varphi_i>}. \qquad (1.94)
$$

Zum Schluß des Abschnitts sei noch auf die Modellierung einer ebenen Welle für die Relativbewegung innerhalb der Kanalwellenfunktionen χ, χ'

eingegangen. Während die Verwendung von Slaterdeterminanten für die Versuchsfunktionen wesentlich für das TIMF–Verfahren ist, gilt entsprechendes nicht für die Approximation der exakten Kanalwellenfunktionen. Da Slaterdeterminanten eine übervollständige Basis im Hilbertraum bilden, können die exakten Kanalwellenfunktionen danach entwickelt werden. Es ist dabei erlaubt, irgendeine Basis von Slaterdeterminanten zu wählen. Neben geboosteten sind beispielsweise im Ortsraum verschobene („geshiftete“) Slaterdeterminanten möglich

$$\chi_s = \exp(-iP_a s_a)\chi_a \exp(-iP_b s_b)\chi_b\,, \tag{1.95}$$

$$\chi'_{s'} = \exp(-iP_c s'_c)\chi_c \exp(-iP_d s'_d)\chi_d\,, \tag{1.96}$$

mit den jeweiligen Schwerpunktsimpulsen P_a, P_b, P_c, P_d und

$$s_a = s\frac{N_a}{N}, \qquad s_b = s\frac{N_b}{N},$$

$$s'_c = s'\frac{N_c}{N}, \qquad s'_d = s'\frac{N_d}{N}. \tag{1.97}$$

Aus der traditionellen Generator Coordinate Method (GCM) [55, 56, 57, 58] weiß man, daß ein einfaches Fourierintegral aus verschobenen Wellenpaketen χ_s bzw. $\chi'_{s'}$ eine ebene Welle erzeugt. Man erhält damit für ein ΔT–Matrixelement zwischen ebenen Wellen den Ausdruck

$$\{\,k'\,|\,\Delta T\,|\,k\,\} = \nu(k')\nu(k)\int ds'\,ds\,\exp\left[i(ks-k's')\right]\{\,\chi'_{s'}\,|\,V'(E-\mathcal{H})^{-1}V\,|\,\chi_s\,\}, \tag{1.98}$$

mit Faktoren ν, die den ein– und auslaufenden Fluß der Mehrteilchenwellen auf Eins normieren. Die TIMF–Näherung der benötigten Matrixelemente $\{\,\chi'_{s'}\,|\,V'(E-\mathcal{H})^{-1}V\,|\,\chi_s\,\}$ ergibt sich beispielsweise aus dem multiplikativen Funktional

$$F_s = \frac{\{\,\chi'_{s'}\,|V'\mathcal{A}|\,\Phi_{s,s'}><\Phi'_{s,s'}\,|\mathcal{A}V|\,\chi_s\,\}}{<\Phi'_{s,s'}\,|\,(E-\mathcal{H})\,|\,\Phi_{s,s'}>}, \tag{1.99}$$

worin die Versuchsfunktionen explizit mit ihrer (s,s')–Abhängigkeit gekennzeichnet wurden. Die TIMF–Approximation der vollen Greensfunktion hat für jedes (s,s')–Paar die Form

$$G_{TIMF} = \frac{|\,\Phi_{s,s'}><\Phi'_{s,s'}\,|}{<\Phi'_{s,s'}\,|\,(E-\mathcal{H})\,|\,\Phi_{s,s'}>}. \tag{1.100}$$

Um eine Approximation für ein Matrixelement von ΔT zwischen Kanalfunktionen mit ebenen Wellen in der Relativbewegung zu bekommen, muß also jeweils für mehrere Werte von s, s' eine TIMF–Näherung berechnet werden, und die so erhaltenen Werte müssen in das Integral 1.98 eingesetzt werden. Dabei kann das Schalenmodell mit — jetzt verschobenen — Gaußfunktionen gleicher Breite für die Fragmente beibehalten werden, denn die Projektion auf ebene Wellen muß nur bezüglich der Relativbewegung angewandt werden. Bei kurzreichweitigen Wechselwirkungen ist bei großen Distanzen $|s|$, $|s'| \to \infty$ ein rascher Abfall der Matrixelemente zu erwarten, so daß das Integral 1.98 gut konvergiert und zu seiner Auswertung nicht zu viele TIMF-Werte notwendig sind. Prinzipiell ist das Verfahren in zwei Varianten denkbar:

1. Variation vor der Integration: Dies entspricht dem eben Beschriebenen; für jedes (s,s')–Paar wird eine TIMF–Näherung berechnet.

2. Variation nach der Integration: Aus den verschobenen Gaußpaketen χ_s, $\chi'_{s'}$ wird analog eine ebene Welle in der Relativbewegung erzeugt, und diese dann als ganzes für χ bzw. χ' in das TIMF–Funktional eingesetzt. Es wird dabei nur eine TIMF–Rechnung durchgeführt, mit den beiden Slaterdeterminanten Φ und Φ' und Kanalwellenfunktionen, die bereits eine ebene Welle in der Relativbewegung besitzen. Dies führt in den TIMF–Gleichungen zu mehreren Termen auf der inhomogenen, rechten Seite und funktioniert, solange kurzreichweitige V, V' die Quadratintegrabilität von $V|\chi>$ und $<\chi'|V'$ nach sich ziehen.

Letzteres Verfahren ist weniger aufwendig, während ersteres für jeden Satz $(s,\, s')$ eigens optimierte Werte liefert. Ein Vergleich dieses Verfahrens mit GCM und RGM findet sich in [59], eine ähnliche Anwendung in [60]. Damit existiert für Anwendungen in der Streutheorie ein zeitunabhängiges, antisymmetrisches Mean–Field–Verfahren.

Kapitel 2

TIMF in zweiter Quantisierung

2.1 Kanonische Transformationen

Im letzten Kapitel wurde die antisymmetrisierte Fassung der TIMF vorgestellt. Antisymmetrisierte Theorien werden üblicherweise einfacher in zweiter Quantisierung behandelt, bei der die Eigenschaften der Slaterdeterminanten sich in den Vertauschungsrelationen der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren widerspiegeln. Damit ist in der Regel das Auswerten von Matrixelementen mit Hilfe des Wickschen Theorems wesentlich einfacher und insbesondere für die angestrebte Formulierung einer inhomogenen Random–Phase–Approximation ist eine Version der TIMF in zweiter Quantisierung unerläßlich. Eine solche existiert bisher nicht und muß daher in dieser Arbeit, einschließlich entsprechender Diagrammregeln, entwickelt werden. Eine solche Fassung der TIMF mit Hilfe von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren steht vor speziellen Schwierigkeiten. Einmal handelt es sich um nichthermitische Operatoren, deren Linkseigenvektoren in der Regel von den Rechtseigenvektoren verschieden sind. Dies hat zur Folge, daß man für die drei auftretenden Typen von Matrixelementen $<\Phi' \,|\, \cdots \,|\, \Phi>$, $<\Phi' \,|\, \cdots \,|\, \chi>$ und $<\chi' \,|\, \cdots \,|\, \Phi>$ jeweils zwei getrennte Mengen von Links– und Rechtserzeugern und –vernichtern einführen und zwischen hermitisch und kanonisch konjugierten Operatoren unterscheiden muß. Zum anderen führt die nur partielle Antisymmetrisierung der Kanalwellenfunktionen bei Berechnung der ΔT–Matrix auf besondere Probleme, denn eine in zweiter Quantisierung beschriebene Theorie ist immer vollständig antisymmetrisiert. Die Antwort auf letzteres Problem findet sich im Anhang B, während im folgenden die Formulierung der TIMF zur Berechnung von $\mathcal{G}$–Matrixelementen, also mit ausschließlich vollständig antisymmetrisierten Wellenfunktionen, behandelt wird.

Die Erzeugungs– und Vernichtungsoperatoren sind dabei im Fockraum definiert, der direkten Summe der N–Teilchen–Hilberträume $\mathcal{H}_N$ für $N = 1, 2, \ldots$:

$$\mathcal{F} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \ldots . \tag{2.1}$$

Der Hilbertraum $\mathcal{H}_0$ besteht dabei nur aus dem Vakuumzustand $|\, 0>$, und vollständig antisymmetrische oder symmetrische Zustände des Fockraumes werden mit Hilfe der Erzeugungsoperatoren a^+ aus dem Vakuum erzeugt

$$\begin{aligned}
|\,\alpha\!> &= a^\dagger_\alpha |\,0\!>, \\
|\,\alpha\beta\!> &= a^\dagger_\alpha a^\dagger_\beta |\,0\!>, \quad \text{wenn } \alpha \neq \beta \\
|\,\alpha\alpha\!> &= \frac{1}{\sqrt{2}} a^\dagger_\alpha a^\dagger_\alpha |\,0\!>, \quad \text{wenn } \alpha = \beta \text{ (Bosonen)} \\
&\vdots \quad .
\end{aligned} \tag{2.2}$$

Die (anti)symmetrischen Bra–Zustände des Dualraumes von $\mathcal{F}$ werden mit Hilfe einer von den $a^\dagger$ unabhängigen Menge von Vernichtungsoperatoren a geschrieben

$$\begin{aligned}
<\!\alpha'\,| &= \;<\!0\,| a_\alpha, \\
<\!\alpha'\beta'\,| &= \;<\!0\,| a_\beta a_\alpha, \\
<\!\alpha'\alpha'\,| &= \;<\!0\,| a_\alpha a_\alpha \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \text{wenn } \alpha = \beta \text{ (Bosonen)} \\
&\vdots \quad .
\end{aligned} \tag{2.3}$$

Die Benennung durch gestrichene Zeichen wie z.B. α' in den Bra–Vektoren soll dabei verdeutlichen, daß die $<\!\alpha'\,|$ nicht zu den $|\,\alpha\!>$ dual sein müssen. Wollen wir betonen, daß ein $a^\dagger_\alpha$ zu a_α hermitisch konjugiert ist, d.h. $a^\dagger_\alpha |\,0\!>$ wirklich den zu $<\!0\,|a_\alpha =<\!\alpha\,|$ dualen Zustand $|\,\alpha\!>$ erzeugt, so bezeichnen wir es als a^+_α, d.h. mit $+$ anstatt $\dagger$. Um die richtigen Werte der Skalarprodukte (anti)symmetrischer Zustände zu erhalten, muß man fordern

$$a_\alpha |\,0\!>= 0, \quad <\!0\,| a^\dagger_\alpha = 0, \quad <\!0\,|\,0\!>= 0, \tag{2.4}$$

und

$$[a_\alpha, a^\dagger_\beta]_\epsilon = a_\alpha a^\dagger_\beta + \epsilon a^\dagger_\beta a_\alpha =<\!\alpha'\,|\,\beta\!>, \tag{2.5}$$

wobei für Fermionen $\epsilon = 1$ und für Bosonen $\epsilon = -1$ zu setzen ist.

Um solche Operatoren in Verbindung mit nichtorthogonalen Slaterdeterminanten, wie sie in der TIMF auftauchen, nutzbringend zu verwenden, muß auf fermionische kanonische Transformationen eingegangen werden. Da wir kanonische Transformationen bei der RPA auch für Bosonen benötigen, werden diese hier für Fermionen und Bosonen gemeinsam dargestellt. Der Darstellung in [61] folgend definieren wir dazu den Spaltenvektor

$$\alpha = \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix}, \quad \alpha_i = a_i, \quad \alpha_{n+i} = a^\dagger_i, \quad i = 1, \ldots, n. \tag{2.6}$$

Darin sind die Erzeuger und Vernichter jeweils zu einem Vektor a bzw. $a^\dagger$ zusammengefaßt, und der Einfachheit halber betrachten wir einen endlichen Einteilchenzustandsraum mit n Zuständen. Analog setzen wir als Zeilenvektor

$$\alpha^\dagger = (a^\dagger, a). \tag{2.7}$$

Wir betrachten nun homogene Transformationen der Fermion– oder Boson-operatoren [62, 63, 64]

$$\begin{pmatrix} b \\ b^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U & \epsilon V \\ \epsilon Y & X \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix}, \tag{2.8}$$

mit den $n \times n$ Matrizen U, V, Y und X. Es sei darauf hingewiesen, daß auch bei zu a hermitisch konjugierten $a^\dagger = a^+$ die b nicht notwendig hermitisch konjugiert zu den $b^\dagger$ zu sein brauchen. Weiter unten werden die Bedingungen angegeben, unter denen sie hermitisch konjugiert sind. Mit den Bezeichnungen

$$T = \begin{pmatrix} U & \epsilon V \\ \epsilon Y & X \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} b \\ b^\dagger \end{pmatrix}, \tag{2.9}$$

erhält Gl.2.8 die kompakte Form

$$\beta = T\alpha. \tag{2.10}$$

Mit Hilfe der $2n \times 2n$–Matrix

$$\gamma = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{2.11}$$

können wir schreiben

$$\gamma\alpha = \begin{pmatrix} a^\dagger \\ a \end{pmatrix}, \quad \alpha^\dagger\gamma = (a, a^\dagger). \tag{2.12}$$

Unter der Voraussetzung biorthonormaler Orbitale, also $<\alpha' \,|\, \beta> = \delta_{\alpha\beta}$, erhalten die Vertauschungsrelationen 2.5 ihre *kanonische* Form

$$\begin{pmatrix} [a, a^\dagger]_\epsilon & [a, a]_\epsilon \\ [a^\dagger, a^\dagger]_\epsilon & [a^\dagger, a]_\epsilon \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \epsilon \end{pmatrix}. \tag{2.13}$$

Dies bezeichnen wir kürzer als

$$[\alpha, \alpha^\dagger]_\epsilon = \eta, \tag{2.14}$$

mit

$$\eta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \epsilon \end{pmatrix}. \tag{2.15}$$

Eine lineare Transformation der Gestalt 2.8 heißt *kanonisch*, wenn sie die kanonischen Vertauschungsrelationen der $a, a^\dagger$ für die $b, b^\dagger$ erhält, wenn also gilt

$$[\alpha, \alpha^\dagger]_\epsilon = \eta \quad \Rightarrow \quad [\beta, \beta^\dagger]_\epsilon = \eta. \tag{2.16}$$

Die Operatoren b und $b^\dagger$ sind dann *kanonisch konjugiert*. Biorthonormale Orbitale $< a'_\alpha \,|,\ |\, a_\alpha >$ werden unter einer kanonischen Transformation in biorthonormale Orbitale $< b'_\alpha \,|,\ |\, b_\alpha >$ transformiert.

Die Transformation heißt *unitär kanonisch*, wenn zusätzlich hermitisch konjugierte Operatoren a und $a^\dagger = a^+$ auf *hermitisch konjugierte* Operatoren b und $b^\dagger = b^+$ abgebildet werden:

$$\alpha^\dagger = \alpha^+ \quad \Rightarrow \quad \beta^\dagger = \beta^+. \tag{2.17}$$

Damit bleibt ein orthonormales System von Erzeugern und Vernichtern unter unitären kanonischen Transformationen orthonormal.

Wir beginnen mit den kanonischen Transformationen. Setzt man Gl.2.10 und die Beziehung

$$\beta^\dagger = \tilde{\beta}\gamma = \alpha^\dagger\gamma\tilde{T}\gamma, \tag{2.18}$$

mit $\tilde{T}$ als dem Transponierten von T, in die geforderte Kommutatorgleichung 2.16 ein, so erhält man

$$\eta = T[\alpha, \alpha^\dagger]_\epsilon \gamma\tilde{T}\gamma = T\eta\gamma\tilde{T}\gamma. \tag{2.19}$$

Daraus entnimmt man, daß eine lineare Transformation 2.8 kanonisch ist, wenn sie die Bedingung erfüllt

$$T\sigma\tilde{T} = \sigma. \tag{2.20}$$

Die $2n \times 2n$–Matrix σ ist dabei definiert als

$$\sigma = \eta\gamma = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \epsilon & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.21}$$

Die inverse Transformation ergibt sich mit $\sigma^2 = \epsilon$ daraus unmittelbar als

$$T^{-1} = \epsilon\sigma\tilde{T}\sigma = \begin{pmatrix} \tilde{X} & \tilde{V} \\ \tilde{Y} & \tilde{U} \end{pmatrix}. \tag{2.22}$$

Für eine unitäre kanonische Transformation folgt aus der Forderung $\beta^\dagger = \beta^+$

$$\alpha^+ T^+ = \alpha^\dagger\gamma\tilde{T}\gamma \tag{2.23}$$

und wegen $\alpha^\dagger = \alpha^+$ erfordert das die Bedingungen

$$\gamma\tilde{T}\gamma = T^+. \tag{2.24}$$

Zusammen mit Gl.2.20 kommt man auf

$$T\eta T^+\eta = 1. \tag{2.25}$$

Dies bedeutet für die Matrizen U, V, X, Y

$$U = X^*, \quad V = Y^*. \tag{2.26}$$

Für Fermionen mit $\eta = 1$ ist die Matrix T unitär.

Man kann zeigen, daß die Gruppe der kanonischen Transformationen für Fermionen isomorph zur Gruppe der orthogonalen komplexen $2n \times 2n$–Matrizen $O(2n, C)$, für Bosonen isomorph zu der symplektischen Gruppe $Sp(2n, C)$ ist, und bei den unitären kanonischen Transformationen zu den jeweils entsprechenden Gruppen $O(2n, R)$, $Sp(2n, R)$ der reellen $2n \times 2n$–Matrizen [61].

Gesucht sei nun ein Fockraumoperator S dergestalt, daß sich die transformierten Operatoren b, $b^\dagger$ schreiben lassen als

$$b_i = S a_i S^{-1}, \quad b_i^\dagger = S a_i^\dagger S^{-1}. \tag{2.27}$$

Die Zustände $S|\,0>$ und $<0\,|S^{-1}$ sind dann die Vakua der Operatoren b bzw. $b^\dagger$, wenn $|\,0>$ und $<0\,|$ die Vakua der a, $a^\dagger$ darstellen. Der Operator S läßt sich explizit berechnen durch Verwendung von kohärenten Zuständen

$$\begin{aligned} |\,z> &= e^{a^\dagger \cdot z}|\,0> = e^{\sum_\alpha a_\alpha^\dagger z_\alpha}|\,0>, \\ <z'\,| &= <0\,|e^{z^* \cdot a} = <0\,|e^{\sum_\alpha z_\alpha^* a_\alpha}. \end{aligned} \tag{2.28}$$

Hier ist z für Bosonen ein Vektor von komplexen Zahlen, für Fermionen ein Vektor von Grassmann–Variablen. Die Zustände $|\,z>$ sind Rechtseigenzustände der Vernichter a

$$a|\,z> = z|\,z>\,. \tag{2.29}$$

mit den a_α–Eigenwerten z_α. Der Vektor $S|\,z>$ ist dann Rechtseigenvektor der b

$$bS|\,z> = SaS^{-1}S|\,z> = Sz|\,z> = zS|\,z>, \tag{2.30}$$

unter der Annahme, daß für Fermionen die Grassmann–Variable z mit S vertauscht. Für Fermionen gehören kohärente Zustände nicht zum Hilbertraum, sondern zu dem erweiterten Raum, der daraus durch Hinzufügen der Multiplikation von Vektoren mit Elementen einer Grassmann–Algebra entsteht. Bei Benutzung von kohärenten Zuständen gelangt man zu Differentialgleichungen, denn es gilt

$$a^\dagger|\,z> = \overleftarrow{\partial}_z\,|\,z>, \tag{2.31}$$

$$b^\dagger S|\,z> = \overleftarrow{\partial}_z\,S|\,z>\,. \tag{2.32}$$

Das Symbol $\overleftarrow{\partial}_z$ steht für den Vektor der Ableitungen nach den z_α. Für Bosonen ist der Pfeil nach links bedeutungslos, bei Fermionen fordert er dazu auf, z nach rechts zu kommutieren und dann zu eliminieren. Dabei wurde für Fermionen in Gl.2.32 die Vertauschbarkeit von S mit $\overleftarrow{\partial}_z$ vorausgesetzt. Man wird so auf die Gleichungen geführt

$$(b - z)S|\,z> = 0, \quad (b^\dagger - \overleftarrow{\partial}_z)S|\,z> = 0. \tag{2.33}$$

Durch Einsetzen des Ausdruckes 2.8 für b und $b^\dagger$ gelangt man zur Gleichung für S

$$(Ua + \epsilon V a^\dagger - z) S|\, z> = 0,$$
$$(\epsilon Y a + X a^\dagger - \overleftarrow{\partial_z}) S|\, z> = 0, \tag{2.34}$$

und eine Multiplikation von links mit einem anderen kohärenten Zustand $<t'\,|$ ergibt unter Benutzung von

$$<t'\,|a^\dagger = <t'\,|t'^*, \quad <t'\,|a = \overrightarrow{\partial_{t'^*}} <t'\,|, \tag{2.35}$$

die Differentialgleichung für die Matrixelemente $<t'\,|\,S\,|\,z>$

$$(U\ \overrightarrow{\partial_{t'^*}} + \epsilon V t'^* - z) <t'\,|\,S\,|\,z> = 0,$$
$$(\epsilon Y\ \overrightarrow{\partial_{t'^*}} + X t'^* - \overleftarrow{\partial_z}) <t'\,|\,S\,|\,z> = 0. \tag{2.36}$$

Unter Beachtung der Bedingungen 2.20 an die Matrizen U, V, X und Y verifiziert man folgende Lösung:

$$<t'\,|\,S\,|\,z> = \exp\left[-\frac{\epsilon}{2} t'^* U^{-1} V t'^* - \frac{1}{2} z Y U^{-1} z + t'^* U^{-1} z\right]. \tag{2.37}$$

Da aufgrund der Gln.2.29 und 2.35 jede Funktion $S(t'^*, z)$ der komplexen oder Grassmann–Variablen t'^* und z als Matrixelement eines normalgeordneten Operators aufgefaßt werden kann

$$S(t'^*, z) = \frac{<t'\,|\ :S(a^\dagger, a):\ |\,z>}{<t'\,|\,z>}, \tag{2.38}$$

ist S das normalgeordnete Exponential

$$S =: \exp\left[-\frac{\epsilon}{2} a^\dagger U^{-1} V a^\dagger - \frac{1}{2} a Y U^{-1} a + a^\dagger (U^{-1} - 1) a\right] :, \tag{2.39}$$

wobei der Term $-a^\dagger a$ im Exponenten durch den Überlapp der kohärenten Zustände

$$<t'\,|\,z> = \exp(t'^* z) = \exp(\sum_\alpha t'^*_\alpha z_\alpha), \tag{2.40}$$

entsteht. Bei Anwendung auf das Vakuum $|\,0>$ fallen alle Terme mit a weg, und das Vakuum $S|\,0>$ der b-Quasiteilchen ist

$$S|\,0> = \exp\left[-\frac{\epsilon}{2} a^\dagger U^{-1} V a^\dagger\right] |\,0> . \tag{2.41}$$

Gleichung 2.27 legt S nur bis auf eine Normierungskonstante fest. Für unitäre kanonische Transformationen kann man darin die Werte aus Gl.2.26 für U und V substituieren

$$S|\,0> = \exp\left[-\frac{\epsilon}{2} a^\dagger X^{*-1} Y^* a^\dagger\right] |\,0> . \tag{2.42}$$

2.2 Nichtorthogonale Slaterdeterminanten als Quasiteilchenvakua

Wir betrachten nun Slaterdeterminanten und zeigen, wie diese sich als Quasiteilchenvakuum darstellen lassen. Sei $|\,\Phi'>$ aus orthonormierten N–(Loch–)-Orbitalen aufgebaut

$$|\,\Phi'>=\left(\prod_{i=1}^{N} a_i'^{+}\right)|\,0> . \tag{2.43}$$

Der Strich bei Φ' wurde hier verwendet, um später mit der Bezeichnung aus dem TIMF-Kapitel konsistent zu bleiben. Dann ist $|\,\Phi'>$ bzw. $<\Phi'\,|$ Vakuum der aus a', a'^{+} durch eine unitäre kanonische Transformation entstehenden Quasiteilchenoperatoren b bzw. b^{+}

$$\begin{array}{rcll} b_i &=& a_i'^{+}, & \text{für}\, i < N, \\ b_n &=& a_n', & \text{für}\, n > N, \\ b_i^{+} &=& a_i', & \text{für}\, i < N, \\ b_n^{+} &=& a_n'^{+}, & \text{für}\, n > N, \end{array} \tag{2.44}$$

wenn wir die Indizes i für Loch– und n für Teilchenorbitale verwenden. D.h. es gilt

$$b_i|\,\Phi'>=0, \quad b_n|\,\Phi'>=0. \tag{2.45}$$

Der dazugehörige unitäre S-Operator hat die Gestalt

$$S=\prod_i (a_i' + a_i'^{+}), \quad \text{für}\, i < N, \tag{2.46}$$

mit $S|\,0>=|\,\Phi'>$.

Betrachten wir nun eine zweite zu $|\,\Phi'>$ nichtorthogonale Slaterdeterminante $|\,\Phi>$ mit $<\Phi'\,|\,\Phi>=1$. Dann läßt sich nach Thouless [65] $|\,\Phi>$ aus $|\,\Phi'>$ erzeugen durch eine Abbildung in Form der Gl.2.41:

$$|\,\Phi>=\exp\left[\sum_{\substack{i<N\\ n>N}} z_{ni} a_n'^{+} a_i'\right]|\,\Phi'> . \tag{2.47}$$

Da es sich hierbei um Fermionen handelt und keine Zustände doppelt besetzt werden können, bricht die Entwicklung der Exponentialfunktion ab, und man kann äquivalent zu Gl.2.47 schreiben

$$|\,\Phi>=\prod_{i<N}\left(a_i'^{+} + \sum_{n>N} z_{ni} a_n'^{+}\right)|\,0> . \tag{2.48}$$

Die Orbitale von Φ sind durch die z_{ni} parametrisiert und haben die Gestalt

$$|\,i>=|\,i'>+\sum_{n>N} z_{ni}|\,n'> . \tag{2.49}$$

Mit Hilfe der Thouless–Transformation, also dem Operator

$$S = \exp\left\{ \sum_{\substack{i<N \\ n>N}} z_{ni} a_n'^{+} a_i' \right\}, \tag{2.50}$$

kann die dazugehörige nichtunitäre kanonische Transformation direkt angegeben werden

$$\begin{aligned} a_n^\dagger &= S a_n'^{+} S^{-1} = a_n'^{+}, && \text{für}\, n > N, \\ a_i^\dagger &= S a_i'^{+} S^{-1} = a_i'^{+} + \sum_{n>N} z_{ni} a_n'^{+}, && \text{für}\, i < N, \\ a_n &= S a_n' S^{-1} = a_n' - \sum_{i<N} z_{ni} a_i', && \text{für}\, n > N, \\ a_i &= S a_i' S^{-1} = a_i', && \text{für}\, i < N. \end{aligned} \tag{2.51}$$

Die den a, $a^\dagger$ zugeordneten Orbitale bilden eine Biorthonormalbasis des Hilbertraumes mit i.a. $a^+ \neq a^\dagger$. Die Biorthonormalität drückt sich aus in den Vertauschungsrelationen

$$[a_\alpha, a_\beta^\dagger]_+ = <\alpha' \,|\, \beta> = \delta_{\alpha\beta}, \tag{2.52}$$

worin α, β stellvertretend für Loch– und Teilchenorbitale stehen. Damit ist zwar a_α zu $a_\alpha^\dagger$ i.a. *nicht hermitisch* konjugiert, wohl aber *kanonisch* konjugiert. Man beachte den Unterschied zu den a'^{+}, a', die wegen $[a_\alpha', a_\beta'^{+}]_+ = \delta_{\alpha\beta}$ und $a_\alpha'^{\dagger} = a_\alpha'^{+}$ ein Orthogonalsystem bilden. Ein ebensolches Orthogonalsystem existiert natürlich auch bezüglich $|\,\Phi>$ — man könnte es a'', a''^{+} nennen —, es wird aber im folgenden nicht gebraucht. Aufgrund der Definition 2.43 gilt

$$<\Phi'\,| a_n'^{+} = <\Phi'\,| a_i' = 0, \tag{2.53}$$

und da in S aus Gl.2.50 links immer ein Teilchenerzeuger $a_n'^{+}$ steht, kommt man auf die Invarianz des Linksvakuums unter S^{-1}

$$<\Phi'\,| S^{-1} = <\Phi'\,|, \tag{2.54}$$

welches damit wegen Gln.2.51 auch $a_n^\dagger$ und a_i annihiliert

$$<\Phi'\,| a_n^\dagger = <\Phi'\,| a_i = 0. \tag{2.55}$$

Nach Gl.2.47 und 2.51 ist aber $|\,\Phi> = S|\,\Phi'>$ das Rechtsvakuum der a_n– und $a_i^\dagger$–Operatoren, also

$$a_i^\dagger |\,\Phi> = a_n |\,\Phi> = 0. \tag{2.56}$$

Mit a, $a^\dagger$ aus Gl.2.51 haben wir damit Quasiteilchenoperatoren gefunden, die $<\Phi'\,|$ als Links– und $|\,\Phi>$ als Rechtsvakuum haben. Diese Quasiteilchenvakua schreiben sich

$$\begin{aligned} |\,\Phi> &= \left(\prod_{i=1}^N a_i^\dagger \right) |\,0> = \sqrt{N!}\mathcal{A} \prod_{i=1}^N |\,\varphi_i>, \\ <\Phi'\,| &= <0\,| \left(\prod_{i=1}^N a_i' \right) = <0\,| \left(\prod_{i=1}^N a_i \right) = \sqrt{N!} \left(\prod_{i=1}^N <\varphi_i'\,| \right) \mathcal{A}. \end{aligned} \tag{2.57}$$

Die Existenz der Quasiteilchen 2.51 ist die notwendige Voraussetzung, um bezüglich zweier nichtorthogonaler Slaterdeterminanten eine Normalordnung zu definieren und damit das Wicksche Theorem zur Auswertung solcher Matrixelemente zu benutzen. Die Normalordnung wird nun wie üblich festgesetzt als die Reihenfolge, bei der die Erzeuger links von den Vernichtern stehen, mal der Parität $(-1)^{\mathcal{P}}$ der für die Umordnung notwendigen Permutation, so daß Vakuumerwartungswerte normalgeordneter Produkte immer verschwinden. Nach dem Wickschen Theorem gewinnt man den Vakuumerwartungswert eines vorgegebenen Operatorproduktes durch Aufsummieren aller vollständigen Kontraktionen, d.h. aller möglichen (nichtverschwindenden) Produkte von Kontraktionen zwischen zwei Operatoren. Die Kontraktion zweier Operatoren ist definiert als Differenz der gegebenen Reihenfolge von der normalgeordneten:

$$\overline{c_1 c_2} = c_1 c_2 - :c_1 c_2: . \tag{2.58}$$

Der Vorteil ist nun, daß die Transformation 2.51 nicht explizit bekannt sein muß, um Matrixelemente zwischen $<\Phi'\,|$ und $|\,\Phi>$ als Vakuumerwartungswerte berechnen zu können. Aus den Vertauschungsrelationen 2.5 entnimmt man nämlich, daß Kontraktionen zwischen Erzeugern und Vernichtern zahlenwertig sein müssen, da beim Umordnen keine zusätzlichen Operatorterme entstehen können. Beim Bilden des (Quasi–)Vakuumerwartungswertes von Gl.2.58 für $c_1 = c_\alpha^\dagger$ und $c_2 = d_\beta$ kann die Zahl $\overline{c_\alpha^\dagger d_\beta}$ aus dem Skalarprodukt herausgezogen werden. Und wegen des Verschwindens des Normalproduktes läßt sich die Kontraktion für *beliebige* physikalische Erzeuger $c_\alpha^\dagger$ und Vernichter d_β, d.h. mit $<0\,|c_\alpha^\dagger = 0$ und $d_\beta|\,0>= 0$, durch Rückführung auf einen physikalischen Vakuumerwartungswert berechnen:

$$\begin{aligned}
\overline{c_\alpha^\dagger d_\beta} &= \frac{<\Phi'\,|\,c_\alpha^\dagger d_\beta\,|\,\Phi>}{<\Phi'\,|\,\Phi>} \\
&= \frac{<0\,|\,a_1' \ldots a_N' c_\alpha^\dagger d_\beta a_N^\dagger \ldots a_1^\dagger\,|\,0>}{<\Phi'\,|\,\Phi>} \\
&= \frac{1}{<\Phi'\,|\,\Phi>} \sum_{i,j}^{N} <\beta'\,|\,i>\, M_{ji} <j'\,|\,\alpha>, \\
&= \sum_{i,j}^{N} <\beta'\,|\,i>\, A_{ij} <j'\,|\,\alpha> .
\end{aligned} \tag{2.59}$$

Die Matrix A_{ij} haben wir bereits im vorherigen Kapitel definiert als Inverse der Überlappmatrix $<i'\,|\,j>$ mit der Beziehung zum Kofaktor $M_{ji} = <\Phi'\,|\,\Phi> A_{ij}$. In diesen Kontraktionen bleiben also nur die Lochanteile der Orbitale α, β übrig, weswegen wir sie Loch–Loch–Kontraktionen nennen. Entsprechend ergibt sich wegen $d_\beta c_\alpha^\dagger = <\beta'\,|\,\alpha> - c_\alpha^\dagger d_\beta$

$$\overline{d_\beta c_\alpha^\dagger} = <\beta'\,|\,\alpha> - \sum_{i,j}^{N} <\beta'\,|\,i>\, A_{ij} <j'\,|\,\alpha> . \tag{2.60}$$

Bei diesen Kontraktionen werden die Lochanteile herausprojiziert, und es verbleiben die Teilchenanteile, es handelt sich also um Teilchen–Teilchen–Kontraktionen. Beide Gleichungen können auch bei nicht (bi)normierten Quasiteilchenvakua $<\Phi' \,|\, \Phi> \neq 1$ verwendet werden.

Mit Gl.2.59 haben wir die grundlegende Formel für eine Formulierung der TIMF in zweiter Quantisierung zur Verfügung. Die Kontraktionen definieren eine Einteilchendichtematrix $\rho_{\beta\alpha} = <\beta' \,|\, \rho \,|\, \alpha>$ des nichthermitischen Einteilchenoperators

$$\rho = \sum_{i,j}^{N} |\, i> A_{ij} <j' \,|, \tag{2.61}$$

mit $\rho^2 = \rho$ und Tr $\rho = N$. Drückt man die Operatoren und die Variation in Erzeugungs– und Vernichtungsoperatoren aus, so können nun die TIMF–Matrixelemente durch Rückgriff auf die Gln.2.59 und 2.60 in solchen Einteilchendichten geschrieben und ausgewertet werden.

2.3 TIMF in Biorthogonalbasen

Denken wir uns die beiden Orbitalmengen φ_i und φ'_i durch φ_n und φ'_n zu einer vollständigen Basis ergänzt, so gelangen wir zu zwei nicht notwendig orthogonalen Mengen von Erzeugern und Vernichtern. Einfacher wird es, wenn die beiden Orbitalmengen zu *einer* Biorthogonalbasis ergänzt werden. Damit gelangt man zu den Erzeugungs– und Vernichtungsoperatoren a_i, $a_i^\dagger$ und a_n, $a_n^\dagger$. Wie bereits früher diskutiert und in diesem Abschnitt erneut bestätigt, bleiben dabei die Slaterdeterminanten bis auf einen eventuellen Normierungsfaktor unverändert. Es soll nun gezeigt werden, daß man mit den Operatoren $a_i^\dagger$, a_i und $a_n^\dagger$, a_n und entsprechenden für die $<\chi' \,|$, $|\, \chi>$ auskommt, um die Theorie vollständig beschreiben zu können. Da die beiden Slaterdeterminanten $<\Phi' \,|$ und $|\, \Phi>$ bereits durch diese Operatoren konstruiert werden, muß also noch erläutert werden, wie symmetrische Fockraum–Operatoren durch eine Biorthonormalbasis dargestellt werden können. Der Einteilchenoperator O sei erklärt durch seine Matrixelemente in der biorthogonalen Basis $<\alpha' \,|$, $|\, \alpha>$

$$O = \sum_{\alpha\beta} \frac{|\, \alpha><\alpha' \,|\, O \,|\, \beta><\beta' \,|}{<\alpha' \,|\, \alpha><\beta' \,|\, \beta>}. \tag{2.62}$$

Der symmetrische Einteilchenoperator $O_N = O^1 + O^2 + \cdots + O^N$ hat im N-Teilchenraum die Wirkung

$$O_N |\, 1 \ldots N> = \sum_{i=1}^{N} \sum_{\alpha} \frac{<\alpha' \,|\, O \,|\, i>}{<\alpha' \,|\, \alpha>} |\, 1 \ldots \alpha \ldots N> . \tag{2.63}$$

Dieselbe Wirkung hat der Fockraumoperator

$$\hat{O} = \sum_{\alpha\beta} \frac{<\alpha' \,|\, O \,|\, \beta>}{<\alpha' \,|\, \alpha><\beta' \,|\, \beta>} a_\alpha^\dagger a_\beta, \tag{2.64}$$

wie man leicht mit Hilfe folgender Beziehung herleitet

$$[\hat{O}, a^\dagger_\gamma]_- = \sum_{\alpha\beta} \frac{<\alpha' \,|\, O \,|\, \beta>}{<\alpha' \,|\, \alpha><\beta' \,|\, \beta>} [a^\dagger_\alpha a_\beta, a^\dagger_\gamma]_- = \sum_\alpha \frac{<\alpha' \,|\, O \,|\, \gamma> a^\dagger_\alpha}{<\alpha' \,|\, \alpha>}. \qquad (2.65)$$

Ganz analog schreiben sich symmetrische K–Teilchenoperatoren $\mathcal{V}$ im Fockraum in einer Biorthogonalbasis als

$$\mathcal{V} = \frac{1}{K!}\frac{1}{K!} \sum_{\substack{\alpha_1 \cdots \alpha_K \\ \beta_1 \cdots \beta_K}} \bar{v}_{\alpha'_1 \ldots \alpha'_K \beta_1 \ldots \beta_K} a^\dagger_{\alpha_1} \cdots a^\dagger_{\alpha_K} a_{\beta_K} \cdots a_{\beta_1}, \qquad (2.66)$$

mit antisymmetrisierten Matrixelementen

$$\bar{v}_{\alpha'_1 \ldots \alpha'_K \beta_1 \ldots \beta_K} = \frac{v_{\alpha'_1 \ldots \alpha'_K \beta_1 \ldots \beta_K}}{n_{\alpha_1} \cdots n_{\beta_K}}, \qquad (2.67)$$

und $n_{\alpha_i} =<\alpha'_i \,|\, \alpha_i>$. Damit ist dargelegt, wie Fockraumoperatoren sich in einer, in unserem Fall aus $<\Phi' \,|$ und $|\, \Phi>$ gewonnenen, biorthogonalen Basis darstellen lassen.

Wählt man anstatt einer biorthogonalen zwei orthogonale Basen a_α, a^+_α und b_β, b^+_β, so gelangt man zu

$$\hat{O} = \sum_{\alpha\beta} \frac{<\alpha \,|\, O \,|\, \beta>}{<\alpha \,|\, \alpha><\beta \,|\, \beta>} a^+_\alpha b_\beta, \qquad (2.68)$$

oder im allgemeinen Fall zweier Biorthogonalbasen mit jeweils $[a_\alpha, a^\dagger_\beta]_+ = \delta_{\alpha\beta} <a'_\alpha \,|\, a_\alpha>$ und $[b_\alpha, b^\dagger_\beta]_+ = \delta_{\alpha\beta} <b'_\alpha \,|\, b_\alpha>$

$$\begin{aligned} \hat{O} &= \sum_{\alpha\beta} \frac{<a'_\alpha \,|\, O \,|\, b_\beta>}{<a'_\alpha \,|\, a_\alpha><b'_\beta \,|\, b_\beta>} a^\dagger_\alpha b_\beta, \\ &= \sum_{\alpha\beta} <0 \,|\, a_\alpha \, \hat{O} \, b^\dagger_\beta \,|\, 0> \frac{a^\dagger_\alpha b_\beta}{n_{a_\alpha} n_{b_\beta}}. \end{aligned} \qquad (2.69)$$

Alle diese Darstellungen können verwendet werden, denn die Kontraktionen 2.59 und 2.60 sind für allgemeine Operatoren bekannt. Die Verwendung *eines* Biorthogonalsystems bedeutet jedoch diagonale Kofaktoren und wird auf die vereinfachte Version der antisymmetrischen TIMF führen.

Bisher haben wir uns auf ein Matrixelement eines Typs beschränkt. In der TIMF kommen drei verschiedene Arten von Matrixelementen vor, neben $<\Phi' \,|\, \cdots \,|\, \Phi>$ auch $<\chi' \,|\, \cdots \,|\, \Phi>$ und $<\Phi' \,|\, \cdots \,|\, \chi>$. Alle drei haben ein verschiedenes zu den jeweiligen Rechts– und Linksvakua korrespondierendes natürliches Biorthogonalsystem. Die zu $<\Phi' \,|\, \cdots \,|\, \Phi>$ gehörenden Operatoren seien weiterhin mit $a^\dagger_\alpha$ und a_β bezeichnet, die Biorthogonaloperatoren der beiden anderen Matrixelementtypen mit $a^\dagger_{\chi_\alpha}$, a_{χ_β} und $a^\dagger_{\chi'_\alpha}$, $a_{\chi'_\beta}$, so daß beispielsweise geschrieben wird

$$\begin{aligned} |\chi> &= \left(\prod_{i=1}^{N} a^\dagger_{\chi_i}\right) |0>, \\ <\chi'| &= <0| \left(\prod_{i=1}^{N} a_{\chi'_i}\right). \end{aligned} \tag{2.70}$$

Haben wir die $a^\dagger_i$ und a_i nach Gl.2.51 erhalten, so können wir diese auch als Lochoperatoren für die beiden χ, χ'–Matrixelemente verwenden. Denn die Freiheit durch lineare Transformationen der χ_i bzw. χ'_i–Orbitale reicht aus, diese in Bezug auf die festgehaltenen φ_i bzw. φ'_i zu biorthogonalisieren. Diese biorthogonalen Lochorbitale können jeweils zu einem vollständigen Biorthogonalsystem ergänzt werden. Man erhält so entsprechend den drei Typen von Matrixelementen drei Biorthogonalsysteme, die die φ_i und/oder φ'_i–Lochorbitale gemeinsam haben, d.h. bis auf einen evtl. unterschiedlichen Normierungsfaktor

$$a_{\chi_i} = a_i, \quad a^\dagger_{\chi'_i} = a^\dagger_i. \tag{2.71}$$

Die Operatoren werden dann am günstigsten jeweils in den so definierten „natürlichen" Biorthogonalsytemen ausgedrückt. Wir geben noch einen Überblick über diese drei Biorthogonalsysteme:

$\lvert\chi>$	$<\Phi'\rvert$	$\lvert\Phi>$	$<\chi'\rvert$	Lochvakuum
$a^\dagger_{\chi_i}$	$a_{\chi_i} = a_i$	$a^\dagger_i = a^\dagger_{\chi'_i}$	$a_{\chi'_i}$	für $i < N$
$a^\dagger_{\chi_n}$	$a_{\chi_n} \neq a_n$	$a^\dagger_n \neq a^\dagger_{\chi'_n}$	$a_{\chi'_n}$	für $n > N$

(2.72)

Nebeneinanderstehende, nur durch einen Strich getrennte Erzeuger und Vernichter sind darin biorthogonal.

Es verbleibt noch zu zeigen, wie sich Variationen von Slaterdeterminanten in diesem Biorthonormalsystem ausdrücken lassen. Aus der Thouless–Parametrisierung 2.47 erhält man durch Variation nach den z_{ni}

$$\frac{\delta|\Phi>}{\delta z_{ni}} = \frac{\delta|\Phi>}{\delta|\varphi_i>}|\varphi_n> = a'^{+}_n a'_i|\Phi> . \tag{2.73}$$

Die entsprechende Variation von $<\Phi'|$ ließe sich in den orthogonalen a'', a''^{+} schreiben. Der kanonischen Transformation 2.51 entnimmt man nun $a_i = a'_i$ und $a'^{+}_n = a^\dagger_n$, und in der Tat rechnet man aufgrund der biorthogonalen Vertauschungsrelationen auch nach, daß wie gewünscht gilt:

$$\begin{aligned} a^\dagger_n \frac{a_i}{n_i}|\varphi_1 \cdots \varphi_N> &= |\varphi_1 \cdots \varphi_n \cdots \varphi_N>, \\ <\varphi'_1 \cdots \varphi'_N| \frac{a^\dagger_i}{n_i} a_n &= <\varphi'_1 \cdots \varphi'_n \cdots \varphi'_N|. \end{aligned} \tag{2.74}$$

Arbeitet man mit zwar biorthogonalen, aber nicht binormierten Orbitalen $<\varphi'_i|\varphi_j> = n_i\delta_{ij}$ aus dem Biorthogonalsystem der a, $a^\dagger$ mit $[a_\alpha, a^\dagger_\beta]_+ =$

$<\varphi'_\alpha\,|\,\varphi_\beta>\delta_{\alpha\beta}$, müssen also entsprechende Normierungsfaktoren $1/<\varphi'_i\,|\,\varphi_i> = 1/n_i$ mit aufgenommen werden. Die orthogonalen Variationen in der einen gewählten Biorthogonalbasis ausgedrückt lauten daher

$$\begin{aligned}
<\varphi'_n\,|\frac{\delta<\Phi'\,|}{\delta<\varphi'_i\,|} &= <\Phi'\,|\frac{a_i^\dagger a_n}{n_i}, \\
\frac{\delta|\,\Phi>}{\delta|\,\varphi_i>}|\,\varphi_n> &= \frac{a_n^\dagger a_i}{n_i}|\,\Phi>\,.
\end{aligned} \tag{2.75}$$

Die Variationen können also durch das aus den Φ und Φ' entstehende Biorthogonalsystem ausgedrückt werden. In den Matrixelementen, die χ oder χ' enthalten, muß nun die gleiche Variation verwendet werden. In diesen Matrixelementen ist aber das aus Φ' und χ oder χ' und Φ konstruierte Biorthogonalsystem das natürliche, welches die Kofaktoren diagonalisiert. Berücksichtigen wir jetzt die entsprechende Normierung der Lochorbitale, also

$$\begin{aligned}
[a_{\chi'_j}, a_i^\dagger]_+ &= <\chi'_j\,|\,\varphi_i>\delta_{ij}, \\
[a_j, a_{\chi_i}^\dagger]_+ &= <\varphi'_j\,|\,\chi_i>\delta_{ij},
\end{aligned} \tag{2.76}$$

so stellen sich die Variationen in den χ, χ'–Matrixelementen folgendermaßen dar

$$\begin{aligned}
\frac{1}{<\varphi'_i\,|\,\varphi_i>}a_n^\dagger a_i|\,\varphi_1\cdots\varphi_N> &= \frac{1}{<\chi'_i\,|\,\varphi_i>}a_n^\dagger a_{\chi'_i}|\,\varphi_1\cdots\varphi_N>, \\
\frac{1}{<\varphi'_i\,|\,\varphi_i>}<\varphi'_1\cdots\varphi'_N\,|a_i^\dagger a_n &= \frac{1}{<\varphi'_i\,|\,\chi_i>}<\varphi'_1\cdots\varphi'_N\,|a_{\chi_i}^\dagger a_n.
\end{aligned} \tag{2.77}$$

In der TIMF–Gleichung muß die Variation von $<\Phi'\,|$ in dem $<\Phi'\,|\cdots|\,\Phi>$–Matrixelement dieselbe sein wie in dem $<\Phi'\,|\cdots|\,\chi>$–Matrixelement. In beiden Matrixelementen muß daher derselbe Operator a_n stehen. Dasselbe gilt für Variationen von $|\,\Phi>$ und den Operator $a_n^\dagger$. Wählt man die Operatoren a_n oder $a_n^\dagger$ aus dem Φ'–Φ–Biorthogonalsystem, dann stammen sie bzgl. der Φ'–χ– oder χ'–Φ–Matrixelemente nicht aus deren natürlichem Φ'–χ– oder χ'–Φ–Biorthogonalsystem. Das Auswerten von Matrixelementen, in denen solche nicht dem natürlichen Biorthogonalsystem entstammende Operatoren auftauchen, bereitet aber mit Hilfe der Formeln 2.59, 2.60 keine Schwierigkeiten.

Hinzu kommt im Vergleich zu Eigenwertproblemen eine Besonderheit inhomogener Gleichungen. Wir dürfen uns hierbei nicht auf orthogonale Variationen beschränken, sondern müssen auch Variationen der Gestalt $a_i^\dagger a_i$ zulassen, wenn wir die Mean–Field–Gleichungen in einer beliebigen Basis, also z.B. Impuls– oder Ortskoordinaten, erhalten wollen. Im Gegensatz zu Eigenwertgleichungen darf nämlich E, welches im inhomogenen Fall fest vorgegeben wird, nicht aus der Gleichung herausfallen, was ansonsten wegen $<\Phi'\,|\,a_i^\dagger a_n E\,|\,\Phi>=0$ der Fall wäre. Denken wir uns die beliebige Basis $<x'\,|$,

$|\,x>$ in dem Biorthogonalsystem der a_α, $a_\alpha^\dagger$ mit Koeffizienten $c_{x\alpha}$ und $c'_{x\alpha}$ entwickelt

$$\begin{aligned} a_x^\dagger &= \sum_\alpha c_{x\alpha} a_\alpha^\dagger, \\ a_x &= \sum_\alpha c'_{x\alpha} a_\alpha. \end{aligned} \tag{2.78}$$

Bei χ–, χ'–Matrixelementen stellen wir uns die Entwicklung in den entsprechenden Biorthogonalsystemen vor. Die Basis x kann ebenfalls eine Biorthogonalbasis sein, wird aber in der Regel eine Orthonormalbasis darstellen. Man gelangt dann zu den Variationsgleichungen in x-Darstellung bei Verwendung folgender Variationen

$$\begin{aligned} <x\,|\frac{\delta <\Phi'\,|}{\delta <\varphi_i'\,|} &= \frac{<\Phi'\,|a_i^\dagger a_x}{<\varphi_i'\,|\,\varphi_i>} = \frac{<\Phi'\,|a_i^\dagger(a_i + \sum_{n>N} c'_{xn} a_n^\dagger)}{<\varphi_i'\,|\,\varphi_i>}, \\ \frac{\delta|\,\Phi>}{\delta|\,\varphi_i>}|\,x> &= \frac{a_x^\dagger a_i|\,\Phi>}{<\varphi_i'\,|\,\varphi_i>} = \frac{(a_i^\dagger + \sum_{n>N} c_{xn} a_n^\dagger)a_i|\,\Phi>}{<\varphi_i'\,|\,\varphi_i>}, \end{aligned} \tag{2.79}$$

wobei auch nicht (bi)normierte biorthogonale Vakua mit erfaßt sind. Jetzt sind wir in der Lage, die TIMF–Gleichungen in zweiter Quantisierung zu schreiben. Exemplarisch formulieren wir diese für das additive Funktional zur Berechnung von Matrixelementen von $\mathcal{G}$, die zusätzlichen Probleme bei nur partieller Antisymmetrisierung werden im Anhang B behandelt. Dafür lauten die TIMF-Gleichungen als inhomogene Fassung des aus der HF–Theorie bekannten Brillouin–Theorems

$$\frac{1}{<\varphi_i'\,|\,\varphi_i>} <\Phi'\,|\,a_i^\dagger a_x(E-\mathcal{H})\,|\,\Phi> \;=\; \frac{1}{<\varphi_i'\,|\,\chi_i>} <\Phi'\,|\,a_{\chi_i}^\dagger a_x\,|\,\chi>, \tag{2.80}$$

$$\frac{1}{<\varphi_i'\,|\,\varphi_i>} <\Phi'\,|\,(E-\mathcal{H})a_x^\dagger a_i\,|\,\Phi> \;=\; \frac{1}{<\chi_i'\,|\,\varphi_i>} <\chi'\,|\,a_x^\dagger a_{\chi_i'}\,|\,\Phi>\,. \tag{2.81}$$

Hierbei sind die nur für das additive Funktional notwendigen Normierungsfaktoren explizit angegeben, und es gilt $<\Phi'\,|\,\Phi>= \det\beta$, $<\chi'\,|\,\Phi>= \det\alpha'$ und $<\Phi'\,|\,\chi>= \det\alpha$. Damit sind alle notwendigen Vorarbeiten für eine Formulierung der TIMF in zweiter Quantisierung geleistet. Die Auswertung dieser Matrixelemente anhand des Wickschen Theorems wird wesentlich vereinfacht durch eine Formulierung in Diagrammen.

2.4 TIMF–Diagrammregeln

Am geeignesten für unsere Zwecke sind Diagramme direkt unter Verwendung der antisymmetrischen Matrixelemente, also in Hugenholtz-Darstellung, und in einer zeitunabhängigen Fasssung. Dazu müssen zum einen den

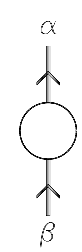
Operatoren in den Diagrammen Vertizes und den Kontraktionen (Loch– oder Teilchen–)Linien zugeordnet werden. Zum anderen müssen das Vorzeichen und eventuelle Symmetriefaktoren bestimmt werden. Die Regeln lauten:

1. Operatoren: Die Operatoren werden, wie sie von links nach rechts im Matrixelement vorkommen, von oben nach unten im Diagramm als Vertizes abgetragen. Die Reihenfolge ist dabei bedeutsam.

   (a) Einteilchenoperatoren wie

   $$\mathcal{T} = \sum_{\alpha\beta} \bar{t}_{\alpha'\beta} a_\alpha^\dagger a_\beta \tag{2.82}$$

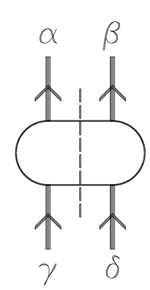
   mit $\bar{t}_{\alpha'\beta} = t_{\alpha'\beta}/(n_\alpha n_\beta)$ werden mit einem Vertex bezeichnet, in den eine Loch– oder Teilchenlinie mit Index β hineinführt und aus dem eine Loch– oder Teilchenlinie mit Index α herausführt:

   (b) Zweiteilchenoperatoren wie

   $$\mathcal{V} = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha'\beta'\gamma\delta}\, a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\delta a_\gamma \tag{2.83}$$

   mit
   $$\bar{v}_{\alpha'\beta'\gamma\delta} = \frac{v_{\alpha'\beta'\gamma\delta}}{n_\alpha n_\beta n_\gamma n_\delta}$$
   werden mit einem Vertex bezeichnet, in den zwei Loch– oder Teilchenlinien mit Indizes γ und δ hineinführen und aus dem zwei Loch– oder Teilchenlinien mit Indizes α und β herausführen. Um ein eindeutiges Vorzeichen zu bekommen, denken wir uns bei der unten erläuterten Bestimmung der Schleifenzahl den Vertex in die Indexpaare $(\alpha,\, \gamma)$ und $(\beta,\, \delta)$ aufgespalten:

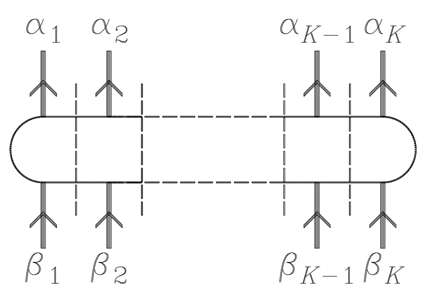
(c) K–Teilchenoperatoren wie

$$\mathcal{V} = \frac{1}{K!}\frac{1}{K!}\sum_{\substack{\alpha_1\cdots\alpha_K\\ \beta_1\cdots\beta_K}} \bar{v}_{\alpha'_1\ldots\alpha'_K\beta_1\ldots\beta_K} a^\dagger_{\alpha_1}\cdots a^\dagger_{\alpha_K} a_{\beta_K}\cdots a_{\beta_1} \qquad (2.84)$$

mit antisymmetrisierten Matrixelementen

$$\bar{v}_{\alpha'_1\ldots\alpha'_K\beta_1\ldots\beta_K} = \frac{v_{\alpha'_1\ldots\alpha'_K\beta_1\ldots\beta_K}}{n_{\alpha_1}\cdots n_{\beta_K}}$$

werden analog mit einem Vertex bezeichnet, in den K Loch– oder Teilchenlinien hineinführen und aus dem K Loch– oder Teilchenlinien herausführen. Zur unten erläuterten Bestimmung des Vorzeichens bilden wir jeweils die Indexpaare (α_i,β_i):



2. Kontraktionen: Allgemeine Kontraktionen 2.59 und 2.60 werden durch einen Pfeil vom Erzeuger zum Vernichter gekennzeichnet:

$$\overline{c^\dagger_\alpha c_\beta} = \rho_{\beta\alpha}\,, \qquad \overline{c_\alpha c^\dagger_\beta} = <\alpha\,|\,\beta> - \rho_{\alpha\beta}, \qquad (2.85)$$

Diese allgemeinen Kontraktionen kann man durch Entwickeln der Orbitale nach Teilchen und Löchern auf zwei grundlegende Typen nichtverschwindender Kontraktionen zurückführen. Im Beispiel der Matrixelemente vom Typ $<\Phi'\,|\cdots|\,\Phi>$ sind das:

(a) Die reinen Loch–Loch–Kontraktionen $\overline{a^\dagger_j a_i} = \rho_{ij}$ werden nach Vorschrift 2.85 durch einen Pfeil nach unten dargestellt.

(b) Die reinen Teilchen–Teilchen–Kontraktionen $\overline{a_n a^\dagger_m} = <\varphi'_n\,|\,\varphi_m>$ werden nach Vorschrift 2.85 durch einen Pfeil nach oben dargestellt.

Bei *biorthogonalen* Erzeugern und Vernichtern ergibt sich

$$\overline{a_i^\dagger a_j} = \delta_{ij} < \varphi_i' \,|\, \varphi_j >, \quad \overline{a_n a_m^\dagger} = \delta_{nm} < \varphi_n' \,|\, \varphi_m >, \tag{2.86}$$

bei *biorthonormalen* Erzeugern und Vernichtern ist damit

$$\overline{a_i^\dagger a_j} = \delta_{ij}, \quad \overline{a_n a_m^\dagger} = \delta_{nm}. \tag{2.87}$$

Tauchen Operatoren auf, die keinen reinen Teilchen– oder Lochcharakter haben, brauchen diese aber nicht nach Teilchen– und Lochorbitalen entwickelt zu werden, sondern es können direkt die allgemeinen Kontraktionen 2.59, 2.60 verwendet werden. Für den beliebigen Operator a_x, der *kein* Teilchen– oder Lochorbital darstellen muß, ergibt sich so mit $i < N$ und $n > N$

$$\overline{a_i^\dagger a_x} =< x' \,|\, \varphi_i >, \quad \overline{a_n^\dagger a_x} = 0, \tag{2.88}$$

$$\overline{a_x a_n^\dagger} =< x' \,|\, \varphi_n >, \quad \overline{a_x a_i^\dagger} = 0, \tag{2.89}$$

und für $a_x^\dagger$

$$\overline{a_x^\dagger a_i} =< \varphi_i' \,|\, x >, \quad \overline{a_x^\dagger a_n} = 0, \tag{2.90}$$

$$\overline{a_n a_x^\dagger} =< \varphi_n' \,|\, x >, \quad \overline{a_i a_x^\dagger} = 0. \tag{2.91}$$

Bei beliebigen Loch– oder Teilchenorbitalen α heißt das

$$\overline{a_\alpha^\dagger a_x} =< x' \,|\, \varphi_\alpha > \Theta(N-\alpha), \quad \overline{a_x a_\alpha^\dagger} =< x' \,|\, \varphi_\alpha > \Theta(\alpha - N), \tag{2.92}$$

und

$$\overline{a_x^\dagger a_\alpha} =< \varphi_\alpha' \,|\, x > \Theta(N-\alpha), \quad \overline{a_\alpha a_x^\dagger} =< \varphi_\alpha' \,|\, x > \Theta(\alpha - N). \tag{2.93}$$

Dies gilt entsprechend für Kontraktionen in Matrixelementen der Form $< \Phi' \,|\, \cdots \,|\, \chi >$ oder $< \chi' \,|\, \cdots \,|\, \Phi >$, also z.B.

$$\overline{a_{\chi_i}^\dagger a_x} =< x' \,|\, \chi_i > . \tag{2.94}$$

3. Auswertung des Matrixelements: Die Vertizes werden auf alle möglichen Arten durch Linien (Kontraktionen) übereinstimmender Pfeilrichtung vollständig verbunden. Verschiedene Indizes an einem Vertex werden dabei *nicht* unterschieden (Hugenholtz–Repräsentation). Der Beitrag eines Diagramms ergibt sich dann durch Multiplikation des Vakuumüberlapps, z.B. $< \Phi' \,|\, \Phi >= \det \beta$, mit allen auftretenden Kontraktionen und Operatormatrixelementen wie beispielsweise $\bar{t}_{\alpha'\beta}$, $\bar{v}_{\alpha'\beta'\gamma\delta}$ oder $\bar{v}_{\alpha_1' \ldots \alpha_K' \beta_1 \ldots \beta_K}$ unter Weglassung der Faktoren $\frac{1}{4}$ bzw. $\frac{1}{K!}\frac{1}{K!}$. (Alternativ kann bei der Bildung der Diagramme zwischen verschiedenen Indizes eines Vertex unterschieden werden, dann entstehen entsprechend mehr

unterschiedliche Diagramme, und die genannten Faktoren müssen mitgenommen werden.) Anschließend werden alle auftretenden Summen ausgeführt. Kontraktionen eines Vertex mit sich selbst können unter diesen Umständen nur Loch-Loch–Kontraktionen sein. Nach Bestimmung des Vorzeichens eines jeden Diagrammes ergibt die Summe der Diagrammbeiträge den Wert des gesuchten Matrixelements.

4. Bestimmung des Vorzeichens: Jede Lochlinie und jede geschlossene Schleife trägt ein Minuszeichen. Das Vorzeichen eines Diagramms ergibt sich als $(-1)^{L+S}$, mit L der Anzahl von Lochlinien und S der Anzahl geschlossener Schleifen. Eine Lochlinie ist eine Linie mit Pfeil nach oben. Eine geschlossene Schleife ist ein geschlossener Linienzug von Loch– oder Teilchenlinien, der den Vertex stets beim Partnerindex des Eingangsindex verläßt. Mehrteilchenvertizes werden also zur Schleifenbestimmung entsprechend der Indexpaarung zu Zweiteilchenvertizes auseinandergezogen. Dies muß, für jede Schleife gleich, konsistent zur einmal festgelegten Indexpaarung geschehen. Ansonsten ist die Paarung von Erzeugern mit Vernichtern innerhalb der Vertizes beliebig. Das sich bei Vertauschen zweier Operatoren ändernde Vorzeichen der Matrixelemente wird durch eine um eins geänderte Anzahl von Schleifen wieder ausgeglichen, so daß die Auswertung der Diagramme zum selben Resultat führt. Da nur die beiden erwähnten und keine Kontraktionen zwischen zwei Erzeugern oder zwei Vernichtern (anormale Kontraktionen) auftreten, ändert sich die Richtung der Pfeile beim Durchlaufen einer Schleife nicht.

5. Äquivalente Linien: Äquivalente Linien sind (einfache) Linien, die vom gleichen Anfangsvertex in gleicher Richtung zum gleichen Endvertex laufen, und über deren Indizes summiert wird. Hier ist der ganze Vertex und nicht ein Indexpaar des Vertex gemeint, denn äquivalente Linien können nicht im gleichen Indexpaar beginnen oder enden. Um eine Überzählung aufgrund des Weglassens des Faktors $\frac{1}{4}$ bzw. $\frac{1}{K!}\frac{1}{K!}$ zu vermeiden, wird beim Auftreten äquivalenter Linien zur Korrektur ein Symmetriefaktor benötigt. Für ein Paar äquivalenter Linien lautet dieser $\frac{1}{2}$, allgemein ergibt sich für ein n–Tupel äquivalenter Linien ein Symmetriefaktor von $\frac{1}{n!}$.

Beispiele für die Anwendung der Diagrammregeln finden sich in den nächsten Abschnitten. Die Regeln ergeben sich aus einer Anpassung allgemeiner Diagrammregeln an die spezielle Situation von zeitunabhängigen Hugenholtz–Diagrammen.

2.5 TIMF in Diagrammen

Die angegebenen Diagrammregeln versetzen uns in die Lage, die TIMF-Gleichungen 2.80 auswerten zu können. Beginnen wir mit dem Matrixelement

$$< \Phi' \,|\, \frac{a_i}{n_i}^{\dagger} a_x (E - \mathcal{H}) \,|\, \Phi >, \tag{2.95}$$

mit $\mathcal{H} = \mathcal{T} + \mathcal{V}$. Da $a_x = \sum_\alpha c'_\alpha a_\alpha$ Teilchen– und Lochkomponenten besitzt, werden sowohl Teilchen–Loch–Matrixelemente

$$< hp \,|\, (E - \mathcal{H}) \,|\, \Phi > = < \Phi' \,|\, \frac{a_i}{n_i}^{\dagger} a_n (E - \mathcal{H}) \,|\, \Phi >, \tag{2.96}$$

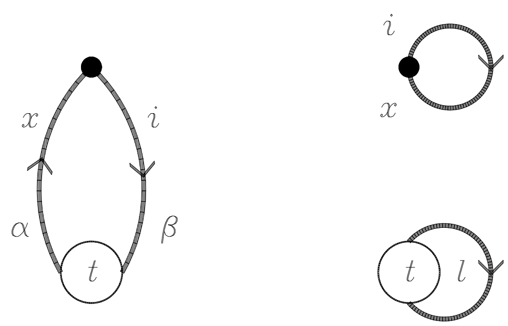
als auch Vakuumerwartungswerte benötigt

$$< \Phi' \,|\, (E - \mathcal{H}) \,|\, \Phi > = < \Phi' \,|\, \frac{a_i}{n_i}^{\dagger} a_i (E - \mathcal{H}) \,|\, \Phi > . \tag{2.97}$$

Der E–Term besteht nur aus einer einzigen Kontraktion

$$< \Phi' \,|\, \frac{a_i}{n_i}^{\dagger} a_x E \,|\, \Phi > = \frac{< \Phi' \,|\, \Phi >}{< \varphi'_i \,|\, \varphi_i >} < x' \,|\, \varphi_i > E. \tag{2.98}$$

Beim $\mathcal{T}$–Matrixelement tragen zwei Diagramme mit jeweils zwei Kontraktionen bei:



Das Vorzeichen der Diagramme ist jeweils positiv, denn pro Schleife ist eine Lochlinie vorhanden. Wir lesen ab

$$\begin{aligned}
- < \Phi' \,|\, \frac{a_i}{n_i}^{\dagger} a_x \mathcal{T} \,|\, \Phi > = & - \frac{\det \beta}{< \varphi'_i \,|\, \varphi_i >} \times \\
& \sum_{\alpha,\beta=1}^{\infty} \Bigg(\delta_{i\beta} < \varphi'_i \,|\, \varphi_i > \frac{< \varphi'_\alpha \,|\, t \,|\, \varphi_\beta >}{< \varphi'_\alpha \,|\, \varphi_\alpha > < \varphi'_\beta \,|\, \varphi_\beta >} \Theta(\alpha - N) < x' \,|\, \varphi_\alpha > \\
& + < x' \,|\, \varphi_i > \frac{< \varphi'_\alpha \,|\, t \,|\, \varphi_\beta >}{< \varphi'_\alpha \,|\, \varphi_\alpha > < \varphi'_\beta \,|\, \varphi_\beta >} \delta_{\alpha\beta} \Theta(N - \alpha) < \varphi'_\alpha \,|\, \varphi_\alpha > \Bigg) \qquad (2.99) \\
= & - \frac{< \Phi' \,|\, \Phi >}{< \varphi'_i \,|\, \varphi_i >} \left(\sum_{n>N} \frac{< x' \,|\, \varphi_n > < \varphi'_n \,|\, t \,|\, \varphi_i >}{< \varphi'_n \,|\, \varphi_n >} + \sum_{l<N} \frac{< \varphi'_l \,|\, t \,|\, \varphi_l >}{< \varphi'_l \,|\, \varphi_l >} < x' \,|\, \varphi_i > \right) .
\end{aligned}$$

Durch die Θ–Funktion wird die Summation auf Löcher bzw. Teilchen beschränkt. Definieren wir nun die (nichthermitischen) Projektoren auf den Teilchen– bzw. Lochraum

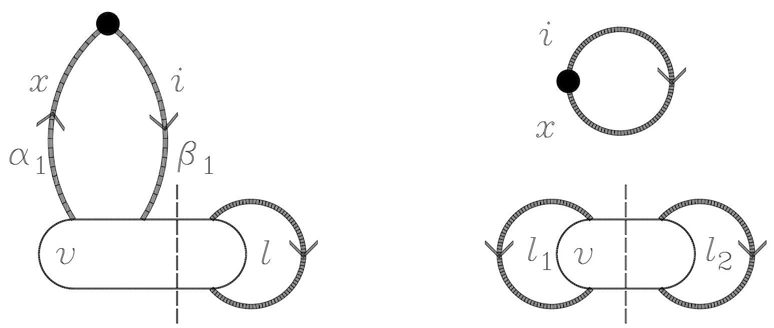
$$\sum_{n>N} \frac{|\, \varphi_n > < \varphi'_n \,|}{< \varphi'_n \,|\, \varphi_n >} = \mathcal{P}_p, \tag{2.100}$$

$$\sum_{i<N} \frac{|\, \varphi_i > < \varphi'_i \,|}{< \varphi'_i \,|\, \varphi_i >} = \mathcal{P}_h, \tag{2.101}$$

mit $\mathcal{P}_h + \mathcal{P}_p = 1$, so erhalten wir

$$-<\Phi'\,|\,\frac{a_i}{n_i}^{\dagger} a_x \mathcal{T}\,|\,\Phi>= -\frac{\det\beta}{n_i} <x'\,|\,(\mathcal{P}_p t + \sum_{l<N}\frac{t_{l'l}}{n_l})\,|\,\varphi_i> . \tag{2.102}$$

Ganz analog ergeben sich für das $\mathcal{V}$–Matrixelement zwei Diagramme mit jeweils drei Kontraktionen:



Aufgrund des einen vorhandenen Paares äquivalenter Linien tritt beim Vakuumerwartungswert von $\mathcal{V}$ der Faktor $1/2$ auf und man bekommt

$$-<\Phi'\,|\,\frac{a_i}{n_i}^{\dagger} a_x \mathcal{V}\,|\,\Phi>= -\frac{\det\beta}{n_i} <x'\,|\,(\mathcal{P}_p \sum_{j<N}\frac{v_{\cdot j'\cdot j}}{n_j} + \frac{1}{2}\sum_{k,l<N}\frac{v_{k'l'kl}}{n_k n_l})\,|\,\varphi_i> . \tag{2.103}$$

Zusammengefaßt lautet das Resultat

$$\begin{aligned} &<\Phi'\,|\,\frac{a_i}{n_i}^{\dagger} a_x (E-\mathcal{H})\,|\,\Phi>= \\ &\quad \frac{\det\beta}{n_i} <x'\,|\,\left(E - \mathcal{P}_p\left[t + \sum_{j<N}\frac{v_{\cdot j'\cdot j}}{n_j}\right] - \sum_{l<N}\frac{t_{l'l}}{n_l} - \frac{1}{2}\sum_{k,l<N}\frac{v_{k'l'kl}}{n_k n_l}\right)\,|\,\varphi_i>, \end{aligned} \tag{2.104}$$

oder mit $h = t + U$ und $U = \sum_{j<N}\frac{v_{\cdot j'\cdot j}}{n_j}$ sowie $<\overline{\mathcal{H}}>= \frac{<\Phi'\,|\,\mathcal{H}\,|\,\Phi>}{<\Phi'\,|\,\Phi>}$

$$\begin{aligned} <\Phi'\,|\,\frac{a_i}{n_i}^{\dagger} a_x (E-\mathcal{H})\,|\,\Phi> &= \\ &\frac{\det\beta}{n_i} <x'\,|\,(E - \mathcal{P}_p h - <\overline{\mathcal{H}}>)\,|\,\varphi_i> \\ = \; &\frac{\det\beta}{n_i} <x'\,|\,(E - h + \mathcal{P}_h h - <\overline{\mathcal{H}}>)\,|\,\varphi_i> . \end{aligned} \tag{2.105}$$

Wählt man wie im Kapitel 1 nun h im Lochraum diagonal

$$h_{ij} = \delta_{ij}(t_{i'i} + \sum_{l=1}^{N}\frac{v_{i'l'il}}{n_l}) = n_i \epsilon_i \delta_{ij}, \tag{2.106}$$

so ensteht aus $\mathcal{P}_h h|\varphi_i>=\epsilon_i|\varphi_i>$ der i–abhängige Teil der Selbstenergie

$$
\begin{aligned}
&<\Phi'\,|\,\frac{a_i}{n_i}^{\dagger}a_x(E-\mathcal{H})\,|\,\Phi>= \\
&\qquad \frac{\det\beta}{n_i}<x'\,|\,(E-h+\epsilon_i-<\overline{\mathcal{H}}>)\,|\,\varphi_i> \\
&= \quad \frac{\det\beta}{n_i}<x'\,|\,(\eta_i-h)\,|\,\varphi_i>,
\end{aligned}
\tag{2.107}
$$

mit der gesamten Selbstenergie $\eta_i = E+\epsilon_i-<\overline{\mathcal{H}}>$. Darin erkennen wir die Gleichung 1.87 wieder.

Alternativ kann man die Vektoren $<x'\,|$ in einen Loch– und einen Teilchenanteil aufspalten

$$
<x'\,|=\sum_{i<N}c'_{xi}<\varphi'_i\,|+\sum_{n>N}c'_{xn}<\varphi'_n\,|=<x'_h\,|+<x'_p\,|,
\tag{2.108}
$$

und gelangt damit ausschließlich mit reinen Loch–Loch– und Teilchen–Teilchen–Kontraktionen auf

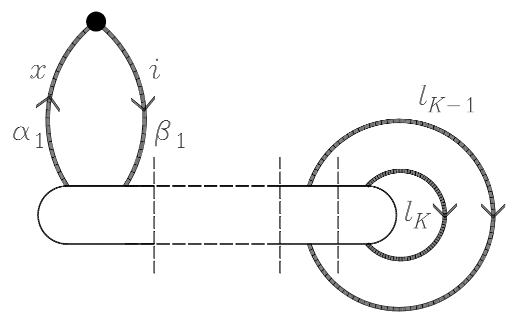
$$
\begin{aligned}
&<\Phi'\,|\,\frac{a_i}{n_i}^{\dagger}a_x(E-\mathcal{H})\,|\,\Phi>= \\
&\quad \frac{\det\beta}{n_i}<x'_h\,|\,E-\sum_{l=1}^{N}\frac{t_{l'l}}{n_l}-\frac{1}{2}\sum_{k,l=1}^{N}\frac{v_{k'l'kl}}{n_k n_l}\,|\,\varphi_i>+<x'_p\,|\,t-\sum_{l=1}^{N}\frac{v_{\cdot l'\cdot l}}{n_l}\,|\,\varphi_i>.
\end{aligned}
\tag{2.109}
$$

Darin sind die ϵ_i noch nicht sichtbar. Um zu einer Gleichung in x–Darstellung zu gelangen, muß $<x'\,|=<x'_h+x'_p\,|$ nach links ausgeklammert werden. Dabei entsteht beim Teilchen–Loch–Term ein zusätzlicher Ausdruck

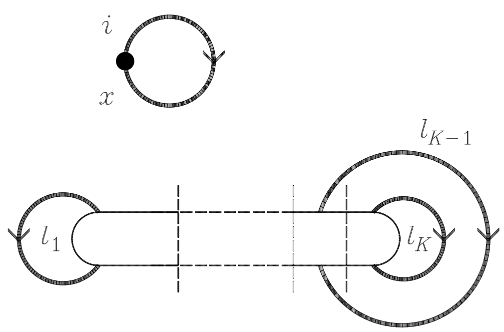
$$
\begin{aligned}
&<x'_p\,|\,t-\sum_{l=1}^{N}\frac{v_{\cdot l'\cdot l}}{n_l}\,|\,\varphi_i>= \\
&\qquad <x'_h+x'_p\,|\,t-\sum_{l=1}^{N}\frac{v_{\cdot l'\cdot l}}{n_l}\,|\,\varphi_i>-<x'_h\,|\,t-\sum_{l=1}^{N}\frac{v_{\cdot l'\cdot l}}{n_l}\,|\,\varphi_i>,
\end{aligned}
\tag{2.110}
$$

der bei im Lochraum diagonalen h den Term ϵ_i erzeugt. Der i–unabhängige Teil der Selbstenergie entstammt dabei den Vakuumerwartungswerten, die Teilchen–Loch–Matrixelemente führen auf den selbstkonsistenten Operator h und auf den i–abhängigen Teil der Selbstenergie, um für die Löcher den h–Anteil wieder herauszuprojizieren.

Bei allgemeinen K–Teilchenoperatoren gibt es jeweils einen Teilchen–Loch–Anteil (ph-Diagramm):



und einen Loch–Loch–Anteil (hh-Diagramm):



Entsprechend der TIMF–Diagrammregeln ergeben sich das selbstkonsistente Potential

$$< x' |U| \varphi_i >= \frac{1}{(K-1)!} \sum_{k_2,\cdots,k_K=1}^{N} \frac{v_{x'k'_2\cdots k'_K ik_2\cdots k_K}}{n_{k_2}\cdots n_{k_K}}, \qquad (2.111)$$

und die Selbstenergiebeiträge

$$\frac{1}{K!} \sum_{k_1,\cdots,k_K=1}^{N} \frac{v_{k'_1\cdots k'_K k_1\cdots k_K}}{n_{k_1}\cdots n_{k_K}} | \varphi_i > - \frac{1}{(K-1)!} \sum_{k_1,\cdots,k_K=1}^{N} \frac{v_{k'_1\cdots k'_K ik_2\cdots k_K}}{n_{k_1}\cdots n_{k_K}} | \varphi_{k_1} >, \qquad (2.112)$$

wobei der letzte Term $-\mathcal{P}_h U|\varphi_i>$ entspricht. Bei $K=N$ reduzieren sich die Summen wegen der dann notwendigen Bedingungen $k_1 = i$ und $k_1 \neq k_2 \cdots \neq k_N$ auf jeweils einen Summanden, damit kompensieren sich die beiden Terme der Selbstenergie und fallen weg.

Der Gleichung 2.105 entnimmt man, daß bei Verwendung von $\mathcal{P}_p h$ an Stelle von h der i–abhängige Teil der Selbstenergie wegfällt. Man kann die TIMF also als Bestimmung der Resolvente des i–unabhängigen (selbstkonsistenten) Operators $\mathcal{P}_p h \mathcal{P}_p$ bei der i–unabhängigen (selbstkonsistenten) Energie $\bar{\eta} = E - <\overline{\mathcal{H}}>$ betrachten. Der stationäre Wert des additiven (und damit auch des multiplikativen) TIMF–Funktionals ist

$$F_{stat} = \bar{\eta} \det \beta = \det \alpha = \det \alpha'. \qquad (2.113)$$

Ganz analog berechnet sich die linke Seite von Gl.2.81 als Funktionalableitung nach $|\varphi_i>$. Die Matrixelemente der rechten Seiten ergeben sich direkt aus Gl.2.94

$$<\Phi'\,|\,\frac{a^\dagger_{\chi_i}}{m_i}a_x\,|\,\chi>=\frac{\det\alpha}{m_i}<x'\,|\,\chi_i>, \tag{2.114}$$

und

$$<\chi'\,|\,a^\dagger_x\frac{a_{\chi'_i}}{m'_i}\,|\,\Phi>=\frac{\det\alpha}{m'_i}<\chi'_i\,|\,x> \tag{2.115}$$

mit $m_i=<\varphi'_i\,|\,\chi_i>$ und $m'_i=<\chi'_i\,|\,\varphi_i>$.

Kapitel 3

Inhomogene Random–Phase–Approximation (IRPA)

3.1 Homogene Formulierung der TIMF

Betrachten wir die Stationaritätsgleichungen des TIMF-Funktionals am Beispiel für Matrixelemente des $\mathcal{G}$–Operators

$$
\begin{aligned}
(E-\mathcal{H})|\,\Phi> &= |\,\chi> \frac{<\chi'\,|\,\Phi>}{D}, \\
<\Phi'\,|(E-\mathcal{H}) &= \frac{<\Phi'\,|\,\chi>}{D} <\chi'\,|.
\end{aligned}
\tag{3.1}
$$

Dabei sind die rechten Seiten jeweils um den stationären Wert des additiven Funktionals $F_{stat} = D =<\chi'\,|\,\Phi>=<\Phi'\,|\,\chi>$ erweitert worden. Wenn wir jetzt $D = 1/\Lambda$ fixieren, bleibt die Gleichung 3.1 invariant bei Multiplikationen von Φ oder Φ' mit einem beliebigen Faktor. Die dann entstehenden Gleichungen

$$
\begin{aligned}
(E-\mathcal{H})|\,\Phi> &= \Lambda|\,\chi><\chi'\,|\,\Phi>, \\
<\Phi'\,|(E-\mathcal{H}) &= \Lambda <\Phi'\,|\,\chi><\chi'\,|,
\end{aligned}
\tag{3.2}
$$

sind zwar nicht mehr Stationaritätsgleichungen des additiven, wohl aber des normierungsunempfindlichen multiplikativen Funktionals [39]. D.h. ein Paar Φ, Φ', welches die Gleichungen 3.2 erfüllt, ergibt als stationären Wert des multiplikativen Funktionals $F_{stat} = D = 1/\Lambda$. Denn Erwartungswertbildung in Gl.3.2 liefert

$$
<\Phi'\,|\,(E-\mathcal{H})\,|\,\Phi>= \Lambda <\Phi'\,|\,\chi><\chi'\,|\,\Phi>, \tag{3.3}
$$

und damit

$$
F(\Phi',\Phi) = \frac{<\Phi'\,|\,\chi><\chi'\,|\,\Phi>}{<\Phi'\,|\,(E-\mathcal{H})\,|\,\Phi>} = D = \frac{1}{\Lambda}. \tag{3.4}
$$

Die Normierungsinvarianz des multiplikativen Funktionals erlaubt es, die Gleichungen 3.2 als homogene Gleichungen in Φ oder Φ' zu betrachten

$$\begin{aligned} (E-\mathcal{H}-\Lambda|\,\chi><\chi'\,|)\,|\,\Phi>, &= 0, \\ <\Phi'\,|(E-\mathcal{H}-\Lambda|\,\chi><\chi'\,|) &= 0. \end{aligned} \tag{3.5}$$

Damit sind Φ und Φ' Rechts– bzw. Linkseigenvektoren eines Hamiltonoperators $\mathcal{H}'$

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H} - \Lambda|\,\chi><\chi'\,|. \tag{3.6}$$

Der separable aus quadratintegrablen χ, χ' aufgebaute Zusatzterm $V_\chi = \Lambda|\,\chi><\chi'\,|$ macht $\mathcal{H}'$ bei komplexem Λ — auch wenn $\chi = \chi'$ — *nicht-hermitisch.* Hat man also solche Rechts– und Linkseigenvektoren Φ und Φ' von $\mathcal{H}'$ gefunden, so erfüllen sie auch die Stationaritätsgleichungen des multiplikativen Funktionals, und $1/\Lambda = D$ ist der zugehörige stationäre Wert.

Lösen wir aber die Gleichungen 3.5 als Eigenwertproblem, so suchen wir bei festen Λ die zugehörigen Eigenenergien, während wir beim inhomogenen Problem E fixieren und $D = 1/\Lambda$ berechnen wollen. Um den Wert $D(E)$ in Abhängigkeit von einem vorgegebenen E auszurechnen, müssen wir Λ in $\mathcal{H}'(\Lambda)$ solange variieren, bis wir die gewünschte Energie als einen Eigenwert $E(\Lambda)$ von $\mathcal{H}'(\Lambda)$ erhalten. Dann ist das so gefundene Λ auch stationärer Wert von $F(\Phi'(E), \Phi(E))$ zu der Energie E. Gibt es mehrere Eigenwerte zu festen Λ, so gibt es mehrere Energien mit gleichem $D(E)$. Zusammengefaßt kann man sagen: *Die Norminvarianz des multiplikativen Funktionals ermöglicht es, die Inversion von $\mathcal{G}$ im Fockraum auf die Inversion der mittels Diagonalisieren gewonnenen Beziehung $E = E(D)$ zurückzuführen.* In diesem Sinne kann Invertieren durch Diagonalisieren ersetzt werden.

Bei den Anwendungen interessieren wir uns meist für komplexe Energien mit positivem Realteil, die also in der Nähe des kontinuierlichen Spektrums von $\mathcal{H}$ liegen. Stationäre Werte des multiplikativen Funktionals werden von quadratintegrablen und demzufolge echten Eigenzuständen Φ, Φ' aus dem Punktspektrum, die der Eigenwertgleichung 3.5 für $\mathcal{H}'$ genügen, geliefert. Wenn es also einen quadratintegrablen Eigenzustand zu vorgegebenen Λ für Energien mit positivem Realteil — auch weit entfernt von möglichen Bindungszuständen bei negativer Energie — geben soll, so kann er erst durch die Hinzufügung des separablen Terms $\Lambda|\,\chi><\chi'\,|$ zu $\mathcal{H}$ entstehen. Betrachten wir dazu den Operator

$$\begin{aligned} T' &= V_\chi + V_\chi \mathcal{G}' V_\chi, &(3.7)\\ &= V_\chi + V_\chi \mathcal{G} T', &(3.8) \end{aligned}$$

mit den beiden Resolventen

$$\mathcal{G}' = (E - \mathcal{H}')^{-1}, \quad \mathcal{G} = (E - \mathcal{H})^{-1}. \tag{3.9}$$

Dieser Operator T' besitzt nach seiner Definition die gleiche analytische Struktur wie $\mathcal{G}'$, d.h. Pole geben die Lage der Eigenzustände an, und das kontinuierliche Spektrum zeigt sich in einem Schnitt. Man erhält nun aus den Gleichungen 3.7 und 3.8 den zu $\mathcal{H}'$ gehörigen Operator T' als

$$T' = \frac{\Lambda|\,\chi><\chi'\,|}{1 - \Lambda <\chi'\,|\,\mathcal{G}\,|\,\chi>}. \tag{3.10}$$

Damit hat T' einen Pol, wenn

$$1 = \Lambda <\chi'\,|\,\mathcal{G}\,|\,\chi> . \tag{3.11}$$

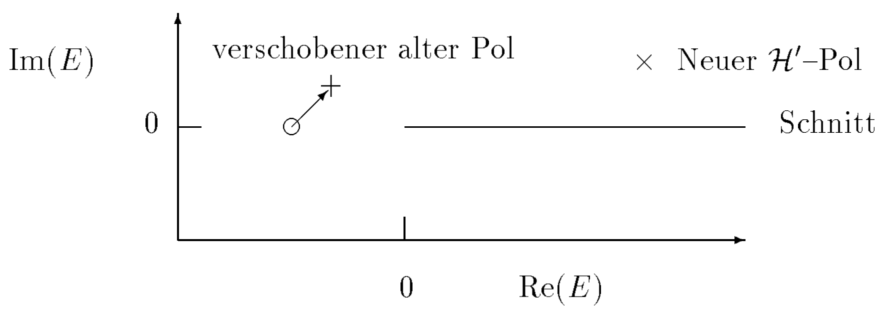
Betrachten wir als Beispiel $\mathcal{H} = \mathcal{T}$, dann ist $- <\chi'\,|\,(E - \mathcal{T})^{-1}\,|\,\chi>$ in dem (reellen) Energieintervall $(-\infty, 0)$ monoton steigend mit einem Maximum bei 0. Ein separables Potential mit reellen Λ kann nur dann (genau einen) Bindungszustand erzeugen, wenn Λ negativ genug ist, also $-\Lambda \geq (<\chi'\,|\,\mathcal{T}^{-1}\,|\,\chi>)^{-1}$ [15, 50]. Das gleiche gilt auch für komplexes Λ: Wenn Λ betragsmäßig zu klein ist, d.h. die vorgegebene Amplitude D betragsmäßig zu groß, kann es keine Lösung geben, die diese Amplitude reproduziert. Zu große, nicht vorkommende Amplituden D entsprechen im homogenen Bild also Kopplungskonstanten Λ, die zu schwach sind, um einen zusätzlichen Bindungszustand zu erzeugen. Wählen wir komplexe Λ, so erhalten wir komplexe Eigenenergien E für die zusätzlichen Links– und Rechtsbindungszustände Φ, Φ'. Plazieren wir dann durch Variation von Λ dieses E an die gewünschte Stelle, so können wir das zugehörige Λ als Lösung des inhomogenen Problems entnehmen. Bereits in $\mathcal{H}$ vorhandene Bindungzustände oder Resonanzen werden durch den zusätzlichen separablen Term in der Regel verschoben, nicht aber das kontinuierliche Spektrum E_c. Denn wie man aus 3.10 abliest, bleibt das kontinuierliche Spektrum, d.h. der Schnitt, unverändert, vorausgesetzt $\Lambda^{-1} \neq <\chi'\,|\,\mathcal{G}(E_c)\,|\,\chi>$. Dieser Ausnahmefall bedeutet, daß der von V_χ erzeugte Pol gerade auf dem Schnitt bei E_c zu liegen kommt. Das kontinuierliche Spektrum des hermitischen Operators $\mathcal{H}$ liegt auf der reellen Achse; für komplexes E erfüllt damit das gesuchte Λ diese Ausnahmebedingung nicht, und das Kontinuum von $\mathcal{H}$ bleibt bei $\mathcal{H}'$ unverändert. Eine Änderung des Kontinuums ist auch deshalb nicht zu erwarten, da die χ', χ quadratintegrabel sind und die für die Streuung wichtigen unendlich weit entfernten Anfangs– und Endzustände nicht verändern. Man kann die exakten Streuzustände Φ^+ von $\mathcal{H}'$ explizit für reelle Energien E_c aus den Streuzuständen Ψ^+ von $\mathcal{H}$ gewinnen

$$|\,\Phi^+>=|\,\Psi^+> + \frac{\Lambda|\,\chi><\chi'\,|\,\Phi^+>}{E_c - \mathcal{H}}, \tag{3.12}$$

die wegen

$$<\chi'\,|\,\Phi^+>= \frac{<\chi'\,|\,\Psi^+>}{1 - \Lambda <\chi'\,|\,\mathcal{G}(E_c)\,|\,\chi>}, \tag{3.13}$$

auf die gleiche Ausnahmebedingung wie Gl.3.10 führen. Die Polstellen von $D(E) = <\chi'\,|\,(E - \mathcal{H})^{-1}\,|\,\chi>$ liegen natürlich weiterhin bei den Bindungsenergien von $\mathcal{H}$, diese entsprechen wegen $\mathcal{H}'(\Lambda = 0) = \mathcal{H}$ Nullstellen von Λ, und man erhält dann konsistenterweise bei $\Lambda = 0$ die $\mathcal{H}$–Eigenzustände als Lösungen $\Phi = \Phi'$. Die schematische Zeichnung eines $\mathcal{H}$– und $\mathcal{H}'$–Spektrums soll die Verhältnisse veranschaulichen. Wir beziehen uns dabei auf einen Fall analog dem im nächsten Kapitel numerisch untersuchten Modell mit (höchstens) einem $\mathcal{H}$–Bindungszustand:



Die alten $\mathcal{H}$–Bindungszustände ($\circ$) werden entsprechend ihrem Überlapp mit χ, bzw. χ' bei $\mathcal{H}'$ ins Komplexe verschoben ($+$), das Kontinuum bleibt unverändert, und bei physikalisch möglicher Amplitude $D = 1/\Lambda$ entsteht ein neuer $\mathcal{H}'$–Pol ($\times$) bei komplexer Energie. Wir werden diese Verhältnisse im nächsten Kapitel bei einer numerischen Studie bestätigen.

Als Eigenvektoren von $\mathcal{H}'$ sind die Lösungen Φ, Φ' auch Stationaritätsstellen des verallgemeinerten Ritzschen Funktionals

$$E(\Phi', \Phi) = <\Phi' \,|\, (E - \mathcal{H}') \,|\, \Phi> \,. \tag{3.14}$$

Aus der Möglichkeit, das inhomogene Problem bezüglich $\mathcal{H}$ in ein Eigenwertproblem von $\mathcal{H}'(\Lambda)$ umzuformen, folgt auch die entsprechende Äquivalenz der dazugehörigen Mean–Field–Verfahren: Die aus dem Funktional 3.14 entstehenden verallgemeinerten nichthermitischen Hartree–Fock–Gleichungen für $\mathcal{H}'$ führen auf einen Einteilchenhamiltonoperator h'. Diesen finden wir aus der allgemeinen Variation des Funktionals 3.14 unter Verwendung der vier Orbitalmengen φ_i, φ_i', χ_i und χ_i' aus den jeweils natürlichen Biorthogonalsystemen

$$<x' \,|\, \frac{\delta E(\Phi', \Phi)}{\delta <\varphi_i' \,|} = <\Phi' \,|\, \frac{a_i^\dagger}{n_i} a_x (E - \mathcal{H}') \,|\, \Phi> \,. \tag{3.15}$$

Dies haben wir bis auf den $\Lambda |\, \chi><\chi' \,|$–Term schon berechnet. Für jenen erhalten wir mit Hilfe der TIMF–Diagrammregeln

$$\begin{aligned}
&<\Phi' \,|\, \left(\frac{a_i^\dagger}{n_i} a_x \Lambda |\, \chi><\chi' \,| \right) \,|\, \Phi>= \\
&\qquad <\Phi' \,|\, \frac{a_{\chi_i}^\dagger}{m_i} a_x \Lambda \,|\, \chi><\chi' \,|\, \Phi> \\
&= \quad <x' \,|\, \left(\Lambda \frac{\det \alpha \; \det \alpha'}{m_i m_i'} |\, \chi_i><\chi_i' \,| \right) |\, \varphi_i> \,.
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Setzen wir

$$\bar{\Lambda} = \Lambda \frac{\det \alpha \det \alpha'}{\det \beta}, \tag{3.17}$$

so folgt damit für das gesamte $\mathcal{H}'$

$$\begin{aligned} 0 =& <\Phi' \,|\, \frac{a_i^\dagger}{n_i} a_x (E - \mathcal{H}') \,|\, \Phi >= \\ & \frac{\det \beta}{n_i} < x' \,| \left(E- < \overline{\mathcal{H}} > + \frac{h_{ii}}{n_i} - h - \bar{\Lambda} \sum_j \frac{n_j}{m_j m_j'} |\, \chi_j >< \chi_j' \,| \right) |\, \varphi_i >, \end{aligned} \tag{3.18}$$

wobei h_{ij} im Lochraum diagonal gewählt und der $|\,\chi_i >< \chi_i'\,|$–Term, wegen $< \varphi_i' \,|\, \chi_j > = \delta_{ij} m_i$ und $< \chi_i' \,|\, \varphi_j > = \delta_{ij} m_i'$, formal zu einer Summe ergänzt wurde. Wir definieren nun den nichthermitischen Hartree–Fock–Operator

$$h' = h + \bar{\Lambda} \sum_{i=1}^{N} \frac{n_i}{m_i m_i'} |\, \chi_i >< \chi_i' \,|, \tag{3.19}$$

der in der jeweiligen biorthogonalen Darstellung simultan mit h in der Beschränkung auf den Lochraum diagonal ist. Der Λ–Term bringt keinen Beitrag zur Selbstenergie, da wegen $n = N$ der i–abhängige Beitrag den i–unabhängigen kompensiert. Damit können wir unter Benutzung von

$$< \overline{\mathcal{H}}' > - \frac{h_{ii}'}{n_i} = < \overline{\mathcal{H}} > - \frac{h_{ii}}{n_i}, \tag{3.20}$$

mit $< \overline{\mathcal{H}}' > = < \Phi' \,|\, \mathcal{H}' \,|\, \Phi > \,/\, < \Phi' \,|\, \Phi >$, Gl.3.18 vollständig in den gestrichenen Größen $\mathcal{H}'$, h' schreiben

$$\begin{aligned} 0 =& <\Phi' \,|\, \frac{a_i^\dagger}{n_i} a_x (E - \mathcal{H}') \,|\, \Phi >= \\ & \frac{\det \beta}{n_i} < x' \,| \left(E- < \overline{\mathcal{H}}' > + \frac{h_{ii}'}{n_i} - h' \right) |\, \varphi_i > . \end{aligned} \tag{3.21}$$

Genauso bekommt man die Gleichungen für die $< \varphi_i' \,|$

$$\begin{aligned} 0 =& <\Phi' \,|\, (E - \mathcal{H}') a_x^\dagger \frac{a_i}{n_i} \,|\, \Phi >= \\ & \frac{\det \beta}{n_i} < \varphi_i' \,| \left(E- < \overline{\mathcal{H}}' > + \frac{h_{ii}'}{n_i} - h' \right) |\, x > . \end{aligned} \tag{3.22}$$

Damit haben wir die nichthermitischen Hartree–Fock–Gleichungen mit dem Operator h' erhalten.

Bringen wir in Gl.3.18 den separablen Term auf die andere Seite, so erhalten wir die TIMF–Gleichungen mit $\eta_i = E- < \mathcal{H} > + h_{ii}/n_i$

$$\frac{\det \beta}{n_i} (\eta_i - h) \,|\, \varphi_i >= \Lambda \frac{\det \alpha \det \alpha'}{m_i} |\, \chi_i >, \tag{3.23}$$

und

$$\frac{\det\beta}{n_i} <\varphi_i'\,|\,(\eta_i - h) = \Lambda \frac{\det\alpha\det\alpha'}{m_i'} <\chi_i'\,|. \tag{3.24}$$

Dies entspricht den TIMF–Gleichungen 1.93 für das multiplikative Funktional mit

$$\lambda_i = \bar\Lambda \frac{n_i}{m_i}, \quad \lambda_i' = \bar\Lambda \frac{n_i}{m_i'}, \tag{3.25}$$

und bei $\det\alpha = \det\alpha' = \Lambda^{-1}$ werden die Gleichungen für das additive Funktional reproduziert. Durch Multiplikation von 3.23 mit $<\varphi_i'\,|$ erhält man mit $\bar\eta = \eta_i - h_{ii}/n_i$

$$(E- <\overline{\mathcal{H}}>)\det\beta = \bar\eta\det\beta = \Lambda\det\alpha\det\alpha' = \bar\Lambda\det\beta, \tag{3.26}$$

d.h. Λ^{-1} entspricht dem stationären Wert des multiplikativen TIMF–Funktionals

$$\Lambda^{-1} = \frac{\det\alpha\det\alpha'}{\bar\eta\det\beta}, \tag{3.27}$$

und

$$\bar\eta = \bar\Lambda. \tag{3.28}$$

Das gleiche Resultat erhält man bei Benutzung der Gleichungen für die $<\varphi_i'\,|$.

Wie bei der exakten Rechnung kann man daher ausgehen von den TIMF–Gleichungen

$$(\eta_i - h)|\,\varphi_i> = \lambda_i|\,\chi_i>, \quad <\varphi_i'\,|(\eta_i - h) = \lambda_i' <\chi_i'\,|, \tag{3.29}$$

die bis auf einen Rollentausch von η_i mit λ_i als vorzugebende Variable äquivalent sind zu

$$(\eta_i - h')|\,\varphi_i> = 0, \quad <\varphi_i'\,|(\eta_i - h') = 0, \tag{3.30}$$

mit

$$h'(\lambda_i) = t + U + \sum_{i=1}^{N} \frac{\lambda_i}{m_i'}|\,\chi_i><\chi_i'\,| = t + U + \sum_{i=1}^{N} \frac{\lambda_i'}{m_i}|\,\chi_i><\chi_i'\,|. \tag{3.31}$$

Dieses so erhaltene h' ist dasselbe wie das aus $\mathcal{H}'$ gewonnene 3.19. Bei Einsetzen des Wertes 3.27 für Λ läßt sich h' auch schreiben als

$$h' = h + \bar\eta \sum_{i=1}^{N} \frac{n_i}{m_i m_i'}|\,\chi_i><\chi_i'\,|. \tag{3.32}$$

Aus den durch Diagonalisieren von 3.30 gewonnenen Eigenenergien η_i von h' erhält man die dazugehörige TIMF–Energie durch

$$E = \eta_i - \epsilon_i + <\overline{\mathcal{H}}> = \bar\eta + <\overline{\mathcal{H}}> = \bar\Lambda + <\overline{\mathcal{H}}> = <\overline{\mathcal{H}}'>\,. \tag{3.33}$$

Dabei sind die ϵ_i die Eigenwerte von $\mathcal{P}_h h \mathcal{P}_h$, d.h. $<\varphi_i'\,|\,h\,|\,\varphi_i> = \epsilon_i n_i \delta_{ij}$. Da $\eta_i - \epsilon_i$ $(=\bar\eta)$ i–unabhängig ist, liefert jeder Eigenwert wie erforderlich dieselbe TIMF–Energie E. Die Energie E ist unter dem Hartree–Fock–Blickwinkel eine Approximation der exakten Energie zu fixierten (exakten) Λ; aus Sicht der TIMF entspricht sie der fest vorgegebenen (exakten) TIMF-Energie, zu der als Approximation der exakten Amplitude D_{exakt} die TIMF–Amplitude $D = \Lambda^{-1}$ korrespondiert. Nun kann man Λ in $h'(\Lambda)$ variieren, bis man bei der gesuchten Energie E angelangt ist. TIMF für $\mathcal{H}$ ist daher äquivalent zu einer nichthermitischen Hartree–Fock–Rechnung bei komplexen Energien für $\mathcal{H}'$. Es sei hier angemerkt, daß eine nichthermitische HF–Rechnung einen Sattelpunkt liefert, und daher offensichtlich keinem Minimumprinzip mehr genügt, welches die Auswahl der physikalischen Lösung erleichtern könnte. Weiter sieht man, daß man für Polstellen von D, also $\Lambda = 0$, die gebundenen Zustände von $h = h'(\Lambda = 0)$ als HF–Eigenzustände erhält. Daraus folgt die interessante Tatsache, daß die Hartree–Fock–Lösungen von $\mathcal{H}$ die Polstellen der TIMF–Resolvente darstellen.

Es ist allerdings wesentlich einfacher, eine TIMF-Rechnung direkt anzugehen, als den Umweg einer Invertierung der $E(D)$–Beziehung über die korrespondierende nicht-hermitische HF–Rechnung zu beschreiten. Für eine Erweiterung der TIMF aber können wir erfolgreich darauf zurückgreifen. Durch die Entsprechung der TIMF zu einem Ritzschen Funktional ist es in Analogie zum HF–Verfahren sofort klar, daß Versuchsfunktionen mit Teilchen–Loch–Anregungen keine Veränderung von Φ' und Φ erbringen können. Die Random–Phase–Approximation (RPA) ist nun die geeignete Methode, um aufbauend auf einer Hartree–Fock–Näherung Teilchen–Loch–Korrelationen zu berücksichtigen. Es gibt viele unterschiedliche Vorgehensweisen, die in erster Ordnung auf die RPA führen, sich in höherer Ordnung aber unterscheiden. Man kann die RPA aber dadurch charakterisieren, daß sie Paare von Fermionoperatoren näherungsweise als Bosonen behandelt und dann der Diagonalisierung eines Einteilchen–Bosonoperators im Fockraum entspricht. Dies ist bei hermitischen H mittels unitärer kanonischer Transformationen leicht möglich. Eine direkte approximative Umwandlung von Fermionpaaren in Bosonen bei den inhomogenen TIMF–Gleichungen führt aber auf die Invertierung eines Einteilchenoperators im Fockraum, und das ist *keine* allgemein leicht lösbare Aufgabe. Das zeigt schon das Beispiel $\mathcal{H} = \mathcal{T}$. Daher wird hier der Weg über die homogene Formulierung der TIMF beschritten, der auf ein Diagonalisierungs– und kein Inversionsproblem im Fockraum führt. Dafür muß im folgenden die hermitische RPA zu einer nichthermitischen verallgemeinert und insbesondere gezeigt werden, daß auch diese durch (dann nicht mehr unitäre) kanonische Transformationen gelöst werden kann. Als Resultat bekommen wir dadurch keine Korrektur ΔD der Amplitude zu fester Energie E, sondern eine Energiekorrektur ΔE zu fester Amplitude. Die durchzuführende Inversion steckt also weiterhin in der $E = E(D)$–Beziehung.

3.2 Nichthermitische RPA

Als Zugang zur RPA wählen wir die Methode der Bewegungsgleichungen [11, 4]. Dazu beginnen wir mit der exakten Eigenwertgleichung von $\mathcal{H}'$ für Ψ

$$\mathcal{H}' | \Psi >= E | \Psi >, \tag{3.34}$$

und führen Operatoren $Q_\nu^\dagger$ ein, die Zustände anderer Energie, „angeregte" Zustände, aus dem Referenzzustand $| \Psi >$ erzeugen

$$\mathcal{H}' | \Psi_\nu >= E_\nu | \Psi_\nu >= E_\nu Q_\nu^\dagger | \Psi > . \tag{3.35}$$

So erhalten wir

$$\mathcal{H}' Q_\nu^\dagger | \Psi >= E_\nu Q_\nu^\dagger | \Psi >, \tag{3.36}$$

und

$$[\mathcal{H}', Q_\nu^\dagger]_- | \Psi >= (E_\nu - E) Q_\nu^\dagger | \Psi > . \tag{3.37}$$

Jetzt fordern wir, daß der Vektor $< \Psi' |$ Linksvakuum der Operatoren $Q_\nu^\dagger$ ist

$$< \Psi' | Q_\nu^\dagger = 0, \tag{3.38}$$

und definieren für die $< \Psi'_\nu |$ mit

$$< \Psi'_\nu | \mathcal{H}' =< \Psi'_\nu | E_\nu, \tag{3.39}$$

analog die Operatoren Q_ν

$$< \Psi'_\nu | =< \Psi' | Q_\nu, \tag{3.40}$$

und ebenfalls

$$Q_\nu | \Phi_\nu >= 0. \tag{3.41}$$

Aus Gleichung 3.37 folgt dann mit der Variation δQ

$$< \Psi' | [\delta Q, [\mathcal{H}', Q_\nu^\dagger]_-]_- | \Psi >= (E_\nu - E) < \Psi' | [\delta Q, Q_\nu^\dagger]_- | \Psi > . \tag{3.42}$$

Das gleiche Vorgehen bezüglich der Bra–Gleichung

$$< \Psi' | Q_\nu \mathcal{H}' = E_\nu < \Psi' | Q_\nu, \tag{3.43}$$

liefert

$$< \Psi' | [[Q_\nu, \mathcal{H}']_-, \delta Q^\dagger]_- | \Psi >= (E_\nu - E) < \Psi' | [Q_\nu, \delta Q^\dagger]_- | \Psi > . \tag{3.44}$$

Als Approximation der exakten Lösungen $| \Psi >$ und $< \Psi' |$ benutzen wir die TIMF–Ergebnisse $| \Phi >$ und $< \Phi' |$. Für die $Q_\nu^\dagger$ und Q_ν machen wir den RPA–Ansatz

$$\begin{aligned} Q_\nu^\dagger &= \sum_{nj} \left(X_{nj}^\nu a_n^\dagger a_j - Y_{nj}^\nu a_j^\dagger a_n \right), && (3.45) \\ Q_\nu &= \sum_{nj} \left(U_{nj}^\nu a_j^\dagger a_n - V_{nj}^\nu a_n^\dagger a_j \right), && (3.46) \end{aligned}$$

wobei j Loch– und n Teilchenindizes bezeichnen. Die beiden Gleichungen 3.42 und 3.44 ergeben damit dieselbe Eigenwertgleichung für beide Koeffizientenpaare

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\nu \\ Y^\nu \end{pmatrix} = (E_\nu - E) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\nu \\ Y^\nu \end{pmatrix}, \tag{3.47}$$

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V^\nu \\ U^\nu \end{pmatrix} = (E_\nu - E) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V^\nu \\ U^\nu \end{pmatrix}, \tag{3.48}$$

mit den Koeffizienten

$$A_{minj} = <\Phi' \,|\, [a_i^\dagger a_m, [\mathcal{H}', a_n^\dagger a_j]_-]_- \,|\, \Phi>, \tag{3.49}$$

$$B_{minj} = - <\Phi' \,|\, [a_i^\dagger a_m, [\mathcal{H}', a_j^\dagger a_n]_-]_- \,|\, \Phi>, \tag{3.50}$$

$$C_{minj} = - <\Phi' \,|\, [a_m^\dagger a_i, [\mathcal{H}', a_n^\dagger a_j]_-]_- \,|\, \Phi>, \tag{3.51}$$

$$D_{minj} = <\Phi' \,|\, [a_m^\dagger a_i, [\mathcal{H}', a_j^\dagger a_n]_-]_- \,|\, \Phi> . \tag{3.52}$$

Dazu benutzten wir bezüglich der Gleichung 3.44 die Identität $[a,[b,c]_-]_- = [[c,b]_-,a]_-$. Durch die Verwendung des natürlichen Biorthogonalsystems haben die Gleichungen die gleiche Gestalt wie bei der hermitischen Standard–RPA, nur kommen ein nichthermitischer Operator $\mathcal{H}'$ und demzufolge zwei verschiedene Vakua darin vor. Aufgrund der Kommutatorbildung wären die RPA–Gleichungen 3.47 und 3.48 exakt, wenn die Paaroperatoren $B_{im} = a_i^\dagger a_m$ und $B_{nj}^\dagger = a_n^\dagger a_j$ (biorthogonale) Bose–Vertauschungsrelationen erfüllen würden. Man kann die RPA daher als erste Ordnung einer (Bi–)Boson–Entwicklung der Fermionpaaroperatoren auffassen. Wir definieren nun

$$M = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}, \tag{3.53}$$

sowie

$$T^{-1} = \begin{pmatrix} \tilde{X} & \tilde{V} \\ \tilde{Y} & \tilde{U} \end{pmatrix}, \tag{3.54}$$

mit $\tilde{X}_{mi,\nu} = X_{\nu,mi} = X_{mi}^\nu$ und analog für Y, V und U, und erinnern uns an Gl.2.15 für den bosonischen Fall

$$\eta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{3.55}$$

(Wir haben hier die Bezeichnung für T^{-1} aus Gl.2.22 übernommen. Der Zusammenhang zu kanonischen Transformationen wird weiter unten klar werden.) Die RPA–Gleichungen bekommen damit die kompakte Form

$$MT^{-1} = \eta T^{-1} \Omega, \tag{3.56}$$

oder

$$T\eta M T^{-1} = \Omega, \tag{3.57}$$

mit der Diagonalmatrix Ω der Eigenwerte $E_\nu - E$. Die Matrix T^{-1} enthält in ihren Spalten die Rechtseigenvektoren, die Matrix T in ihren Zeilen die Linkseigenvektoren, mit zu T^{-1} korrespondierender Normierung und biorthogonaler Wahl von Eigenvektoren im Entartungsfall. Die allgemeinen Biorthogonalitätsrelationen lauten dann schlicht $TT^{-1} = 1$. Bezeichnen wir mit $d = \nu_{max}$ die Anzahl verschiedener betrachteter Teilchen–Loch–Koeffizienten X^ν, Y^ν. Aus der Dimension $2d$ der Matrix ηM folgt, daß wir uns ihre Eigenvektoren in zwei Gruppen, $\binom{X^\nu}{Y^\nu}$ für die $Q_\nu^\dagger$ und $\binom{V^\nu}{U^\nu}$ für die Q_ν, aufgeteilt denken können. Nach welchen Kriterien diese Aufteilung stattzufinden hat, wird weiter unten diskutiert.

Da $\mathcal{H}'$ nicht hermitisch ist, treffen auch nicht mehr die Beziehungen $A = D^*$ und $B = C^*$ der hermitischen RPA zu. Es gelten aber folgende Relationen:

$$A = \tilde{D}, \quad B = \tilde{B}, \quad C = \tilde{C}. \tag{3.58}$$

Beweis:
Wegen der Relationen

$$B_{im} | \Phi >= a_i^\dagger a_m | \Phi >= 0, \quad < \Phi' | B_{nj}^\dagger =< \Phi' | a_n^\dagger a_j = 0, \tag{3.59}$$

tragen nur folgende Terme zu den Koeffizientenmatrizen bei

$$A_{minj} = < \Phi' | B_{im} \mathcal{H}' B_{nj}^\dagger | \Phi > - < \Phi' | B_{im} B_{nj}^\dagger \mathcal{H}' | \Phi >, \tag{3.60}$$
$$B_{minj} = < \Phi' | B_{im} B_{jn} \mathcal{H}' | \Phi >, \tag{3.61}$$
$$C_{minj} = < \Phi' | \mathcal{H}' B_{nj}^\dagger B_{mi}^\dagger | \Phi >, \tag{3.62}$$
$$D_{minj} = < \Phi' | B_{jn} \mathcal{H}' B_{mi}^\dagger | \Phi > - < \Phi' | \mathcal{H}' B_{jn} B_{mi}^\dagger | \Phi > . \tag{3.63}$$

Durch Kommutieren der Vernichter nach rechts folgt aufgrund der Definition der B–, $B^\dagger$–Operatoren

$$< \Phi' | B_{jn} B_{mi}^\dagger = \delta_{ij} \delta_{mn} < \Phi' |, \quad B_{jn} B_{mi}^\dagger | \Phi >= \delta_{ij} \delta_{mn} | \Phi > . \tag{3.64}$$

Damit entnimmt man den Beziehungen 3.60 sowie 3.63

$$A_{njmi} = D_{minj}. \tag{3.65}$$

Aus den — wegen $[a_i, a_n^\dagger]_+ = [a_m, a_j^\dagger]_+ = 0$ — exakt geltenden Vertauschungsrelationen der Teilchen–Loch–Operatoren

$$[B_{mi}^\dagger, B_{nj}^\dagger]_- = 0 = [B_{mi}, B_{nj}]_-, \tag{3.66}$$

resultiert

$$C_{minj} = C_{njmi}, \quad B_{minj} = B_{njmi}. \tag{3.67}$$

q.e.d.

Diese im nichthermitischen Fall verbleibende Symmetrie reicht nun aus zu zeigen, daß es sich bei der ηM diagonalisierenden Matrix T um eine kanonische Transformation handelt. Im Gegensatz zum hermitischen Fall braucht diese aber nicht unitär zu sein. Als erstes zeigen wir dazu, daß die Eigenwerte von ηM immer in Paaren $(\omega_\nu, -\omega_\nu)$ auftreten, also Ω mit Eigenwertmatrizen ω geschrieben die Struktur hat

$$\Omega = \begin{pmatrix} \omega & 0 \\ 0 & -\omega \end{pmatrix}. \tag{3.68}$$

Beweis:
Beginnen wir mit der allgemeinen Tatsache, daß zu jedem Rechtseigenvektor ein Linkseigenvektor mit demselben Eigenwert gehört, und Rechts– und Linkseigenvektoren immer biorthogonal gewählt werden können. Zusätzlich liefern die Symmetrien 3.58 wie man leicht nachkontrolliert eine Bedingung zwischen M und ihrer Transponierten

$$\tilde{M} = \gamma M \gamma, \tag{3.69}$$

wobei γ in 2.11 definiert ist. Nennen wir v_ν den Eigenvektor $\binom{X^\nu}{Y^\nu}$ zum Eigenwert ω_ν

$$\eta M v_\nu = \omega_\nu v_\nu, \tag{3.70}$$

und gehen wir, um die Beziehung 3.69 auszunutzen, zur transponierten Gleichung über

$$\tilde{v}_\nu \tilde{M} \eta = \tilde{v}_\nu \gamma M \gamma \eta = \omega_\nu \tilde{v}_\nu, \tag{3.71}$$

wobei wir $\tilde{\eta} = \eta$ verwendeten. Da γ und η zu sich selbst invers sind, d.h. $\eta^2 = 1$, $\gamma^2 = 1$, und untereinander antikommutieren, also $\eta\gamma = -\gamma\eta$, erhält man daraus

$$\begin{aligned} \tilde{v}_\nu \gamma M &= \omega_\nu \tilde{v}_\nu \eta \gamma = -\omega_\nu \tilde{v}_\nu \gamma \eta \\ &= (\tilde{v}_\nu \gamma \eta)(\eta M) = -\omega_\nu (\tilde{v}_\nu \gamma \eta) \\ &= (\tilde{v}_\nu \sigma)(\eta M) = -\omega_\nu (\tilde{v}_\nu \sigma), \end{aligned} \tag{3.72}$$

mit $\sigma = \eta\gamma$. Das bedeutet, zu jedem Rechtseigenvektor $v_\nu = \binom{X^\nu}{Y^\nu}$ mit Eigenwert ω_ν existiert ein Linkseigenvektor $\tilde{v}_\nu \sigma = (Y^\nu, -X^\nu)$ zum Eigenwert $-\omega_\nu$. (Es gilt, wie man durch Einsetzen nachrechnet, $\tilde{v}_\nu \sigma v_\nu = Y^\nu X^\nu - X^\nu Y^\nu = 0$.) Da zu jedem Linkseigenvektor ein Rechtseigenvektor zum gleichen Eigenwert existiert, gibt es daher auch einen Rechtseigenvektor zu $-\omega_\nu$, den wir $\binom{V^\nu}{U^\nu}$ nennen wollen.

q.e.d.

Bei der hermitischen RPA weiß man, daß kontinuierliche Symmetrien des Hamiltonoperators, wie z.B. die Translations– oder Rotationssymmetrie, welche in der Mean–Field–Lösung zerstört werden, zu Nullmoden führen. In unserem Fall werden jedoch Translations– und Rotationssymmetrie durch den räumlich lokalisierten und orientierten $\Lambda |\chi><\chi'|$–Term in $\mathcal{H}'$ gebrochen, so daß wir Nulleigenwerte $\omega_\nu = 0$ nicht zu erwarten haben.

Die hermitische RPA entspricht einer Diagonalisierung eines quadratischen Boson–Hamiltonoperators durch eine unitäre kanonische Transformation. Wir wollen nun zeigen, daß T trotz geringerer Symmetrie einer (nicht unitären) kanonischen Transformation entspricht

$$T\sigma\tilde{T} = \sigma. \tag{3.73}$$

Beweis:
Nichthermitische Operatoren brauchen kein vollständiges Biorthogonalsystem aus Links– und Rechtseigenvektoren zu besitzen. Wir gehen im folgenden davon aus, daß für $\mathcal{H}'$ ein vollständiges Biorthogonalsystem aus Eigenvektoren existiert. Die Matrix ηM besitzt vier verschiedene Typen von Eigenvektoren

$$\begin{aligned} &(U^\nu, -V^\nu), \qquad \begin{pmatrix} X^\mu \\ Y^\mu \end{pmatrix} \qquad \text{zu} \quad \omega_\nu, \\ &(Y^\nu, -X^\nu), \qquad \begin{pmatrix} V^\mu \\ U^\mu \end{pmatrix} \qquad \text{zu} \quad -\omega_\nu. \end{aligned} \tag{3.74}$$

Die allgemeinen Biorthogonalitätsrelationen zwischen Links– und Rechtseigenvektoren lauten in diesem Fall

$$U^\nu X^\mu - V^\nu Y^\mu = c_\nu \delta_{\nu\mu}, \tag{3.75}$$

$$U^\nu V^\mu - V^\nu U^\mu = 0, \tag{3.76}$$

$$Y^\nu X^\mu - X^\nu Y^\mu = 0, \tag{3.77}$$

$$Y^\nu V^\mu - X^\nu U^\mu = c'_\nu \delta_{\nu\mu}. \tag{3.78}$$

Die Relationen 3.75 und 3.78 sind dabei nicht unabhängig voneinander, da sie durch Transponieren auseinander hervorgehen. Aus Konsistenzgründen ist daher $c_\nu = -c'_\nu$ erforderlich. Die Matrix T setzt sich zeilenweise aus den Linkseigenvektoren, die Matrix T^{-1} spaltenweise aus den Rechteigenvektoren zusammen. Damit $TT^{-1} = 1$ gilt, müssen die Links- und Rechtseigenvektoren entsprechend (bi–)normiert werden. Bei $c_\nu = 1$ gilt, wie man leicht unter Benutzung von 3.75 bis 3.78 nachrechnet,

$$\begin{pmatrix} U & -V \\ -Y & X \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{X} & \tilde{V} \\ \tilde{Y} & \tilde{U} \end{pmatrix} = TT^{-1} = 1, \tag{3.79}$$

womit wir die zu gegebenen T^{-1} gehörende Form von T explizit gefunden haben. Nun erkennt man in den Biorthogonalitätsbedingungen 3.75 bis 3.78 die Bedingungen 3.73 an eine kanonische Transformation wieder

$$U\tilde{X} - V\tilde{Y} = 1, \tag{3.80}$$

$$U\tilde{V} - V\tilde{U} = 0, \tag{3.81}$$

$$Y\tilde{X} - X\tilde{Y} = 0, \tag{3.82}$$

$$X\tilde{U} - Y\tilde{V} = 1. \tag{3.83}$$

q.e.d.

Damit ist gezeigt, daß die RPA–Matrix ηM durch eine kanonische Transformation diagonalisiert werden kann. Wir wollen im weiteren erläutern, wie man das Vorgehen der RPA als Diagonalisieren eines aus $\mathcal{H}'$ gewonnenen quadratischen Bosonoperators interpretieren kann. Betrachten wir dazu den nichthermitischen, quadratischen Boson–Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}^B = E_{TIMF} + \sum_{kl} \left(A_{kl} B_k^\dagger B_l + \frac{1}{2} B_{kl} B_k^\dagger B_l^\dagger + \frac{1}{2} C_{kl} B_k B_l \right). \tag{3.84}$$

Später identifizieren wir die Operatoren $B_k^\dagger$, B_k mit den doppeltindizierten Teilchen–Loch–Operatoren $B_{mi}^\dagger = a_m^\dagger a_i$ und $B_{im} = a_i^\dagger a_m$ und haben damit

$$< \Phi' \,|\, \mathcal{H}^B \,|\, \Phi >= E_{TIMF}. \tag{3.85}$$

Wir können dann $\mathcal{H}^B$ als Hamiltonoperator bosonischer Anregungen aus den TIMF–Referenzzuständen Φ und Φ' interpretieren. Aufgrund der Boson–Vertauschungsrelationen kann man immer $B = \tilde{B}$ und $C = \tilde{C}$ erreichen. Benutzen wir die Notation aus Gl.2.6

$$\alpha = \begin{pmatrix} B \\ B^\dagger \end{pmatrix}, \qquad \alpha^\dagger = (B^\dagger, B), \tag{3.86}$$

mit den Erzeuger– und Vernichtervektoren $B^\dagger$ und B, und definieren

$$M = \begin{pmatrix} A & B \\ C & \tilde{A} \end{pmatrix}, \tag{3.87}$$

so ergibt sich für den Boson–Hamiltonoperator 3.84

$$\mathcal{H}^B = E_{TIMF} + \frac{1}{2} \alpha^\dagger M \alpha - \frac{1}{2} \mathrm{Tr}\, A. \tag{3.88}$$

Eine kanonische Transformation führt uns zu neuen Operatoren

$$\beta = \begin{pmatrix} Q \\ Q^\dagger \end{pmatrix}, \qquad \beta^\dagger = (Q^\dagger, Q), \tag{3.89}$$

der Form

$$\beta = T\alpha, \qquad \beta^\dagger = \tilde{\beta}\gamma = \alpha^\dagger \gamma \tilde{T} \gamma. \tag{3.90}$$

Diese Beziehungen können invertiert werden

$$\alpha = T^{-1}\beta, \tag{3.91}$$

$$\alpha^\dagger = \beta^\dagger \gamma \tilde{T}^{-1} \gamma = -\beta^\dagger \gamma \sigma T \sigma \gamma = -\beta^\dagger \gamma \eta \gamma T \eta = \beta^\dagger \eta T \eta, \tag{3.92}$$

wobei wir T als kanonische Transformation voraussetzten, d.h. $T^{-1} = -\sigma \tilde{T} \sigma$, und $\gamma^2 = 1$ als auch $\eta\gamma = -\gamma\eta$ verwendeten. Damit lautet der Boson–Hamiltonoperator in den neuen Operatoren ausgedrückt

$$\mathcal{H}^B = E_{TIMF} + \frac{1}{2} \beta^\dagger \eta T \eta M T^{-1} \beta - \frac{1}{2} \mathrm{Tr}\, A. \tag{3.93}$$

Finden wir ein T, welches ηM diagonalisiert,

$$T\eta M T^{-1} = \Omega, \tag{3.94}$$

so bekommt $\mathcal{H}^B$ seine Diagonalform

$$\mathcal{H}^B = E_{TIMF} + \frac{1}{2}\beta^\dagger \eta \Omega \beta - \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\, A. \tag{3.95}$$

Die Gleichung 3.94 ist genau die RPA–Gleichung 3.57. Durch den RPA–Ansatz in der Methode der Bewegungsgleichungen wird dem Fermion–Hamiltonoperator $\mathcal{H}'$ der Boson–Hamiltonoperator $\mathcal{H}^B$ zugeordnet. Damit können wir die B_k, $B_k^\dagger$ mit den Teilchen–Loch–Operatoren $B_{mi}^\dagger$, B_{im} gleichsetzen und gelangen über eine kanonische Transformation zu den $Q^\dagger$, Q. Das Lösen der nichthermitischen RPA–Gleichung ist damit, wie bei der hermitischen RPA, äquivalent dem Diagonalisieren eines nichthermitischen Boson–Hamiltonoperators, nun aber unter verallgemeinerten Symmetriebedingungen für die Matrix M. Dadurch kann die Matrix ηM nicht mehr durch unitär kanonische, sondern nur noch durch allgemeine kanonische Transformationen diagonalisiert werden.

Greifen wir zurück auf die Blockstruktur 3.68 von Ω, so erhalten wir für $\mathcal{H}^B$

$$\mathcal{H}^B = E_{TIMF} + Q^\dagger \omega Q + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\,\omega - \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\, A. \tag{3.96}$$

Für die neuen Rechts– und Linksvakua $< RPA' \mid$ und $\mid RPA >$ der $Q^\dagger$–, Q–Operatoren ergibt sich relativ zum TIMF–Referenzzustand eine Energieverschiebung von

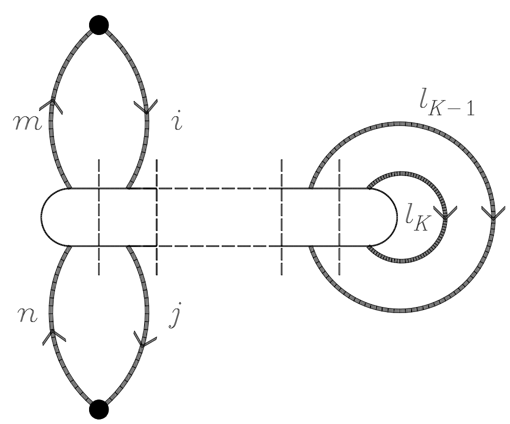
$$\Delta E = < RPA' \mid \mathcal{H}^B \mid RPA > - E_{TIMF} = \frac{1}{2}\left(\mathrm{Tr}\,\omega - \mathrm{Tr}\, A\right). \tag{3.97}$$

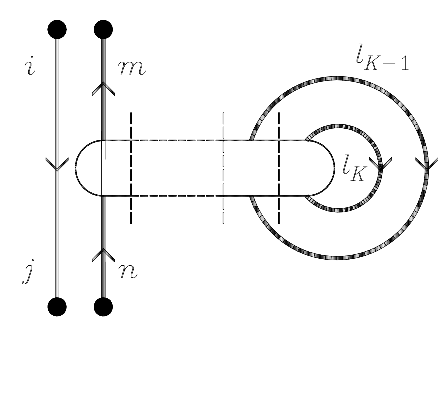
Dabei ist aber im Gegensatz zur hermitischen RPA das Kriterium für die Aufteilung der Eigenwerte in die Matrizen ω und $-\omega$ noch nicht gefunden. Bei der hermitischen RPA benutzt man, daß bei semi–positiv definiter Matrix M die Eigenwerte alle reell sind (trotz der auch dort nichthermitischen Matrix ηM) und diese Bedingung bei einer auf einem stabilen Hartree–Fock–Minimum aufbauenden RPA immer erfüllt ist [65, 66]. Sucht man daher einen Grundzustand, d.h. einen Zustand kleinster Energie, relativ zu dem alle Zustände $Q_\nu^\dagger \mid RPA >$ eine positive Energie ω_ν haben, so sortiert man alle positiven Eigenwerte ω_ν nach ω und alle negativen nach $-\omega$. Das neue Vakuum ist dann stabil und tatsächlich ein Minimum. Im nichthermitischen Fall jedoch sind die ω_ν komplex, und die Referenzzustände $< RPA' \mid$ und $\mid RPA >$ stellen auch keine Zustände minimaler Energie dar. Wir haben also bisher kein Kriterium für die Aufteilung der Eigenwerte in die zwei Gruppen ω und $-\omega$. Nun sollen aber die RPA–Vakua in der Nähe der TIMF–Zustände Φ', Φ liegen, denn als Approximation ist die RPA sicher nur akzeptabel, wenn sie nahe bei den Variationslösungen liegt. In einer Standard–RPA zur Berechnung des Grundzustandes sind in der Regel die X und V groß, während die

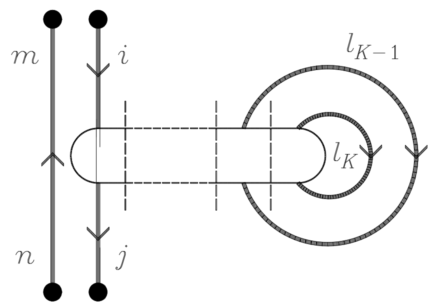
Y und U relativ dazu kleine Werte annehmen. Wenn wir daher davon ausgehen, daß wie üblich auch im nichthermitischen Fall die RPA–Korrekturen klein sind, dann können wir die Größe der Eigenvektorkomponenten X bzw. V zum Sortieren der Eigenwerte verwenden. Zudem weiß man, daß bei einer Tamm–Dancoff–Rechnung, d.h. bei $Y = U = 0$ und $AX^\nu = \omega_\nu X^\nu$, der HF– bzw. TIMF–Grundzustand nicht modifiziert wird. Da die Tamm–Dancoff–Approximation (TDA) einer Matrix M mit $B = C = 0$ entspricht, kann man durch langsames Einschalten von ϵB und ϵC, mit $0 < \epsilon < 1$, die X–Werte verfolgen und dadurch auch bei $\epsilon = 1$ identifizieren. Dabei wird dieses Verfahren bei kleinen RPA–Korrekturen mit dem erstgenannten übereinstimmen. Alternativ kann auch der Imaginärteil der ω_ν in ω als Auswahlkriterium betrachtet werden. Dieser muß negativ sein, wenn es sich bei den durch $B^\dagger$ erzeugten Orbitalen um zerfallende, also solche mit endlicher Lebensdauer handeln soll. In diesem Sinne wären dann die RPA–Referenzzustände gegenüber den RPA–Einteilchenanregungen stabil. In der später folgenden numerischen Untersuchung liefern tatsächlich beide Kriterien jeweils die gleiche Zuordnung.

3.3 RPA–Matrixelemente

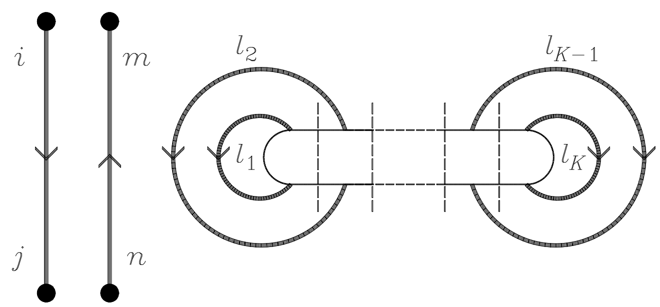
Ganz analog zu der Grundzustands–RPA erhält man die $\mathcal{H}$–Anteile der Matrixelemente 3.60 bis 3.63. Für allgemeine K–Teilchen–Operatoren bekommt man als Beitrag zu A_{minj} die Diagramme:



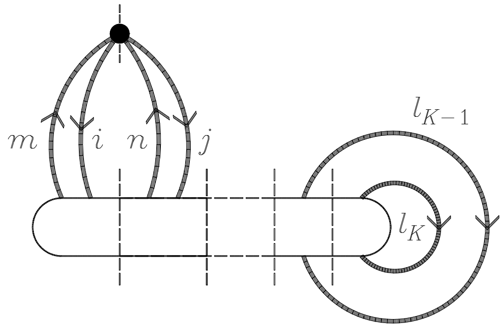




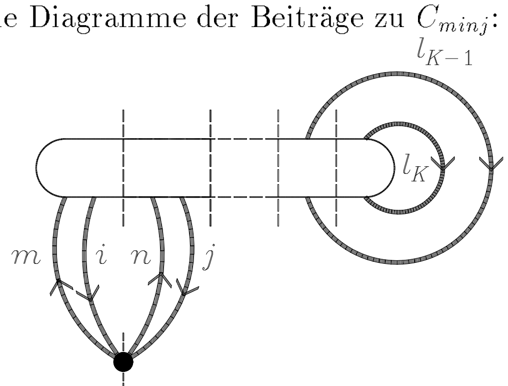
Zu der Matrix A in 3.60 tragen nur Diagramme bei, in denen die Operatormatrixelemente mit einem Vakuum „verbunden“ sind, denn der Erwartungswert von $\mathcal{H}'$ versehen mit der notwendigen δ–Funktion $\delta_{ij}\delta_{nm}$, also der Term $\delta_{ij}\delta_{nm} < \mathcal{H}' > = \delta_{ij}\delta_{nm}\,(\bar{\eta}\det\beta + < \mathcal{H} >)$, wird darin subtrahiert. Der folgende Vakuumserwartungswert ist daher in A nicht enthalten:



Die Beiträge zur Matrix B_{minj} haben die Gestalt:



Ähnlich sind die Diagramme der Beiträge zu C_{minj}:



Die Beiträge des Termes $\Lambda|\,\chi><\chi'\,|$ in biorthogonaler Darstellung folgen aber am schnellsten mit Gl.2.77 aus

$$<\Phi'\,|\,\frac{a_i^\dagger}{n_i}a_m\,|\,\chi> \;=\; \frac{\det\alpha}{m_i}<\varphi'_m\,|\,\chi_i>, \tag{3.98}$$

$$<\chi'\,|\,a_m^\dagger\frac{a_i}{n_i}\,|\,\varphi> \;=\; \frac{\det\alpha'}{m'_i}<\chi'_i\,|\,\varphi_m>, \tag{3.99}$$

$$<\Phi'\,|\,\frac{a_i^\dagger}{n_i}\frac{a_j^\dagger}{n_j}a_n a_m\,|\,\chi> \;=\; \frac{\det\alpha}{m_i m_j}<\varphi'_m\varphi'_n\,|\,\chi_i\chi_j>, \tag{3.100}$$

$$<\varphi'\,|\,a_m^\dagger a_n^\dagger\frac{a_j}{n_j}\frac{a_i}{n_i}\,|\,\varphi> \;=\; \frac{\det\alpha'}{m'_i m'_j}<\chi'_i\chi'_j\,|\,\varphi_m\varphi_n>\ . \tag{3.101}$$

Im weiteren wollen wir der Einfachheit halber binormierte Orbitale φ_i, φ'_i, also $n_i = 1$ und $\det\beta = 1$ voraussetzen. Wir erhalten damit

$$\begin{aligned} A_{minj} &= \delta_{ij}\left(t_{m'n} + \sum_{l=1}^{N} v_{m'l'nl}\right) - \delta_{nm}\left(t_{j'i} + \sum_{l=1}^{N} v_{j'l'il} + \delta_{ij}\bar\eta\right) \\ &\quad + v_{m'j'in} + \bar\eta\,\frac{<\varphi'_m\,|\,\chi_i><\chi'_j\,|\,\varphi_n>}{m_i\,m'_j}, \end{aligned} \tag{3.102}$$

$$B_{minj} = v_{m'n'ij} + \bar\eta\frac{<\varphi'_m\varphi'_n\,|\,\chi_i\chi_j>}{m_i\,m_j}. \tag{3.103}$$

$$C_{minj} = v_{i'j'mn} + \bar\eta\frac{<\chi'_i\chi'_j\,|\,\varphi_m\varphi_n>}{m'_i\,m'_j}. \tag{3.104}$$

Haben wir die Löcher aus einem Hartree–Fock–Operator h' gewonnen, so daß für beliebige (binormierte) Teilchen oder Löcher α, β gilt

$$\begin{aligned} h'_{\alpha'\beta} &= h_{\alpha'\beta} + \bar\eta\sum_{l=1}^{N}\frac{<\varphi'_\alpha\,|\,\chi_l><\chi'_l\,|\,\varphi_\beta>}{m_l\,m'_l} \\ &= \eta_\alpha\delta_{\alpha\beta} = (\epsilon_\alpha + \bar\eta)\,\delta_{\alpha\beta}, \end{aligned} \tag{3.105}$$

können wir die Matrix A auch in den Selbstenergien η_i ausdrücken

$$\begin{aligned} A_{minj} &= \delta_{ij}\delta_{nm}\,(\eta_m - \eta_i) - \delta_{ij}\bar\eta\sum_{l=1}^{N}\frac{<\varphi'_m\,|\,\chi_l><\chi'_l\,|\,\varphi_n>}{m_l\,m'_l} \\ &\quad + v_{m'j'in} + \bar\eta\,\frac{<\varphi'_m\,|\,\chi_i><\chi'_j\,|\,\varphi_n>}{m_i\,m'_j}. \end{aligned} \tag{3.106}$$

Mit $\eta_\alpha = \epsilon_\alpha + \bar\eta$ kann $\eta_m - \eta_i = \epsilon_m - \epsilon_i$ geschrieben werden. Der Summenterm mag auf den ersten Blick überraschen, da er die Analogie zur hermitischen RPA zu stören scheint, in der neben den η_i–Termen nur v_{mjin} auftaucht. Als Verallgemeinerung für einen K–Teilchenoperator $\mathcal{U}$ mit antisymmetrischen Matrixelementen u gewinnt man aber aus den Diagrammregeln

$$<\Phi'\,|\,a_i^\dagger a_m\mathcal{U}a_n^\dagger a_j\,|\,\Phi>_{connected} = -\frac{1}{(K-2)!}\sum_{l_3,\dots,l_K=1}^{N} u_{j'm'l'_3\cdots l'_K inl_3\cdots l_K}. \tag{3.107}$$

Im Falle $\mathcal{U} = \Lambda|\,\chi\,><\chi'\,|$, d.h.

$$\mathcal{U} = \Lambda a^\dagger_{\chi_N} \dots a^\dagger_{\chi_1} a_{\chi'_1} \dots a_{\chi'_N}, \tag{3.108}$$

führt das wegen $K = N$ auf

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{(N-2)!} \sum_{l_1,\dots,l_{N-2}=1}^{N} u_{m'j'l'_1\cdots l'_{N-2}inl_1\cdots l_{N-2}} = \\
&\qquad -\bar{\eta}\delta_{ij} \sum_{l\neq i}^{N} \frac{<\varphi'_m\,|\,\chi_l><\chi'_l\,|\,\varphi_n>}{m_l\, m'_l} + \bar{\eta}\frac{<\varphi'_m\,|\,\chi_i><\chi'_j\,|\,\varphi_n>}{m_i\, m'_j} \\
&\qquad -\bar{\eta}\delta_{ij}\frac{<\varphi'_m\,|\,\chi_i><\chi'_i\,|\,\varphi_n>}{m_i\, m'_i} \qquad\qquad (3.109)\\
&= \bar{\eta}\left(-\delta_{ij}\sum_{l=1}^{N}\frac{<\varphi'_m\,|\,\chi_l><\chi'_l\,|\,\varphi_n>}{m_l\, m'_l} + \frac{<\varphi'_m\,|\,\chi_i><\chi'_j\,|\,\varphi_n>}{m_i\, m'_j}\right).
\end{aligned}$$

Zur Auswertung der Vielfachsumme wurde dabei die Fallunterscheidung $i = j$ und $i \neq j$ getroffen. Da kein Orbital doppelt vorkommen darf, bleibt im ersten Fall nur eine „Lücke“ übrig, über die summiert werden kann, im anderen Fall ist die Lücke links auf i und die rechts auf j festgelegt. Dann muß der Ausdruck für $i = j$ im zweiten Fall wieder subtrahiert werden, da dafür $i \neq j$ vorausgesetzt war. Damit ist auch der Summenterm in Gl.3.106 plausibel.

Der Formalismus einer auf TIMF aufbauenden RPA ist jetzt vollständig entwickelt, im nächsten Kapitel haben wir ihn auf seine praktische Anwendbarkeit zu prüfen.

Kapitel 4

Ein lösbares Modell

Um die Vorgehensweise der vorgeschlagenen Inhomogenen RPA (IRPA) zu testen, wird in diesem Kapitel ein spezielles Modell betrachtet. Der einfachste Fall einer Operatorinvertierung ist für unsere Betrachtungen die Berechnung von Diagonalelementen $<\chi\,|\,\mathcal{G}(E)\,|\,\chi>$ der Resolvente $\mathcal{G}(E) = 1/(E-\mathcal{H})$, wie sie bisher auch meistens für TIMF-Testzwecke verwendet wurde. Da neben der technischen Durchführbarkeit auch die Qualität des Verfahrens beurteilt werden soll, wird hier ein lösbares Modell ausgewählt, in dem neben der TIMF-Lösung auch die exakte Lösung zur Verfügung steht (vgl. [32]) Es bietet sich dabei ein eindimensionales Zwei-Teilchen-Modell an, bei dem eine exakte Lösung ohne größere Schwierigkeiten zu bekommen ist. Allerdings ist die TIMF–Approximation dort in aller Regel bereits verhältnismäßig gut, so daß die Anforderungen an eine Methode, welche die TIMF verbessern will, groß sind. In dem ausgewählten Fall ist der Schwerpunktsterm explizit vom Hamiltonoperator abgezogen, um ein realistisches Modell zu erhalten. Für die TIMF ist deshalb bei dem in Anlehnung an streutheoretische Problemstellungen ausgewählten Modell der On-Shell-Limes $\mathrm{Im}(E) \to 0$ nicht leicht durchzuführen. Dies ist aber ein — aus dem Schwerpunktsterm entstehendes — Problem der TIMF für dieses Modell und für eine Beurteilung der IRPA nicht wesentlich. Hier steht die grundsätzliche Möglichkeit der Invertierung eines Operators im Fockraum mit Hilfe der IRPA im Vordergrund. Ein komplexeres Modell zu nehmen wäre in unserem Fall nicht empfehlenswert, da nur eine zur Verfügung stehende exakte Lösung im Vergleich einen ersten Hinweis auf die Qualität der IRPA geben kann.

Als lösbares Modell wird demzufolge ein eindimensionales Zweiteilchenproblem ausgewählt mit korrekter Behandlung der Schwerpunktsterme, einem galilei–invarianten, gaußförmigen und separablen Potential sowie gaußförmigen Kanalwellenfunktionen.

Der Hamiltonoperator wird über seine Matrixelemente in Einteilchenimpulskoordinaten q_1, q_2 definiert. Von dem vorgegebenen Gesamt–Hamiltonoperator wird der Schwerpunktsanteil $\mathcal{H}_{c.m.} = \frac{Q^2}{4}$, mit $Q = q_1 + q_2$, abgezogen und die Schwerpunktsbewegung $\chi_{c.m}(Q)$ wird in der Lösung absepariert, da diese für das Streuproblem unwesentlich ist. So sei $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{total} - \mathcal{H}_{c.m.}$ definiert als [32],

$$
\begin{aligned}
&< q_1' q_2' \,|\, \mathcal{H} \,|\, q_1 q_2 > = < q_1' q_2' \,|\, \mathcal{T} + \mathcal{V} - \mathcal{H}_{c.m.} \,|\, q_1 q_2 > = \\
&\quad \left[\frac{q_1^2}{2} + \frac{q_2^2}{2} - \frac{(q_1+q_2)^2}{4} \right] \delta(q_1 - q_1')\delta(q_2 - q_2') - \delta(q_1 + q_2 - q_1' - q_2') \\
&\quad \times \frac{1}{4}\lambda\nu^2 (q_1 - q_2) \exp[-\frac{1}{4}\nu^2 (q_1 - q_2)^2](q_1' - q_2') \exp[-\frac{1}{4}\nu^2 (q_1' - q_2')^2],
\end{aligned} \tag{4.1}
$$

wobei $\hbar^2/m = 1$ gesetzt und im weiteren $\nu = 1$ gewählt wurde. Durch die Subtraktion von $\mathcal{H}_{c.m.}$ entsteht der Zweiteilchenoperator $-q_1 q_2/2$, der anolog einem Zweiteilchenpotential ist. In Schwerpunkts- und Relativkoordinaten $Q = q_1 + q_2$ und $q = (q_1 - q_2)/2$ lauten die Matrixelemente des Hamiltonoperators

$$
\begin{aligned}
&< q' Q' \,|\, \mathcal{H} \,|\, q Q > = \\
&\quad \delta(Q - Q') \left[q^2 \delta(q - q') - \lambda \nu^2 q q' \exp(-\nu^2 q^2) \exp(-\nu'^2 q'^2) \right].
\end{aligned} \tag{4.2}
$$

Wie der Faktor $\delta(Q - Q')$ zeigt auch die Fouriertransformierte des Potentials

$$
< x X \,|\, \mathcal{V} \,|\, x' X' > = \delta(X - X')\lambda \frac{\pi}{\nu^4} x x' \exp\left\{ -\frac{x^2 + x'^2}{4\nu^2} \right\} \tag{4.3}
$$

mit $X = (x_1 + x_2)/2$ und $x = x_1 - x_2$, (x_1, x_2 = Einteilchen–Ortskoordinaten), daß die Schwerpunktsbewegung von dem Potential unbeeinflußt bleibt. Nach Gl.4.2 stellt sich das Potential $\mathcal{V}$ dar als

$$
\mathcal{V} = -\lambda \delta(Q - Q') | \, \nu > < \nu \, |, \tag{4.4}
$$

mit dem Formfaktor

$$
< q \,|\, \nu > = \nu q \exp\left[-\nu^2 q^2 \right]. \tag{4.5}
$$

Für die Wellenpakete der Kanalzustände eignen sich um $\pm k = \pm\sqrt{\mathrm{Re}(E)}$ geboostete und antisymmetrisierte Gaußpakete. Mit

$$
\begin{aligned}
\chi_1(q_1, k) &= \pi^{-1/4} b^{1/2} \exp\left\{ -\frac{1}{2} b^2 [(q_1 - k)^2] \right\}, && (4.6) \\
\chi_2(q_2, k) &= \pi^{-1/4} b^{1/2} \exp\left\{ -\frac{1}{2} b^2 [(q_2 + k)^2] \right\}, && (4.7)
\end{aligned}
$$

ergibt sich für die antisymmetrisierten Kanalwellenfunktionen

$$
\begin{aligned}
\chi(q_1, q_2, k) = \chi'(q_1, q_2, k) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\chi_1(q_1, k)\chi_2(q_2, k) - \chi_2(q_1, k)\chi_1(q_2, k) \right] \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \pi^{-1/2} b \left[\exp\left\{ -\frac{1}{2} b^2 [(q_1 - k)^2 + (q_2 + k)^2] \right\} \right. \\
&\quad \left. - \exp\left\{ -\frac{1}{2} b^2 [(q_1 + k)^2 + (q_2 - k)^2] \right\} \right],
\end{aligned} \tag{4.8}
$$

mit der Breite b, die im weiteren gleich 1 gewählt wird. In Schwerpunktskoordinaten wird daraus,

$$\chi(q,Q,k)=\chi_r(q,k)\chi_{c.m.}(Q,k)=\left[\pi^{-1/4}\left[\frac{b}{\sqrt{2}}\right]^{1/2}\exp(-\frac{1}{4}b^2Q^2)\right]$$

$$\times\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\pi^{-1/4}(b\sqrt{2})^{1/2}\left\{\exp[-b^2(q-k)^2]-\exp[-b^2(q+k)^2]\right\}\right], \qquad (4.9)$$

mit den Indizes r, $c.m.$ für Relativ- bzw. Schwerpunktsbewegung.

4.1 Die exakte Lösung

Hierfür kann die Diagonalamplitude der Resolvente $D =<\chi\,|\,\mathcal{G}(E)\,|\,\chi>$ sowohl exakt als auch in TIMF-Näherung berechnet werden. Die exakte Diagonalamplitude lautet

$$D=<\chi'\,|\Psi>=<\chi\,|\Psi>, \qquad (4.10)$$

wobei Ψ definiert ist durch

$$(E-\mathcal{H})|\,\Psi>=|\,\chi>. \qquad (4.11)$$

Da $\mathcal{H}$ aus Gl.4.1 den Schwerpunktsanteil invariant läßt, ist $\Psi=\Psi_r\chi_{c.m.}$ ein Produkt, von dem nur der Relativanteil für die Lösung interessiert. Gleichung 4.11 wird so zu

$$\begin{aligned}(E-\mathcal{H})|\Psi_r> &= |\chi_r> && (4.12)\\ \text{oder } (E-\mathcal{H}_0)|\Psi_r> &= |\,\chi_r>+\mathcal{V}|\,\Psi_r> \\ &= |\,\chi_r>-\lambda|\,\nu><\nu\,|\,\Psi_r>, && (4.13)\end{aligned}$$

wobei das Potential in der Form 4.4 geschrieben, sowie $\mathcal{H}_0=\mathcal{H}-\mathcal{V}$ abgekürzt wurden. Durch Invertieren gelangt man zu

$$|\,\Psi_r>=\mathcal{G}_0|\,\chi_r>-\lambda\mathcal{G}_0|\,\nu><\nu\,|\,\Psi_r>, \qquad (4.14)$$

mit $\mathcal{G}_0=(E-\mathcal{H}_0)^{-1}$, und durch projizieren auf $<\nu\,|$ erhält man

$$<\nu\,|\,\Psi_r>=\frac{<\nu\,|\,\mathcal{G}_0\,|\,\chi_r>}{1+\lambda<\nu\,|\,\mathcal{G}_0\,|\,\nu>}, \qquad (4.15)$$

und damit, wieder eingesetzt in Gl.4.14, ergibt sich

$$|\,\Psi_r>=\mathcal{G}_0|\,\chi_r>-\lambda\mathcal{G}_0|\,\nu>\frac{<\nu\,|\,\mathcal{G}_0\,|\,\chi_r>}{1+\lambda<\nu\,|\,\mathcal{G}_0\,|\,\nu>}. \qquad (4.16)$$

Die exakte Amplitude folgt demnach aus Gl.4.10 als

$$\begin{aligned} D &= <\chi_r\,|\,\mathcal{G}_0\,|\,\chi_r> -\lambda\frac{<\chi_r\,|\,\mathcal{G}_0\,|\,\nu><\nu\,|\,\mathcal{G}_0\,|\,\chi_r>}{1+\lambda<\nu\,|\,\mathcal{G}_0\,|\,\nu>} \\ &= <\chi_r\,|\,\mathcal{G}_0\,|\,\chi_r> -\lambda\frac{<\nu\,|\,\mathcal{G}_0\,|\,\chi_r>^2}{1+\lambda<\nu\,|\,\mathcal{G}_0\,|\,\nu>}, \end{aligned} \tag{4.17}$$

in der letzten Zeile ausnutzend, daß sowohl $<q\,|\,\nu>$ als auch $<q\,|\,\chi_r>$ reell sind. Die auftretenden eindimensionalen Integrale sind ohne Probleme numerisch lösbar.

4.2 Die TIMF–Näherung

Beginnen wir jetzt mit der Mean-Field-Rechnung, und berechnen die Stationaritätsgleichungen für das additive Funktional 1.6. Bei Benutzung der darin enthaltenen Normierungsfaktoren hat man bei Erreichen der Konvergenz die zusätzlichen Kontrollbedingungen $\det\alpha = \det\alpha' = \det\beta$, die man zu Testzwecken gebrauchen kann. Ansonsten sind die Normierungsfaktoren bei Einsetzen in das multiplikative Funktional 1.12 irrelevant. Mit dem Ansatz

$$\begin{aligned} |\,\Phi> &= |\,\varphi_1\varphi_2> = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\varphi_1\varphi_2) - |\varphi_2\varphi_1)\right], \\ <\Phi'\,| &= <\varphi_1'\varphi_2'\,| = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[(\varphi_1'\varphi_2'| - (\varphi_2'\varphi_1'|\right], \end{aligned} \tag{4.18}$$

schreibt sich der $(E-\mathcal{H})$–Term des Funktionals 1.6 für das Modell als

$$\begin{aligned} &<\Phi'\,|\,(E-\mathcal{H})\,|\,\Phi>= \\ &\quad E\left[<\varphi_1'\,|\,\varphi_1><\varphi_2'\,|\,\varphi_2> - <\varphi_1'\,|\,\varphi_2><\varphi_2'\,|\,\varphi_1>\right] \\ &\quad -\frac{1}{4}\Big[<\varphi_1'\,|\,q_1^2\,|\,\varphi_1><\varphi_2'\,|\,\varphi_2> + <\varphi_2'\,|\,q_2^2\,|\,\varphi_2><\varphi_1'\,|\,\varphi_1> \\ &\quad - <\varphi_1'\,|\,q_1^2\,|\,\varphi_2><\varphi_2'\,|\,\varphi_1> - <\varphi_2'\,|\,q_2^2\,|\,\varphi_1><\varphi_1'\,|\,\varphi_2>\Big] \\ &\quad +\frac{1}{2}\left[<\varphi_1'\,|\,q_1\,|\,\varphi_1><\varphi_2'\,|\,q_2\,|\,\varphi_2> - <\varphi_1'\,|\,q_1\,|\,\varphi_2><\varphi_2'\,|\,q_2\,|\,\varphi_1>\right] \\ &\quad - <\varphi_1'\varphi_2'\,|\,v\,|\,\varphi_1\varphi_2>, \end{aligned} \tag{4.19}$$

mit $\mathcal{V} = v_{12} = v$, während die verbleibenden „inhomogenen“ Terme lauten

$$<\Phi'\,|\,\chi> + <\chi'\,|\,\Phi> = <\varphi_1'\varphi_2'\,|\,\chi_1\chi_2> + <\chi_1'\chi_2'\,|\,\varphi_1\varphi_2>\,. \tag{4.20}$$

Die TIMF-Gleichungen vereinfachen sich, wenn man die Symmetrie der Kanalwellenfunktionen χ_1, χ_2 auch für die Versuchsfunktionen φ_1 und φ_2 nutzt. Für die $\chi_i = \chi_i'$ gilt nach den Gln.4.6 und 4.7

$$P\chi_1 = \chi_2, \qquad P\chi_2 = \chi_1, \tag{4.21}$$

$$A\chi_1 = \chi_1 = \chi_1', \qquad A\chi_2 = \chi_2 = \chi_2', \tag{4.22}$$

wobei P den Paritätsoperator und A den antilinearen Operator der Komplexkonjugation in Impulsdarstellung bezeichnen. Bezüglich der Gruppe Z_2 der Parität existieren die irreduziblen Unterräume

$$\chi^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_1 + \chi_2), \tag{4.23}$$

$$\chi^- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_2 - \chi_1), \tag{4.24}$$

mit

$$P\chi_+ = \chi_+ \quad , \quad P\chi_- = -\chi_- \, . \tag{4.25}$$

Da auch die auftretenten Operatoren den geforderten Vertauschungsrelationen genügen

$$Pq_i^2 = q_i^2 P, \tag{4.26}$$

$$(P \otimes P)(q_1 \otimes q_2) = (q_1 \otimes q_2)(P \otimes P), \tag{4.27}$$

$$(P \otimes P)v = v(P \otimes P), \tag{4.28}$$

$$Aq_i^2 = (q_i^2)^+ A = q_i^2 A, \tag{4.29}$$

$$(A \otimes A)(q_1 \otimes q_2) = (q_1 \otimes q_2)^+ (A \otimes A) = (q_1 \otimes q_2)(A \otimes A), \tag{4.30}$$

$$(A \otimes A)v = v^+(A \otimes A) = v(A \otimes A), \tag{4.31}$$

kann man also im Sinne einer Projektion vor der Variation ansetzen

$$P\varphi_1 = \varphi_1, \qquad P\varphi_2 = -\varphi_2\,, \tag{4.32}$$

$$P\varphi_1' = \varphi_1', \qquad P\varphi_2' = -\varphi_2'\,, \tag{4.33}$$

$$A\varphi_1 = \varphi_1', \qquad A\varphi_2 = \varphi_2'\,. \tag{4.34}$$

Damit gilt $\varphi_i'^*(q) = \varphi_i(q)$ (i.a. $\neq \varphi_i'(q)$) und aus den Gln.4.32 und 4.33 folgt aufgrund der Parität der Versuchsfunktionen z.B. $<\varphi_1' \,|\, \varphi_2> = 0$ und $<\varphi_1' \,|\, q \,|\, \varphi_1> = 0$. Die Gl.4.19 vereinfacht sich daher zu

$$\begin{aligned} &<\Phi' \,|\, (E - \mathcal{H}) \,|\, \Phi> = \\ &\quad E\,[<\varphi_1' \,|\, \varphi_1><\varphi_2' \,|\, \varphi_2>] \\ &\quad -\frac{1}{4}\left[<\varphi_1' \,|\, q_1^2 \,|\, \varphi_1><\varphi_2' \,|\, \varphi_2> + <\varphi_2' \,|\, q_2^2 \,|\, \varphi_2><\varphi_1' \,|\, \varphi_1>\right] \\ &\quad +\frac{1}{2}\,[- <\varphi_1' \,|\, q_1 \,|\, \varphi_2><\varphi_2' \,|\, q_2 \,|\, \varphi_1>] \\ &\quad - <\varphi_1'\varphi_2' \,|\, v \,|\, \varphi_1\varphi_2> \, . \end{aligned} \tag{4.35}$$

Die Funktionalableitungen nach $<\varphi_i' \,|$ können daraus abgelesen werden:

$$\begin{aligned} &\frac{\delta <\Phi' \,|\, (E - \mathcal{H}) \,|\, \Phi>}{\delta <\varphi_1' \,|} = \\ &\quad <\varphi_2' \,|\, \varphi_2> \left[E - \frac{1}{4}q_1^2 - \frac{1}{4}\frac{<\varphi_2' \,|\, q_2^2 \,|\, \varphi_2>}{<\varphi_2' \,|\, \varphi_2>}\right] |\, \varphi_1> \\ &\quad + <\cdot\, \varphi_2' \,|\, (\frac{1}{2}q_1 q_2 - v) \,|\, \varphi_1\varphi_2> \, , \end{aligned} \tag{4.36}$$

sowie

$$\frac{\delta < \Phi' \,|\, (E-\mathcal{H}) \,|\, \Phi >}{\delta < \varphi_2' \,|} = \tag{4.37}$$
$$< \varphi_1' \,|\, \varphi_1 > \left[E - \frac{1}{4} q_2^2 - \frac{1}{4} \frac{< \varphi_1' \,|\, q_1^2 \,|\, \varphi_1 >}{< \varphi_1' \,|\, \varphi_1 >} \right] |\, \varphi_2 >$$
$$+ < \varphi_1' \cdot \,|\, (\frac{1}{2} q_1 q_2 - v) \,|\, \varphi_1 \varphi_2 >,$$

und die Ableitungen des χ–Terms sind

$$\begin{aligned} \frac{\delta < \Phi' \,|\, \chi >}{\delta < \varphi_1' \,|} &= |\, \chi_1 >< \varphi_2' \,|\, \chi_2 > - |\, \chi_2 >< \varphi_2' \,|\, \chi_1 > \\ &= |\, \chi^+ >< \varphi_2' \,|\, \chi^- >, \end{aligned} \tag{4.38}$$

und

$$\begin{aligned} \frac{\delta < \Phi' \,|\, \chi >}{\delta < \varphi_2' \,|} &= |\, \chi_2 >< \varphi_1' \,|\, \chi_1 > - |\, \chi_1 >< \varphi_1' \,|\, \chi_2 > \\ &= |\, \chi^- >< \varphi_1' \,|\, \chi^+ > . \end{aligned} \tag{4.39}$$

Man beachte, daß dabei die Kanalwellenfunktionen durch die Einteilchenorbitale fester Parität ausgedrückt wurden, denn es gilt

$$|\, \chi_1 \chi_2 >= |\, \chi^+ \chi^- > . \tag{4.40}$$

Daraus ergeben sich die zu lösenden TIMF-Gleichungen. Benutzen wir das additive Funktional 1.6, so gelangen wir zu folgenden Mean-Field-Gleichungen für die Orbitale φ_1 und φ_2,

$$\left[< \varphi_2' \,|\, \varphi_2 > \left(E - \frac{1}{4} q^2 \right) - \frac{1}{4} < \varphi_2' \,|\, q^2 \,|\, \varphi_2 > \right] \varphi_1(q)$$
$$- \frac{1}{2} \int dq' \; [q' \varphi_2(q') q \varphi_2(q) + w_2(q,q')] \, \varphi_1(q')$$
$$= \chi^+(q) \;\; < \varphi_2'(q) \,|\, \chi^-(q) > \tag{4.41}$$

mit dem selbstkonsistenten Potential

$$w_2(q,q') = -\lambda \nu^2 \int dk\, dk' \, \delta(q+k-q'-k')(q-k)(q'-k') \tag{4.42}$$
$$\times \varphi_2(k) \varphi_2(k') \exp\left[-\frac{1}{4} \nu^2 (q-k)^2 \right] \exp\left[-\frac{1}{4} \nu^2 (q'-k')^2 \right],$$

wobei der direkte Term den gleichen Beitrag wie der Austauschterm liefert. Die Gleichung für das Orbital φ_2 hat das gleiche Aussehen,

$$\left[< \varphi_1' \,|\, \varphi_1 > \left(E - \frac{1}{4} q^2 \right) - \frac{1}{4} < \varphi_1' \,|\, q^2 \,|\, \varphi_1 > \right] \varphi_2(q)$$
$$- \frac{1}{2} \int dq' \; [q' \varphi_1(q') q \varphi_1(q) + w_1(q,q')] \, \varphi_2(q')$$
$$= \chi^-(q) \;\; < \varphi_1'(q) \,|\, \chi^+(q) > \tag{4.43}$$

mit dem selbstkonsistenten Potential

$$w_1(q,q') = -\lambda\nu^2 \int dk\, dk'\, \delta(q+k-q'-k')(q-k)(q'-k') \quad (4.44)$$
$$\times\varphi_1(k)\varphi_1(k') \exp\left[-\frac{1}{4}\nu^2(q-k)^2\right] \exp\left[-\frac{1}{4}\nu^2(q'-k')^2\right].$$

Durch Wahl einer geeigneten Diskretisierung werden aus den $\varphi_i(q)$ die Komponentenvektoren $\vec{\varphi_i}$ und analog die inhomogenen rechten Seiten zu $\vec{\chi_i}$, und aus den Gln.4.41, 4.43 Matrixgleichungen der Gestalt $\mathbf{A}_i\vec{\varphi_i} = \vec{\chi_i}$, die selbstkonsistent mit Hilfe eines Computers gelöst werden müssen. Die TIMF-Lösungsprozedur besteht nun darin, mit einer ersten Schätzung der Versuchsfunktionen φ_i zu beginnen, damit die benötigten Integrale,

$$<\varphi_i' \,|\, q^2 \,|\, \varphi_i> \;=\; \int dq\, \varphi_i(q)^2 q^2, \quad (4.45)$$

$$<\varphi_i' \,|\, \varphi_i> \;=\; \int dq\, \varphi_i(q)^2, \quad (4.46)$$

$$<\varphi_i' \,|\, \chi^\pm> \;=\; \int dq\, \varphi_i(q)\chi^\pm(q), \quad (4.47)$$

sowie die selbstkonsistenten Potentiale $w_i(q,q')$ zu berechnen, die Matrizen $\mathbf{A}_i$ zu bestimmen um danach neue Orbitale zu erhalten. Dies wird bis zur Konvergenz fortgesetzt.

Die Gln.4.41, 4.43 sind so geschrieben, daß innerhalb *eines* Iterationsschrittes keine zwischen φ_1 und φ_2 gekoppelten Gleichungen auftreten, und die Versuchsfunktionen somit nur indirekt über die Selbstkonsistenzbedingungen miteinander zusammenhängen. Man hätte auch die Möglichkeit, beispielsweise den bzgl. der Versuchsfunktion nichtlokalen Term in Gl.4.41 $\int dq'\ [q\varphi_2(q)q'\varphi_2(q')]\,\varphi_1(q')$ anders zu klammern $[q\int dq'\, q'\varphi_2(q')\varphi_1(q')]\,\varphi_2(q)$, um dadurch die Möglichkeit zu verdeutlichen, diesen als einen lokalen Term bzgl. der anderen Versuchsfunktion aufzufassen, und somit eine explizite Kopplung zwischen den beiden φ_i zu erhalten. Die beiden Versuchsfunktionen innerhalb eines Iterationsschrittes zu entkoppeln, ist für dieses Problem gewissermaßen kanonisch und hat sich auch praktisch bewährt. Allerdings bestünde gleichermaßen die Möglichkeit, die beiden Gleichungen für φ_i und φ_i' zu einer zusammenzufassen und die beiden Versuchsfunktionen direkt zu koppeln, oder in noch mehr als zwei pro Iterationsschritt ungekoppelte Gleichungen zu unterteilen. Letzteres bietet sich vor allem bei Speicherplatzproblemen an, da die Dimensionen der Matrizen $\mathbf{A_i}$ dadurch reduziert werden. Systematische Untersuchungen dazu sind dem Verfasser dieser Arbeit nicht bekannt, könnten aber bei mehrdimensionalen Problemen wegen der dann schnell zunehmenden Größe der Matrizen $\mathbf{A_i}$ Bedeutung bekommen.

Da die TIMF mit $\varphi_i = \chi_i/E$ bzgl. der Berechnung von Diagonalelementen von $\mathcal{G}$ bei $\mathrm{Im}(E) \to \infty$ exakt wird [33], startet man zweckmäßigerweise mit großem Imaginärteil der Energie und $\varphi_1 = \chi^+/E$ sowie $\varphi_2 = \chi^-/E$ als Startorbitalen und verringert langsam den Imaginärteil bis zum gewünschtem Wert, ohne dessen Vorzeichen zu verändern. In der Vergangenheit hat sich dieses Verfahren bewährt [33, 35, 38] und es zeigten sich dabei keine Bifurkationen oder andere störende Effekte. Dies beinhaltet demnach in der Regel auch die Auswahl einer geeigneten TIMF-Lösung, denn im allgemeinen können viele verschiedene Lösungen Selbstkonsistenz erreichen.

Als wichtige Eigenschaft der TIMF-Lösungen zeigten sich bisher immer die leichte Durchführbarkeit des On-Shell-Limes $\mathrm{Im}(E) \rightarrow 0$ und Selbstenergien, die dabei komplex bleiben. Für evtl. mögliche exakte Lösungen ist in der Regel dieser Limes numerisch sehr viel schwieriger zu erhalten [38]. Dies zeigte sich auch in dem hier vorgestellten lösbaren Modell. Für die TIMF-Lösung war über den gesamten Konvergenzbereich ein Gitter von ca. 35 äquidistanten Punkten für das eindimensionale Kontinuum ausreichend. Bei der Berechnung der Integrale für die exakte Amplitude 4.17 jedoch reichte solch ein Gitter schon bei moderatem Imaginärteil der Energie bei weitem nicht mehr aus, und es mußte zur numerischen Integration auf automatische adaptive Integrationsroutinen zurückgegriffen werden, die mehrere hundert Punkte für die Funktionsauswertung benötigten. Diese Eigenschaft der TIMF-Lösung stammt von der quadratintegrablen Startfunktion χ_i/E und den daraus entstehenden gutartigen selbstkonsistenten Potentialen, die sich im Verlauf der Iteration nur langsam verändern und im allgemeinen keine numerisch nicht mehr zu behandelnden Peaks entwickeln. Man kann davon sprechen, daß die TIMF teilweise Off-Shell-Eigenschaften im On-Shell-Limes behält, was für den praktischen Umgang mit ihr einen großen Vorteil darstellt.

Im Falle des ausgewählten Modells trat jedoch eine Schwierigkeit auf, die mit dem Schwerpunktsterm zusammenhängt. Dieser wird bei zunehmender Teilchenzahl immer kleiner und deshalb bei großer Teilchenzahl meistens weggelassen oder durch seinen Erwartungswert, also eine Konstante, ersetzt. Das Modell beinhaltet jedoch nur zwei Teilchen, und dafür ist dieser Term nicht klein. Er muß demnach explizit mitgenommen werden und liefert genauso einen Beitrag zum selbstkonsistenten Potential wie andere Zweiteilchenoperatoren. Wegen seiner Stärke und Langreichweitgkeit erschwert er tatsächlich das Konvergenzverhalten sehr. Bei kleinem Imaginärteil der Energie zerstört er die quadratintegrablen Versuchsfunktionen durch wachsende, numerisch nicht mehr zu behandelnde Peaks, und die TIMF-Ampitude konvergiert, wenn überhaupt, gegen von der exakten Amplitude verhältnismäßig stark abweichende Lösungen. Dies macht die Konvergenz der TIMF nahe der reellen Achse zu einer diffizilen Angelegenheit, bei der man demzufolge immer das Gitter bzw. die Versuchfunktionen vor Augen haben muß. Eine Verbesserung wird erreicht durch Einführen eines Hilfsparameters λ_2, der den Schwerpunktsterm zu Beginn der Iterationen ausschaltet und parallel zur Erniedrigung von $\mathrm{Im}(E)$ langsam auf den vollen Wert erhöht. In Verbindung mit einem Relaxationsverfahren, bei dem die Orbitale nach jeder Iteration nur teilweise verändert werden, führt dies auch für ausreichend kleines $\mathrm{Im}(E)$ zu Konvergenz. Dazu sind zwar teilweise mehrere hundert Iterationen notwendig, jedoch kann man so der reellen Achse nahe genug kommen, um den TIMF-On-Shell-Wert gut zu extrapolieren.

Das Problem wird in den Abb.4.1 und 4.2 nochmals verdeutlicht. Dort sind die beiden Orbitale φ_1 und φ_2 nebeneinander gezeichnet in ihrem Verlauf während der Iteration. Begonnen bei einem willkürlichen Startpunkt wurden bei jeder fünften Iteration die Orbitale ausgegeben. Man erkennt zu Anfang die Ähnlichkeit mit χ_1 bzw. χ_2, und am Ende die sich entwickelnden Peaks. Das stufenhafte Ansteigen der Maxima liegt an der schrittweisen Veränderung von $\mathrm{Im}(E)$ bzw. λ_2 im Laufe der Iteration.

4.3 Die inhomogene RPA (IRPA)

Der in diesem Fall zu lösenden inhomogenen Gleichung

$$(E - \mathcal{T} - \mathcal{V} + \mathcal{H}_{c.m.})|\,\Psi>=|\,\chi>, \tag{4.48}$$

entspricht die folgende homogene Gleichung als Grundlage der IRPA

$$(E - \mathcal{T} - \mathcal{V} + \mathcal{H}_{c.m.} - \Lambda|\,\chi><\chi\,|)|\,\Psi>=(E-\mathcal{H}')|\,\Psi>=0. \tag{4.49}$$

Die daraus resultierenden IRPA-Gleichungen 3.47, 3.48 vereinfachen sich aufgrund der Symmetrien des Problems.

Wegen der Bra-ket Symmetrie 4.22 und des Ansatzes 4.34 erhält man

$$<\chi_i'\,|\,\varphi_j>=<\varphi_j'\,|\,\chi_i>\,. \tag{4.50}$$

Des weiteren überzeugt man sich, daß für die in 4.1 vorkommenden Zweiteilchenoperatoren gilt

$$\begin{aligned} <\varphi_m'\varphi_n'\,|\,v\,|\,\varphi_i\varphi_j> &= <\varphi_i'\varphi_j'\,|\,v\,|\,\varphi_m\varphi_n>, & (4.51)\\ -\frac{1}{2}<\varphi_m'\varphi_n'\,|\,q_1q_2\,|\,\varphi_i\varphi_j> &= -\frac{1}{2}<\varphi_i'\varphi_j'\,|\,q_1q_2\,|\,\varphi_m\varphi_n>, & (4.52)\end{aligned}$$

wobei wie in Kapitel 2 und 3 auch hier die Indizes m, n für Teilchen- und i, j für Lochorbitale stehen. Bezeichnen wir die Summe der beiden Zweiteilchenoperatoren $\mathcal{V} - q_1q_2/2$ mit w, so gilt also $w_{m'n'ij} = w_{i'j'mn}$ und analog $w_{m'j'in} = w_{n'i'jm}$. Den Ausdrücken 3.102, 3.103 und 3.104 der IRPA-Matrizen A, B, C, D entnimmt man dann

$$B = C \quad , \quad A = \tilde{A} = D\,. \tag{4.53}$$

Die IRPA-Matrix M wird damit zu

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ B & A \end{pmatrix}. \tag{4.54}$$

Da weiterhin stets $B = \tilde{B}$ gilt, bedeutet das

$$M = \tilde{M}, \tag{4.55}$$

und zusammen mit $\tilde{M} = \gamma M \gamma$ folgt

$$M = \gamma M \gamma. \tag{4.56}$$

Aus der Existenz eines Rechtseigenvektors $V^n = \binom{X^n}{Y^N}$ der IRPA-Gleichung mit dem Eigenwert ω_n

$$\eta M V^n = \omega_n V^n, \tag{4.57}$$

folgt aus Kapitel 3 die Existenz eines Linkseigenvektors $(Y^n, -X^n)$ zu dem Eigenwert $-\omega_n$. Aufgrund der Beziehung 4.56 leitet man mit $\eta\gamma = -\gamma\eta$ und $\gamma^2 = 1$ zusätzlich ab

$$\begin{aligned} \eta M V^n &= \eta\gamma M \gamma V^n = -\gamma\eta M\gamma V^n \\ \Rightarrow\ -\eta M \gamma V^n &= \gamma\omega_n V^n \\ \Rightarrow\ \eta M(\gamma V^n) &= -\omega_n(\gamma V^n). \end{aligned} \tag{4.58}$$

D.h. es existiert auch der Rechtseigenvektor

$$\gamma V^n = \begin{pmatrix} Y^n \\ X^n \end{pmatrix} \tag{4.59}$$

zum Eigenwert $-\omega_n$. Damit folgt allgemein aus den zusätzlichen Symmetriebedingungen 4.53 $Y = V$ und $X = U$. Das bedeutet $\gamma T \gamma = T$, und im Gegensatz zu einer unitären kanonischen Transformation, die den Bedingungen 2.26 und damit 2.25 genügt, gilt hier $T\eta\tilde{T}\eta = 1$.

Berücksichtigt man, daß zu den Matrixelementen $w_{m'n'ij}$ und $w_{m'j'in}$ neben $v_{m'n'ij}$ und $v_{m'j'in}$ auch die Schwerpunktsanteile beitragen

$$\begin{aligned} &-\frac{1}{2} < \varphi'_m \varphi'_n \,|\, q_1 q_2 \,|\, \varphi_i \varphi_j >= \\ &\quad -\frac{1}{2} \left(< \varphi'_m \,|\, q_1 \,|\, \varphi_i >< \varphi'_n \,|\, q_2 \,|\, \varphi_j > - < \varphi'_m \,|\, q_1 \,|\, \varphi_j >< \varphi'_n \,|\, q_2 \,|\, \varphi_i > \right), \end{aligned} \tag{4.60}$$

$$\begin{aligned} &-\frac{1}{2} < \varphi'_m \varphi'_j \,|\, q_1 q_2 \,|\, \varphi_i \varphi_n >= \\ &\quad -\frac{1}{2} \left(< \varphi'_m \,|\, q_1 \,|\, \varphi_i >< \varphi'_j \,|\, q_2 \,|\, \varphi_n > - < \varphi'_m \,|\, q_1 \,|\, \varphi_n >< \varphi'_j \,|\, q_2 \,|\, \varphi_i > \right), \end{aligned} \tag{4.61}$$

so lassen sich die Matrizen der IRPA-Gleichung für das Modell angeben

$$\begin{aligned} A_{minj} &= \delta_{ij}\delta_{nm}(\eta_n - \eta_i) - \delta_{ij}\bar{\eta} \sum_{l=1}^{2} \frac{< \varphi'_m \,|\, \chi_l >< \chi'_l \,|\, \varphi_n >}{< \varphi'_l \,|\, \chi_l >< \chi'_l \,|\, \varphi_l >} \\ &\quad + < \varphi'_m \varphi'_j \,|\, v \,|\, \varphi_i \varphi_n > - \frac{1}{2} < \varphi'_m \varphi'_j \,|\, q_1 q_2 \,|\, \varphi_i \varphi_n > \\ &\quad + \bar{\eta} \frac{< \varphi'_m \,|\, \chi_i >< \chi'_j \,|\, \varphi_n >}{< \varphi'_i \,|\, \chi_i >< \chi'_j \,|\, \varphi_j >}, \end{aligned} \tag{4.62}$$

$$\begin{aligned} B_{minj} &= < \varphi'_m \varphi'_n \,|\, v \,|\, \varphi_i \varphi_j > - \frac{1}{2} < \varphi'_m \varphi'_n \,|\, q_1 q_2 \,|\, \varphi_i \varphi_j > \\ &\quad + \bar{\eta} \frac{< \varphi'_m \varphi'_n \,|\, \chi'_i \chi'_j >}{< \varphi'_i \,|\, \chi_i >< \chi'_j \,|\, \varphi_j >}. \end{aligned} \tag{4.63}$$

Das schematische Vorgehen bei der IRPA stellt sich wie folgt dar:

1. Es wird eine TIMF-Näherung zu der gewünschten Energie E berechnet.
2. Daraus wird der zu $\mathcal{H}'$ gehörige Hartree-Fock-Operator h' gewonnen.
3. Durch Diagonalisieren von h' werden die Teilchenorbitale φ_n erhalten, deren maximale Anzahl von der Gittergröße abhängt. (Dieser Schritt wird im nächsten Abschnitt revidiert.)
4. Mit diesen Orbitalen oder einer Auswahl daraus bekommt man durch Lösen der IRPA-Gleichung die IRPA–Eigenwerte.
5. Durch Vergleich mit den TDA-Eigenwerten werden die IRPA-Eigenwerte ausgewählt, die zur Energiekorrektur ΔE beitragen.
6. Mit einer geänderten Energie E_1, aber sonst konstant gehaltenen Parametern, insbesondere unverändertem Boost k, kehrt man zu Schritt 1 zurück. Man wiederholt nun die ganze Prozedur bis nach p–Schritten die IRPA-Energie $E_p + \Delta E_p$ der gewünschten Energie E entspricht.

Erwähnenswert beim letztem Schritt ist besonders die Tatsache, daß der Boost der χ_i im Laufe der IRPA-Iteration konstant zu halten ist, denn das Ziel ist, die Amplitude für fest vorgegebene Kanalwellenfunktionen zu berechnen. Hat man solchermaßen den gewünschten Energiewert erreicht, stellt die letzte TIMF-Näherung zu der verschobenen Energie die IRPA-Näherung zur gewünschten Energie dar. Diese kann verglichen werden mit der TIMF-Rechnung direkt zur gewünschten Energie.

4.4 Die IRPA mit quadratintegrablen Teilchenorbitalen (SIRPA)

Bei der numerischen Berechnung der IRPA stellt sich ein Problem heraus, das spezifisch ist für die Situation im kontinuierlichen Spektrum. Die durch das IRPA-Verfahren aus dem Hartree-Fock-Operator gewonnenen Teilchenorbitale zeigen im Gegensatz zu den Lochorbitalen eine numerisch ungünstige Eigenschaft: Bis auf einen durch das separable Potential $\mathcal{V}$ entstandenen Bindungszustand sind sie im wesentlichen auf einzelne Gitterpunkte konzentriert, was einem diskreten Analogon zur δ-Funktion entspricht. Verwunderlich ist das nicht, denn der von den quadratintegrablen χ_i stammende separable Zusatzterm in $\mathcal{H}'$ erzeugt zwar quadratintegrable Lochorbitale als Eigenfunktionen von h', für die übrigen Eigenfunktionen von h' jedoch bleibt die Herkunft vom kontinuierlichen $\mathcal{H}'$–Spektrum in jenen numerisch auftretenden Peaks sichtbar. Dies ist in den Abbildungen 4.3 und 4.4 verdeutlicht. Dort sind die Eigenfunktionen des Hartree-Fock Hamiltonoperators für einen Beispielfall zu sehen. Mit einem Gitter von 35 Punkten gibt es auch 35 Eigenfunktionen, jeweils mit gerader bzw. ungerader Parität. Bei den letzteren sind die nach unten weisenden Peaks durch die Zeichenebene verdeckt. Mit diesen Teilchenorbitalen sind die IRPA–Resultate bzgl. Veränderungen des Gitters instabil und daher numerisch unbrauchbar.

Da die Lochorbitale durch den $\Lambda|\,\chi><\chi'\,|$–Term quadratintegrabel werden, könnte man daran denken, zusätzliche separable Terme in $\mathcal{H}'$ einzuführen, welche die Quadratintegrabilität auch für die Teilchenorbitale erreichen. Zusätzlichen Terme sind zwar möglich, allerdings nur erlaubt, wenn sie die exakten Lösungen Ψ, Ψ' der Gl.4.49 unverändert lassen. Die sind jedoch höchstens näherungsweise bekannt, so daß zusätzliche Terme nicht exakt zu Ψ, Ψ' biorthogonalisiert werden können, und Ψ, Ψ' somit keine exakten Eigenfunktionen von $\mathcal{H}'$ mehr sind. Nur auf Hartree-Fock Niveau in h' wäre eine Addition zusätzlicher separabler Terme möglich, ohne die TIMF-Lösung Φ, Φ' zu verändern, eine RPA arbeitet aber mit dem vollen $\mathcal{H}'$.

Die Erzeuger und Vernichter der Teilchenorbitale haben aber in der RPA neben der Eigenschaft, den Bra- bzw. Ket-Grundzustand zu annihilieren, nur die Funktion eine vollständige Basis zu bilden. Dies können alle biorthogonalen, vollständigen Funktionensysteme, solange sie die Lochorbitale unverändert enthalten und nicht mit Teilchenorbitalen mischen. Ohne Probleme ist es daher möglich, den 3.Schritt des IRPA-Verfahrens zu ersetzen durch die Auswahl eines beliebigen quadratintegrablen Funktionensystems als Teilchenorbitale, die dann bezüglich der Lochorbitale biorthonormalisiert werden. Dies ist sogar weniger aufwendig als das Diagonalisieren von h'. Die IRPA-Gleichungen müssen dazu aber etwas modifiziert werden, da die so gewonnenen Teilchen keine Eigenzustände des Hartree-Fock-Operators h' mehr sind. Zusätzlich hat man so die Freiheit, die Teilchenorbitale möglichst geschickt zu wählen.

Im folgenden wird das Arbeiten mit quadratintegrablen Teilchenorbitalen in der inhomogenen RPA mit SIRPA (Square-integrable Inhomogeneous RPA) bezeichnet.

Eine Vorstellung von solcherart erzeugten Teilchenorbitalen geben die Abbildungen 4.5 und 4.6. In ihnen sind beginnend mit den TIMF-Lösungen φ_1, φ_2 acht weitere, jeweils zu den Bra-Orbitalen biorthogonale, quadratintegrable φ_n dargestellt, die ausgehend von verschieden geboosteten Gaußfunktionen analog zu 4.6 und 4.7 nach einem Schmidtschen (Bi-)Orthogonalisierungsverfahren erzeugt wurden. Für die SIRPA berechnen sich die Matrizen A und B aus den Gln.4.62 und 4.63 bei binormierten Orbitalen φ'_α, φ_α zu

$$
\begin{aligned}
A_{minj} &= \delta_{ij}\,(-\delta_{nm}\eta_i + <\varphi'_m\,|\,t\,|\,\varphi_n>) \\
&\quad + \delta_{ij}\sum_{l=1}^{2}\Big(<\varphi'_m\varphi'_l\,|\,v\,|\,\varphi_n\varphi_l> - \frac{1}{2}<\varphi'_m\varphi'_l\,|\,q_1q_2\,|\,\varphi_n\varphi_l>\Big) \\
&\quad + <\varphi'_m\varphi'_j\,|\,v\,|\,\varphi_i\varphi_n> - \frac{1}{2}<\varphi'_m\varphi'_j\,|\,q_1q_2\,|\,\varphi_i\varphi_n> \\
&\quad + \bar{\eta}\frac{<\varphi'_m\,|\,\chi_i><\chi'_j\,|\,\varphi_n>}{<\varphi'_i\,|\,\chi_i><\chi'_j\,|\,\varphi_j>}, \qquad (4.64) \\
B_{minj} &= <\varphi'_m\varphi'_n\,|\,v\,|\,\varphi_i\varphi_j> - \frac{1}{2}<\varphi'_m\varphi'_n\,|\,q_1q_2\,|\,\varphi_i\varphi_j>
\end{aligned}
$$

$$+\,\bar{\eta}\frac{<\varphi'_m\varphi'_n\,|\,\chi_i\chi_j>}{<\varphi'_i\,|\,\chi_i><\chi'_j\,|\,\varphi_j>}. \tag{4.65}$$

Man erkennt, daß in den $\bar{\eta}$–Termen nur die χ_i–, χ'_i–Anteile der Lochorbitale, also $<\varphi'_n\,|\,\chi_i>$ bzw. $<\chi'_i\,|\,\varphi_n>$, vorkommen. Daher bieten sich als erste Teilchenorbitale $\bar{\chi}_n$, $\bar{\chi}'_n$ an, die aus χ_i, χ'_i hervorgehen durch Biorthogonalisieren relativ zu den Lochorbitalen φ_i, φ'_i. Denn weitere Teilchenorbitale, zu φ_i, φ'_i, $\bar{\chi}_i$, $\bar{\chi}'_i$ und damit auch zu χ_i, χ'_i biorthogonalisiert, liefern bei den $\bar{\eta}$–Termen in den Gln.4.64, 4.65 keinerlei weiteren Beitrag mehr. Die aus dem $\Lambda|\,\chi><\chi'\,|$–Term entstehenden Anteile sind daher mit $\bar{\chi}_n$, $\bar{\chi}'_n$ bereits voll berücksichtigt, nur bezüglich Termen der Zweiteilchenoperatoren $\mathcal{V}$ und $-q_1q_2/2$ spielen zusätzliche Teilchenorbitale eine Rolle. Deshalb kann man erwarten, daß bereits die zwei aus den χ_i, χ'_i entstehenden Teilchenorbitale einen wesentlichen Beitrag der SIRPA leisten, und in der Tat zeigt sich bei der numerischen Durchführung, daß diese zwei Teilchenorbitale bereits vollkommen ausreichend für das ausgewählte Modell sind. Das ist ein bedeutender Vorteil der SIRPA, den man mit einer IRPA, auch wenn sie keine numerischen Probleme mit δ-artigen Funktionen hätte, nicht erreichen kann, da die Teilchenorbitale dort durch h' vorgegeben und nicht frei wählbar sind.

Um einen besseren Eindruck von der Grundidee eines SIRPA-Verfahrens zu bekommen, sei dieses anhand der Abb.4.7 und 4.8 an einem konkreten Fall erläutert. Die Abbildungen zeigen einen Ausschnitt aus der Fläche, die vom Real- bzw. Imaginärteil der exakten Amplitude, bei konstantem Boost k, über der Energieebene aufgespannt wird. Mit (+) ist der Wert der ersten TIMF-Lösung (TIMF(alt)) an dem Punkt E_0 mit Re(E_0)=6.25 und Im(E_0)=2.0 gekennzeichnet, die gestrichelte Linie zeigt dabei die Abweichung von der exakten Amplitude (Exakt(alt),$\diamond$) an dieser Stelle an. Die SIRPA ergibt nun eine Energiekorrektur für den festen Amplitudenwert TIMF(alt). Dieser Wert TIMF(alt) ist deshalb nochmals an dem Punkt $E_0 + \Delta E_{SIRPA}$ gezeichnet und heißt dort RPA(neu) ($\times$). Seine Abweichung, sichtbar an der dortigen gestrichelten Linie, von dem dortigen exakten Amplitudenwert (Exakt(neu), $\square$) ist der SIRPA-Fehler. Wie man den Abbildungen entnimmt, ist er für den Realteil von D sehr klein, und auch für den Imaginärteil noch geringer als der TIMF-Fehler. Mit Exakt(Min.) ($\triangle$) ist ein exakter Wert von D dargestellt, der im Sinne der minimalen Quadrate im Real- **und** Imaginärteil am wenigsten von dem Wert TIMF(alt) abweicht. In den Abbildungen soll eine gestrichelte Linie die Abweichung anzeigen, eine solche ist jedoch nicht sichtbar. An dem Punkt ($\triangle$) ist demnach der Wert TIMF(alt) die exakte Amplitude. Hier ist zu erkennen, daß in diesem Fall der Realteil der durch die SIRPA erhaltenen Energie gut mit der zu Exakt(Min.) korrespondierenden Energie übereinstimmt, während bei dem Imaginärteil ein kleinerer Schritt in die richtige Richtung erfolgt.

Bei dem weiteren Vorgehen muß nun der Ausgangspunkt E_i der SIRPA so verschoben werden, daß $E_i+\Delta E_{SIRPA}$ auf dem interessierenden Wert $E = E_0$ zu liegen kommt. Im allgemeinen könnte man sich das als ein schwieriges Unterfangen vorstellen, aufgrund der Gleichmäßigkeit der Fläche reichte es beim nachfolgend betrachteten Modell aber in allen Fällen aus

$$E_1 = E_0 - \Delta E_{SIRPA(1)}, \tag{4.66}$$

zu wählen. Da die erste Energiekorrektur $\Delta E_{SIRPA(1)}$ kaum von der zweiten $\Delta E_{SIRPA(2)}$ verschieden ist, gilt

$$E_1 + \Delta E_{SIRPA(2)} = E_0 + (\Delta E_{SIRPA(2)} - \Delta E_{SIRPA(1)}) \approx E_0. \tag{4.67}$$

Dies wurde bei allen Berechnungen mit dem gegebenen Modell bestätigt.

Die Auswahl der SIRPA-Eigenwerte für die Formel zur Energiekorrektur

$$\Delta E = \frac{1}{2}\left(\mathrm{Tr}\,\omega - \mathrm{Tr}A\right), \tag{4.68}$$

die aus den TDA-Eigenwerten beim langsamen Einschalten der SIRPA-Matrix B entstehen, gestaltete sich für das Modell ebenfalls einfacher als ursprünglich angenommen. Da die SIRPA–Eigenwerte sich nur verhältnismäßig wenig von den TDA–Eigenwerten unterschieden, reichte es, die SIRPA-Eigenwerte mit dem geringsten (absoluten) Abstand zu den TDA-Eigenwerten auszuwählen. Zudem besaßen die TDA-Eigenwerte bei den nachfolgenden Rechnungen in den interessanten Bereichen immer negativen Imaginärteil, so daß schon dieses Kriterium zur Identifikation der Eigenwerte zur Berechnung von $\mathrm{Tr}\,\omega$ ausreichte.

Damit ist für das Vorgehen bei der inhomogenen RPA, zur Erlangung eines SIRPA-Ergebnisses zu einem vorgegebenen Energiewert, ein jeweils zweimaliges Lösen der TIMF-, TDA- und SIRPA-Gleichungen erforderlich.

4.5 Die numerischen Ergebnisse

Das vorgestellte lösbare Modell wurde für einen weiten Parameterbereich untersucht. Als Gitter genügten ca. 35 Punkte von beispielsweise 7.0 b bis -7.0 b bei Energiewerten, $\hbar^2/m = 1$ gesetzt, bis ca. 6 [MeV]. Der Faktor λ des Potentials bewegte sich im Bereich von 0 bis ca. 20, wurde aber meistens wie auch b und ν gleich 1 gesetzt. Die Berechnung der exakten, TIMF- und SIRPA-Amplitude erfolgte wie in den vorhergehenden Abschnitten geschildert. Die in Abb.4.4 gezeigten numerischen TIMF-Probleme äußerten sich auch in plötzlich auftretenden großen SIRPA–Energieverschiebungen. Bei der SIRPA wurde fast ausschließlich mit den zwei den χ_1, χ_2 entstammenden Teilchenorbitalen gearbeitet, da weitere Orbitale keinen wesentlichen Gewinn brachten. An Tabelle 1 ist an einem Beispiel, neben der $\pm$–Symmetrie der SIRPA-Eigenwerte, zu sehen, daß die Identifizierung der den TDA-Eigenwerten zuzuordnenden SIRPA-Eigenwerte nach einem Abstandskriterium leicht vorgenommen werden kann. Zudem besitzen alle TDA–Eigenwerte negativen Imaginärteil.

	Re	Im
TDA	−0.050423	−4.531350
	−6.229611	−0.850048
	−6.612514	−0.772935
	0.228851	−3.508958
SIRPA	−6.254120	−0.851742
	−0.057787	−4.497871
	6.254120	0.851742
	0.057787	4.497871
	−6.635630	−0.774979
	6.635630	0.774979
	0.222676	−3.465099
	−0.222676	3.465099

Tabelle 1: Die TDA- und SIRPA-Eigenwerte bei Re(E)=6.25, Im(E)=0.8 und λ=1.

Zur allgemeinen Orientierung ist in den Abb.4.9, 4.10, 4.11, 4.12 der Verlauf der exakten Amplitude in Abhängigkeit von der Energie bzw. λ dargestellt. Für $\mathrm{Im}(E) = 0$ kann die exakte Amplitude nicht berechnet werden, diese Linie ist daher an den breiteren Punktabständen erkennbar. An der reellen Achse ist im Real- bzw. Imaginärteil jeweils der Knick bzw. Sprung gut zu sehen.

Im Folgenden werden nun ein paar typische Resultate der numerischen Rechnungen vorgestellt. Einleitend sind in den Tabellen 2 und 3 für zwei typische Parametersätze die Resultate einer SIRPA-Rechnung aufgelistet.

In der ersten Zeile der Tabellen 2 und 3 stehen die Ergebnisse des ersten SIRPA-Durchgangs. Zu vorgegebener Energie E_0 wurden D_{Exakt} und D_{TIMF} bestimmt, während die erste Lösung der SIRPA-Gleichungen eine verschobene Energie $E' = E_0 + (\Delta E)_1$ ergibt. Die nächste Zeile zeigt die Ergebnisse D'_{Exakt} und D'_{TIMF} für diese Energie E' und konstant gehaltenen Boost $k = \sqrt{E_0}$. Obwohl eigentlich für die Rechnung nicht nötig, liefert sie aber bereits eine sehr gute Näherung für die korrekte SIRPA-Amplitude zu E_0. Da die Amplitudenkorrektur $\Delta D' = D_{TIMF} - D'_{TIMF}$ für E' kaum von der geringen Energiedifferenz ΔE abhängt, stellt $D'_{SIRPA} = D_{TIMF} + \Delta D'$ eine gute Näherung zur in der nächsten Zeile errechneten SIRPA-Amplitude D_{SIRPA} dar. In der dritten Zeile ist der zweite Durchgang dargestellt zu der Energie $E_1 = E_0 - (\Delta E)_1$ bei weiterhin konstantem Boost $k = \sqrt{E_0}$. Hierzu liefert die SIRPA eine Energiekorrektur $(\Delta E)_2$, die fast genau auf E_0 führt. Der hierbei erhaltene TIMF-Wert ist so die gesuchte SIRPA-Amplitude D_{SIRPA} für E^0. Die vierte Zeile zeigt nochmals zur Kontrolle, daß bei $E'_1 = E_1 + (\Delta E)_2$ tatsächlich die Zahlen der ersten Zeile reproduziert werden. Die geringe Abweichung im Realteil der Tabelle 2 läßt nach einem weiteren Iterationsschritt eine (äußerst) kleine Verbesserung erwarten.

	Energie Re	Energie Im	Exakte Amplitude $\mathrm{Re}_\times 10^{-2}$	Exakte Amplitude Im	TIMF $\mathrm{Re}_\times 10^{-2}$	TIMF Im
E_0	6.2500	1.8000	0.4988	-0.3076	0.4145	-0.3041
E'	6.2391	1.8127	0.4107	-0.3067	0.3295	-0.3033
E_1	6.2609	1.7873	0.5877	-0.3084	0.5002	-0.3050
E_1'	6.2499	1.8000	0.4985	-0.3076	0.4141	-0.3041
			$\mathrm{Re}_\times 10^{-2}$	Im		
E=E_0		D_{Exakt}	0.4988	-0.3076		
		D'_{SIRPA}	0.4995	-0.3049		
		D_{SIRPA}	0.5002	-0.3050		
		D_{TIMF}	0.4145	-0.3041	relat. Fehler:	
		D_{Min}	0.5002	-0.3050	Re	Im
		$D_{TIMF} - D_{Exakt}$	-0.0844	0.0034	19.79%	1.11%
		$D_{SIRPA} - D_{Exakt}$	0.0014	0.0026	0.28%	0.85%
			Re	Im		
$D =$ D_{SIRPA}		E_{Min}	6.2539	1.8361		
		E_{SIRPA}	6.2499	1.8000		
		E_{TIMF}	6.2609	1.7873		
		$E_{TIMF} - E_{Min}$	0.0070	-0.0487		
		$E_{SIRPA} - E_{Min}$	-0.0040	-0.0360		

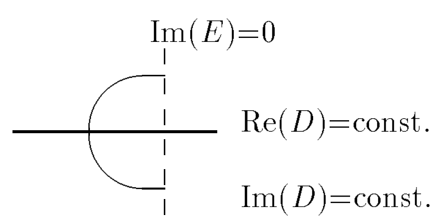
Tabelle 2: Die Resultate einer SIRPA-Rechnung bei $\lambda = 1$, Boost $= 2.5$ und $\mathrm{Im}\,(E) = 1.8$

	Energie Re	Energie Im	Exakte Amplitude Re	Exakte Amplitude Im	TIMF Re	TIMF Im
E_0	6.2500	0.8000	0.01732	-0.3967	0.01580	-0.3896
E'	6.2374	0.8152	0.01567	-0.3953	0.01424	-0.3882
E_1	6.2626	0.7849	0.01899	-0.3981	0.01739	-0.3909
E_1'	6.2499	0.8000	0.01732	-0.3967	0.01580	-0.3896
			Re	Im		
E=E_0		D_{Exakt}	0.01732	-0.3967		
		D'_{SIRPA}	0.01736	-0.3910		
		D_{SIRPA}	0.01739	-0.3909		
		D_{TIMF}	0.01580	-0.3896	relat. Fehler:	
		D_{Min}	0.01739	-0.3909	Re	Im
		$D_{TIMF} - D_{Exakt}$	-0.00152	0.0071	9.17%	1.78%
		$D_{SIRPA} - D_{Exakt}$	0.00005	0.0056	0.29%	1.41%
			Re	Im		
$D =$ D_{SIRPA}		E_{Min}	6.2596	0.8517		
		E_{SIRPA}	6.2499	0.8000		
		E_{TIMF}	6.2626	0.7849		
		$E_{TIMF} - E_{Min}$	0.0030	-0.0669		
		$E_{SIRPA} - E_{Min}$	-0.0097	-0.0517		

Tabelle 3: Die Resultate einer SIRPA-Rechnung bei $\lambda = 1$, Boost $= 2.5$ und $\mathrm{Im}(E) = 0.8$

Im weiteren Teil der Tabellen 2 und 3 werden die so erhaltenen Ergebnisse zusammengefaßt. Die Zahlen D_{Exakt}, D_{SIRPA} und D_{TIMF}, bzw. die Abweichung der beiden letzteren vom exakten Wert, sind in den folgenden Abbildungen gegen verschiedene Parameterwerte abgetragen. Für den dargestellten Fall beträgt der TIMF-Fehler im Realteil relativ zur exakten Amplitude 19.79%(9.17%) und für den Imaginärteil 1.11%(1.79%). Die SIRPA reduziert diesen Fehler auf 0.28%(0.29%) bzw. 0.85%(1.41%), eine vor allem im Realteil wesentliche Verbesserung.

Die verbleibenden Zeilen der Tabellen 2 und 3 sind von einem anderen Blickwinkel bestimmt. Wenn man das durchgeführte Verfahren als homogene, nicht-hermitische Hartree-Fock Näherung auffaßt, kann man für festgehaltenes $D = D_{SIRPA}$ die Hartree-Fock(=TIMF)-Energie E_{TIMF} mit der SIRPA-Energie E_{SIRPA} und einer exakten dazugehörigen diskreten Eigenenergie E_D von $\mathcal{H}'$ vergleichen. Wie bereits im Kapitel über die inhomogene RPA diskutiert, muß eine solche für große Amplituden, d.h. kleines Λ in $\mathcal{H}'$, nicht existieren, wenn man von Eigenwerten absieht, die evtl. bei negativen Energien aus $\mathcal{H}$-Bindungszuständen hervorgehen, aber weit vom Ausgangspunkt E_0 entfernt liegen. Zu der von einer TIMF-Rechnung vorgegebenen Amplitude D braucht also keine Energie $E(D)$ zu korrespondieren, bei welcher der Wert D als in Real- und Imaginärteil exakte Amplitude $D = < \chi' \,|\, (E(D) - \mathcal{H})^{-1} \,|\, \chi >$ erscheint. Dies wird in den Abb. 4.13 und 4.14 gezeigt. Dargestellt ist darin, analog zu Abb.4.7 und 4.8, die von $D(E)$ $= < \chi' \,|\, (E - \mathcal{H})^{-1} \,|\, \chi >$ über der E-Ebene aufgespannte Landschaft bei festen χ, χ'. Die Konturlinien geben einen Eindruck vom Verlauf der Kurven konstanten Real- bzw. Imaginärteils der Amplitude. Nur wenn diese Linien einen Schnittpunkt in der E-Ebene aufweisen, dann existiert ein $E(D)$, nämlich jener Schnittpunkt, an dem der vorgegebene Wert D der zu E korrespondierenden exakten Amplitude entspricht. Oder anders gesagt: Es gibt neben den ursprünglichen $\mathcal{H}$–Bindungszuständen einen weiteren diskreten Eigenwert $E(D)$ von $\mathcal{H}'(D)$. Für positive Energien ist dies bei betragsmäßig großen D ab einer bestimmten Schwelle nicht mehr der Fall, wie man auch dem Bild entnimmt. Aufgrund der Kleinheit der Amplitudenverschiebung durch die SIRPA besitzen die Linien im gegebenen Fall jedoch einen Schnittpunkt, wie der schematische den Abb.4.13, 4.14 entnommene Verlauf der Linien konstanten Real- und Imaginärteils der exakten Amplitude zeigt:



Aufgrund der angesprochenen Tatsachen wird ausgehend von D_{TIMF} durch ein Gradientenverfahren eine Energie E_{Min} gesucht, bei der die exakte Amplitude D_{Min} möglichst genau mit der durch die TIMF vorgegeben Amplitude übereinstimmt. Die Energie E_{Min} an diesem Punkt wird als exakte Eigenenergie betrachtet, da die exakte Amplitude D_{Min} bei den vorliegenden Berechnungen nur innerhalb der numerischen Toleranz von der durch die TIMF vorgegebenen abwich. Die letzten drei Zeilen der Tabellen 2 und 3 geben die drei Energiewerte E_{TIMF}, E_{SIRPA} und E_{Min} an. Man sieht, daß die SIRPA für den Imaginärteil E_{Min} und E_{TIMF} interpoliert. In Tabelle 2 liegt sie auch für den Realteil näher an E_{Min}, in Tabelle 3 ist jedoch ein Fall zu sehen, bei dem E_{SIRPA} weiter entfernt liegt. Dies beeinflußt jedoch nicht die Qualität der SIRPA-Näherung für die Amplitude.

Die den Bindungszustand des separablen Potentials anzeigende Polstelle der Resolvente (bei festem Boost k) ist in den Abb.4.15, 4.16 nochmals separat gezeigt, da sie in den Abb.4.13, 4.14 wegen des Maßstabs nicht sichtbar ist.

Nach diesen Erläuterungen können nun die Resultate der numerischen Rechnung graphisch vorgestellt werden: In den Abbildungen 4.17, 4.18 sind die Amplitudenwerte für variablen Realteil der Energie bei konstanten $\mathrm{Im}(E)$ gezeichnet. Über den ganzen dargestellten Parameterbereich ist der Gewinn der SIRPA gegenüber der TIMF gut zu sehen; im Realteil stimmt die SIRPA-Amplitude weitgehend mit der exakten Lösung überein und auch für den Imaginärteil ist die Verbesserung klar zu erkennen.

In den Abbildungen 4.19, 4.20 sind die Kurven über einen größeren Energiebereich fortgesetzt. Man erkennt, daß die TIMF den Verlauf der exakten Amplitude gut widerspiegelt. Die Verbesserung durch die SIRPA ist darin schlecht zu erkennen, da bei dem großen $\mathrm{Re}(E)$-Intervall die Variation der Amplitude groß ist im Vergleich zu dem Fehler der Näherungen. Der Gewinn durch die SIRPA im Vergleich zur TIMF-Näherung wird deutlicher in den Abbildungen 4.21 und 4.22. In Abbildung 4.21 ist die Abweichung der TIMF- und SIRPA-Resultate von D_{Exakt} gezeigt. Man sieht, daß diese für die SIRPA-Ergebnisse fast überall näher bei Null liegen als die TIMF-Ergebnisse. Es gibt allerdings, jeweils einmal im Real- sowie versetzt davon auch im Imaginärteil, einen zufälligen Kreuzungspunkt des TIMF-Graphs mit der Nullinie. In der jeweiligen unmittelbaren Umgebung dieses Kreuzungspunktes kann die SIRPA nicht besser sein als die TIMF. Es sei jedoch betont, daß die Abweichung der SIRPA von der TIMF dort gering ist, und erstere bereits kurz danach wieder besser liegt. Beim Realteil liegt der zufällige Kreuzungspunkt in der Region, wo die Kurven in 4.19 ihr Maximum haben. Es soll noch erwähnt werden, daß dieser Bereich kleiner Energie nicht sehr interessant ist. Zum einem wird die TIMF–Approximation der exakten Amplitude wegen des relativ zu $\mathrm{Re}(E)$ gesehen größeren $\mathrm{Im}(E)$ dort besser. Zum anderen überlappen die um $\pm k$ geboosteten Einteilchenwellenpakete χ_1, χ_2 immer mehr, so daß die Norm der antisymmetrischen Kombination der beiden Orbitale gegen Null geht, und sie als Modell einer Kanalwellenfunktion ungeeignet werden läßt.

Eine Anmerkung sei noch gemacht zu der Tatsache, daß trotz der verhältnismäßig geringen Energiekorrektur und teils flachen Amplitudenkurven eine spürbare Verbesserung durch die SIRPA erreicht werden kann. Dies liegt wesentlich an dem, trotz verschiedener bei der Iteration vorkommender Energien, konstant gehaltenen Boost. Denn da die TIMF-Amplitude bei nicht mitgeführtem Boost stärker variiert als bei mitgeführtem, kann eine geringe Energieverschiebung auf der stärker geneigten D-Fläche (vgl. Abb. 4.7, 4.8) bereits den dargestellten Effekt haben.

In Abbildung 4.22 werden, wie bereits bei Tabelle 2 und 3 erläutert, bei festgehaltener Diagonalamplitude die dazugehörigen Energien E_{TIMF}, E_{SIRPA} und E_{Min} verglichen. Auch hier sieht man, daß die SIRPA eine klare Verbesserung erreicht, besonders in dem Bereich nicht zu kleiner Energien. Der Schnittpunkt der TIMF-Kurve des Realteils mit der Nullinie fällt zudem mit dem Schnittpunkt der SIRPA-Kurve zusammen, so daß hier selbst im Kreuzungsbereich die SIRPA nicht gegenüber TIMF abfällt.

Damit wäre bereits gezeigt, daß die SIRPA als Methode zum Invertieren im Fockraum gegenüber der TIMF Verbesserungen bringt. Bei dem vorliegenden Fall einer Invertierung von $\mathcal{G}$ ist jedoch auch der On-Shell-Limes interessant. Es soll nun dargelegt werden, daß, obwohl dies in dem vorliegenden Fall für die TIMF untypischerweise nicht ganz problemlos ist, der Grenzübergang auch für die SIRPA durchgeführt werden kann und eine Verbesserung gegenüber der TIMF erbringt. Im Allgemeinen sind zwei Fälle vorstellbar:

1. Die Energiekorrektur durch die SIRPA führt relativ zur TIMF näher an die reelle Energie–Achse. Dann muß die TIMF bei dem Wert abgebrochen werden an dem die SIRPA-Energie on-shell liegt.

2. Schwieriger ist es, wenn die Energiekorrektur relativ zur TIMF weiter off-shell weist. Dann könnte man versuchen, die retardierten Lösungen der TIMF durch die reelle Achse hindurch soweit fortzusetzen bis die SIRPA-Energie auf dieser liegt, ohne daß man dabei zu avancierten Lösungen gelangt.

Ob der letztere Weg gangbar ist kann hier wegen der bei 2 Teilchen durch den Schwerpunktsterm bedingten On-Shell-Konvergenzprobleme der TIMF nicht entschieden werden, aber es bietet sich noch eine einfachere Möglichkeit an, die zudem in beiden genannten Fällen anwendbar ist: Man extrapoliert den Verlauf der Amplituden bis zur reellen Achse. Dieser Weg wurde in vorliegendem Fall beschritten und erwies sich als durchführbar. Die Amplitudenverläufe werden dafür nach einem Least-Square-Verfahren durch ein Polynom bzw. eine rationale (Padé-)Approximante der Form

$$f(x) = \frac{\sum_{i=0}^{n} a_i x^i}{1 + cx}, \tag{4.69}$$

mit zu bestimmenden Koeffizienten a_i und gegebenenfalls c, genähert und damit bis nach $\mathrm{Im}(E)$=0 fortgesetzt. Dabei wird der Polynom- bzw. Zählergrad n soweit erhöht, bis alle vorhandenen Punkte gut approximiert werden und der On-Shell-Wert sich stabilisiert. Dies war möglich bevor durch numerische

Fehler bedingte Überschwingerscheinungen einsetzten,wie es bei Approximationen mit zu hohem n geschieht. In den Abb.4.23 und 4.24 ist dies an einem Beispiel für eine rationale Approximante dargestellt. Die eingezeichneten Punkte sind die Fitpunkte, während die Linien die Approximanten darstellen und zum Vergleich noch der Verlauf der exakten Amplitude eingezeichnet ist, die aber genau auf ihrer gefitteten Geraden liegt. Wegen der im Verhältnis zu den Abweichungen großen Gesamtvariation der Kurvenzüge in den Abb. 4.23 und 4.24 ist in den Abb.4.25, 4.26 der Ausschnitt nahe der reellen Achse nochmals gezeichnet. Die Abb.4.27 und 4.28 zeigen wie die Abb.4.21 bzw. 4.22 die Abweichungen von den exakten Werten. Hier ist ebenfalls zu sehen, daß die SIRPA-Lösung auch dort bzgl. der Amplitude eine Verbesserung bringt, wo die TIMF-Energie die Nullinie kreuzt. Der leichte nur beim Realteil der Abweichung sichtbare Knick an der Stelle Im$(E)\approx 2.5$ gibt einen Eindruck von der Größe des numerischen TIMF-Rechenfehlers. Dort wurde ein neuer TIMF-Durchgang gestartet mit leicht veränderten, an einen kleinen Imaginärteil von E angepaßten Iterationsparametern. Läßt man die letzten TIMF- und SIRPA-Datenpunkte bei der On-Shell-Approximation weg, an denen die TIMF-Konvergenz besonders schwierig zu ereichen ist, so wird diese, wie hier aber nicht gezeigt, nicht spürbar verändert. Die Kurven bei anderen Boostwerten verliefen qualititiv genauso.

Der On-Shell-Grenzübergang kann also sowohl für die TIMF als auch die SIRPA vollzogen werden, wobei auch hierbei das SIRPA-Verfahren eine Verbesserung gegenüber der reinen Mean–Field–Rechnung erbringt. Damit kann die SIRPA auch für eine auf der TIMF aufbauende, mikroskopische und nichtstörungstheoretische Beschreibung von quantenmechanischen Streuprozessen benutzt werden. Der zusätzliche Aufwand durch den Einbau von Teilchen–Loch–Korrelationen ist im Vergleich zur TIMF–Rechnung selbst verhältnismäßig gering. Neben der Berechnung der im vorliegenden Falle nur 8–dimensionalen SIRPA–Eigenwertgleichungen benötigt man nur noch zwei TIMF–Resultate zu eng benachbarten Energien. Das zweite TIMF-Resultat läßt sich dabei aus dem ersten relativ leicht gewinnen, da nicht nochmals der ganze Weg durch die komplexe Energieebene, beginnend bei großem Imaginärteil der Energie, zurückgelegt werden muß.

4.6 Zusammenfassung der Ergebnisse für das lösbare Modell

Die numerischen Ergebnisse bei dem ausgewählten lösbaren Modell erwiesen sich als durchaus positiv für das SIRPA-Verfahren. Die wichtigsten Punkte seien nochmals aufgelistet:

1. Das SIRPA-Verfahren ist mit vertretbarem Aufwand durchführbar und verbessert die TIMF–Resultate.

2. Während die TIMF-Näherung meistens für die größere der beiden Zah-

len, Real- bzw. Imaginärteil der Amplitude, einen kleineren relativen Fehler aufweist, korrigiert die SIRPA dieses Mißverhältnis. In dem Modell ist die SIRPA-Näherung demzufolge für den Realteil der Amplitude besonders gut, aber auch im Imaginärteil zeigt sich eine Verbesserung.

3. Der On-Shell-Limes $\mathrm{Im}(E) \to 0$ ist auch für die SIRPA durchführbar.

4. Das SIRPA-Verfahren liefert durch das Auftreten großer Sprünge in ΔE einen Indikator für das Auftreten von numerischen Problemen beim TIMF-Verfahren.

5. Die Auswahl der SIRPA-Eigenwerte für die Energiekorrektur erwies sich als nicht schwierig. Insbesondere hatten die TDA-Eigenwerte im interessanten Parameterbereich stets einen negativen Imaginärteil, welcher demzufolge ein ausreichendes Auswahlkriterium für die SIRPA-Eigenwerte darstellte.

6. Die SIRPA-Iteration erreichte stets nach nur zwei Schritten die vorgegebene Energie. Dies ist numerisch eine wichtige Eigenschaft, da bei vielen notwendigen Iterationen der Berechnungsaufwand enorm steigen würde.

7. Es genügte die Mitnahme der beiden aus χ_1, χ_2 durch Biorthogonalisieren mit φ'_1, φ'_2 gewonnenen Teilchenorbitale. Da der Aufwand für das Invertieren einer $n \times n$-Matrix proportional zu n^3 wächst, wird dadurch das SIRPA-Verfahren wesentlich erleichtert.

Zusammenfassend kann man diese erste Anwendung einer SIRPA–Rechnung als erfolgreich betrachten. Sie zeigt, daß die zugrundeliegende Idee einer auf TIMF aufbauenden Näherungsmethode auch numerisch umgesetzt werden kann.

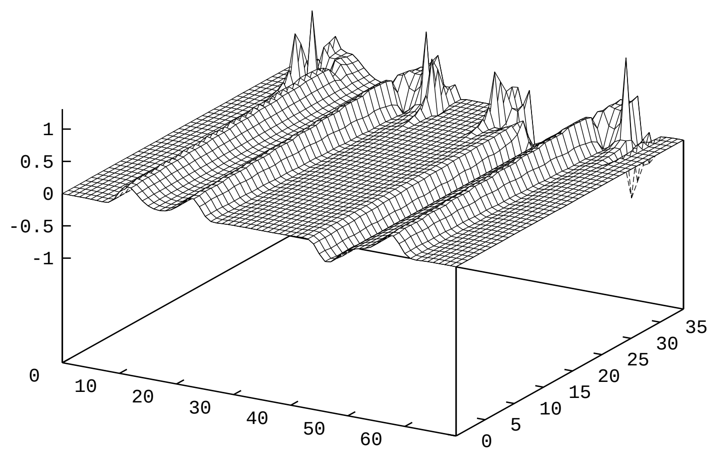


Abbildung 4.1: Der Realteil der geraden φ_1–Orbitale (Punkte 0 bis 34) und ungeraden φ_2–Orbitale (Punkte 35 bis 70) auf dem 1–dimensionalen Gitter im Verlaufe der Iteration, bei Re(E)=6.25, Im(E)=0.1, $\lambda = 1.0$

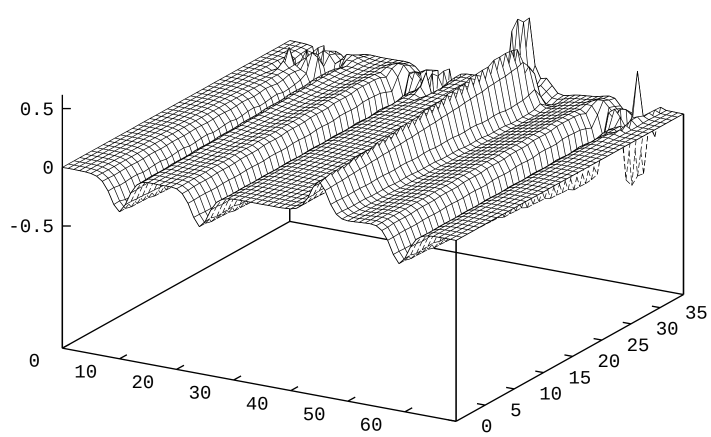


Abbildung 4.2: Der Imaginärteil der geraden φ_1–Orbitale (Punkte 0 bis 34) und ungeraden φ_2–Orbitale (Punkte 35 bis 70) auf dem 1–dimensionalen Gitter im Verlaufe der Iteration, bei Re(E)=6.25, Im(E)=0.1, $\lambda = 1.0$

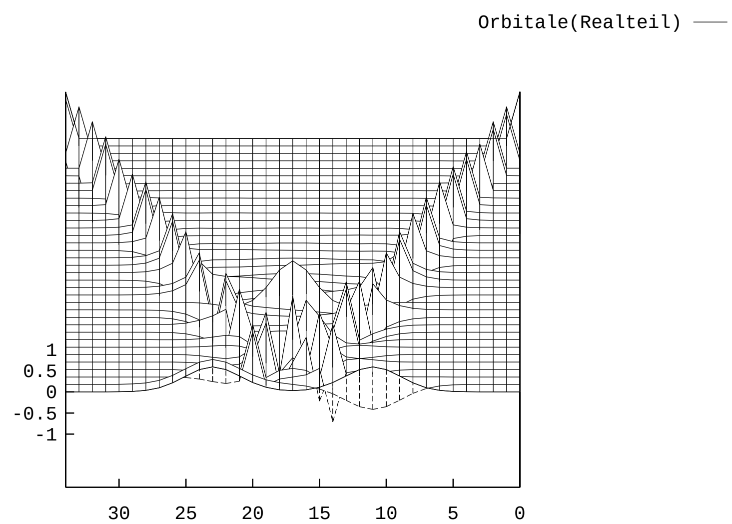


Abbildung 4.3: Der Realteil der IRPA-Orbitale φ_i und φ_n, für Re(E)=6.25, Im(E)=5.0 und $\lambda = 1.0$

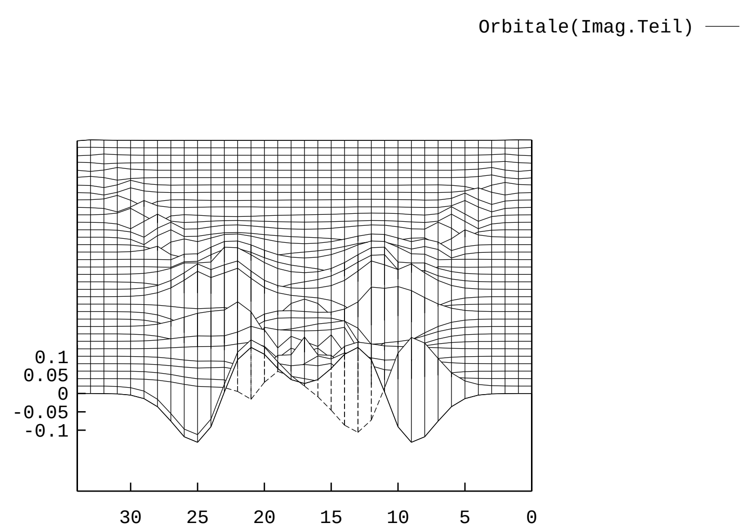


Abbildung 4.4: Der Imaginärteil der IRPA-Orbitale φ_i und φ_n, für Re(E)=6.25, Im(E)=5.0 und $\lambda = 1.0$

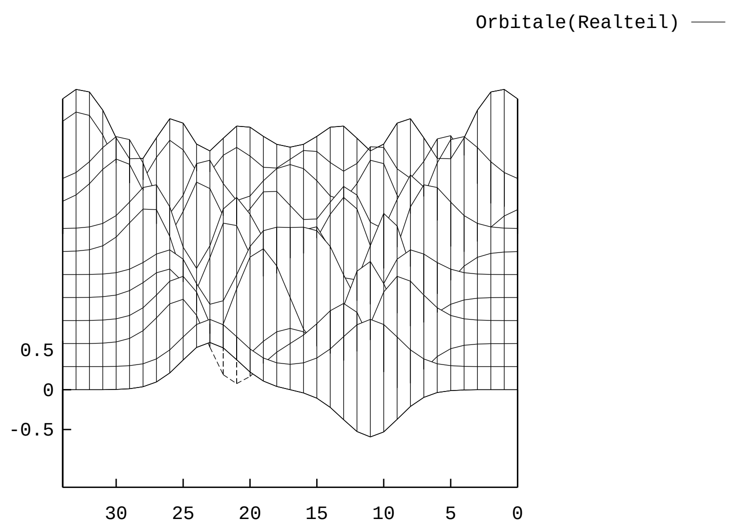


Abbildung 4.5: Der Realteil der quadratintegrablen SIRPA-Orbitale φ_1, φ_2 und acht weiterer φ_n, für Re(E)=6.25, Im(E)=5.0 und $\lambda = 1.0$

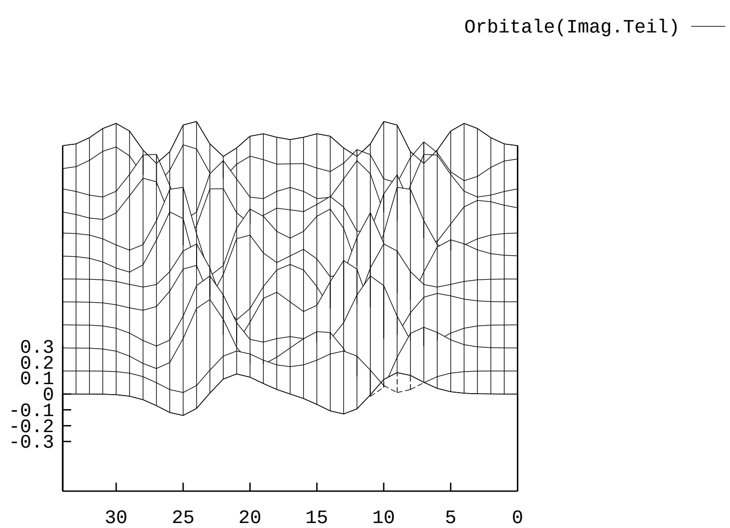


Abbildung 4.6: Der Imaginärteil der quadratintegrablen SIRPA-Orbitale φ_1, φ_2 und acht weiterer φ_n, für Re(E)=6.25, Im(E)=5.0 und $\lambda = 1.0$

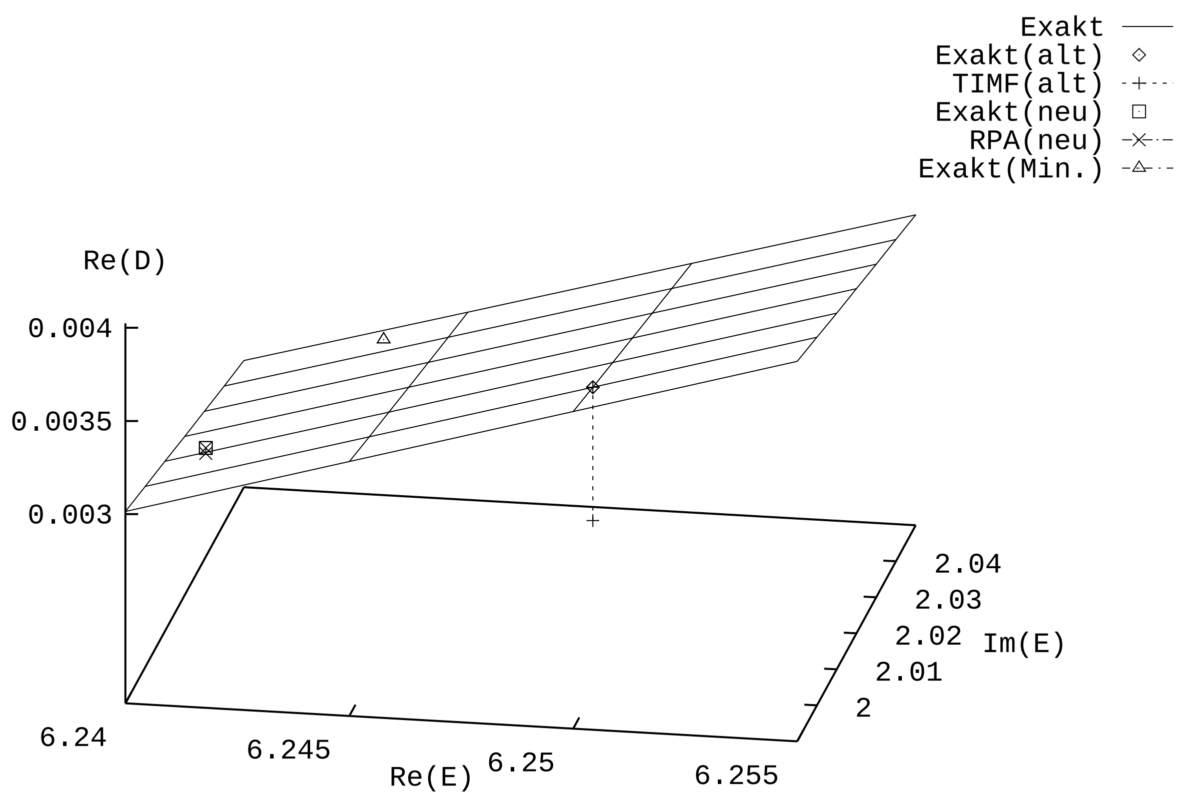


Abbildung 4.7: Zur Veranschaulichung des SIRPA-Verfahrens: Der Realteil der Amplituden D vs. Re(E) und Im(E), bei konstantem Boost $k = 2.5$ und $\lambda = 1.0$

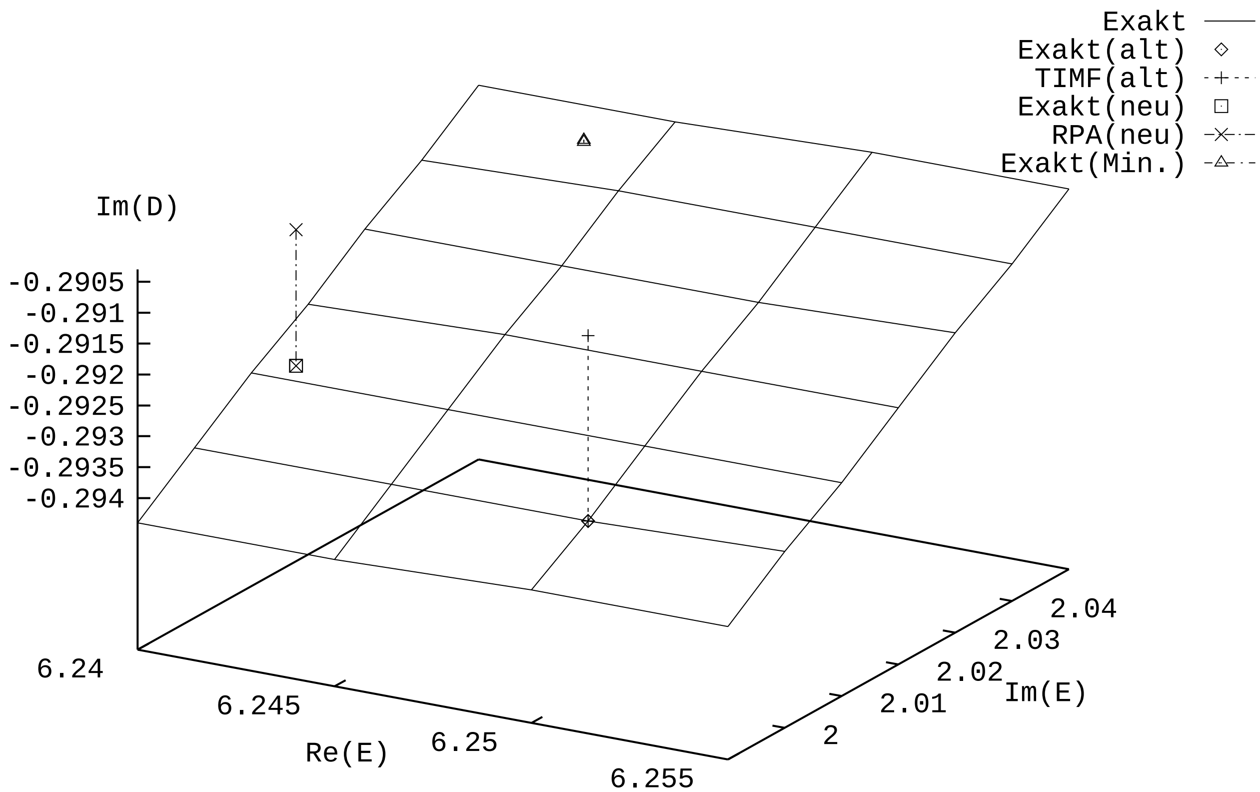


Abbildung 4.8: Zur Veranschaulichung des SIRPA-Verfahrens: Der Imaginärteil der Amplituden D vs. Re(E) und Im(E), bei konstantem Boost $k = 2.5$ und $\lambda = 1.0$

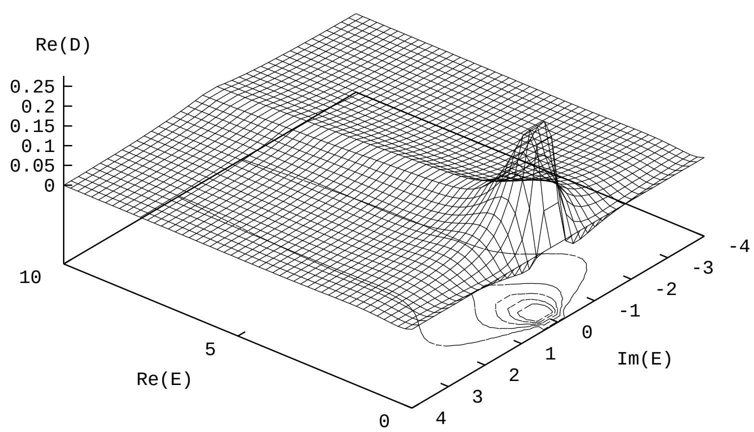


Abbildung 4.9: Der Realteil der exakten Amplitude $D_{exakt} = <\chi' \,|\, (E-\mathcal{H})^{-1} \,|\, \chi>$ vs. Re(E) und Im(E), bei $\lambda = 1.0$ und mitgeführtem Boost $k = \sqrt{\mathrm{Re}(E)}$

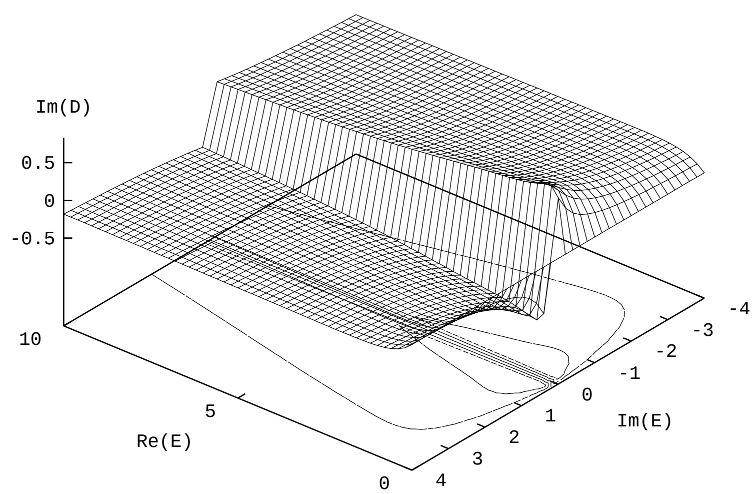


Abbildung 4.10: Der Imaginärteil der exakten Amplitude $D_{exakt} = <\chi' \,|\, (E-\mathcal{H})^{-1} \,|\, \chi>$ vs. Re(E) und Im(E), bei $\lambda = 1.0$ und mitgeführtem Boost $k = \sqrt{\mathrm{Re}(E)}$

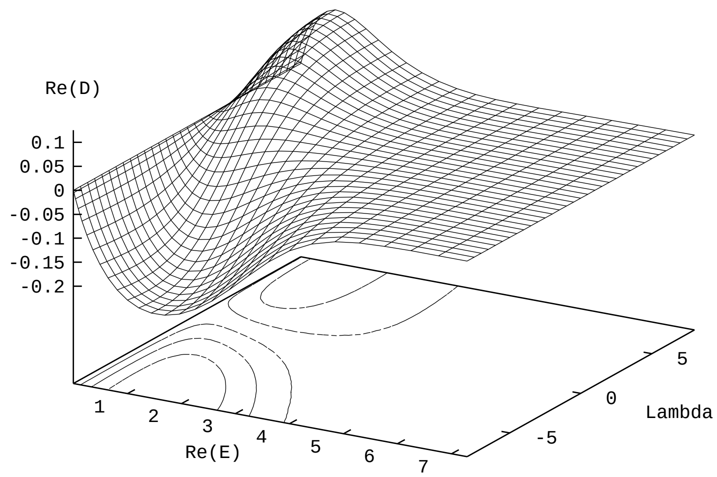


Abbildung 4.11: Der Realteil der exakten Amplitude $D_{exakt} = <\chi' \,|\, (E-\mathcal{H})^{-1} \,|\, \chi>$ vs. Re(E) und λ, bei Im$(E) = 2.0$ und mitgeführtem Boost $k = \sqrt{\mathrm{Re}(E)}$

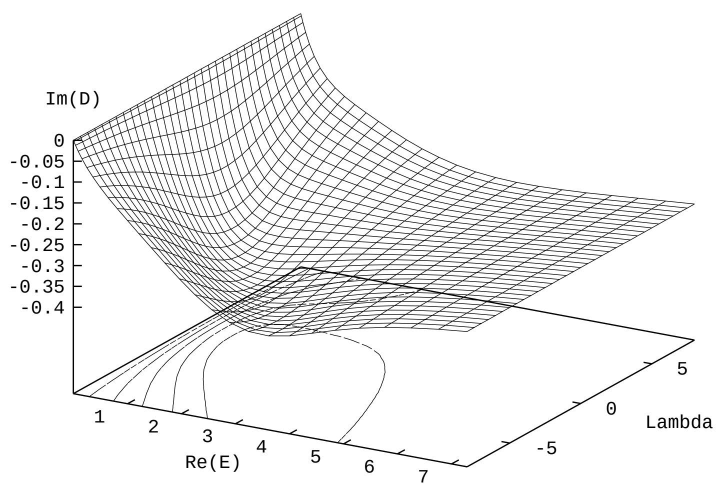


Abbildung 4.12: Der Imaginärteil der exakten Amplitude $D_{exakt} = <\chi' \,|\, (E-\mathcal{H})^{-1} \,|\, \chi>$ vs. Re(E) und λ, bei Im$(E) = 2.0$ und mitgeführtem Boost $k = \sqrt{\mathrm{Re}(E)}$

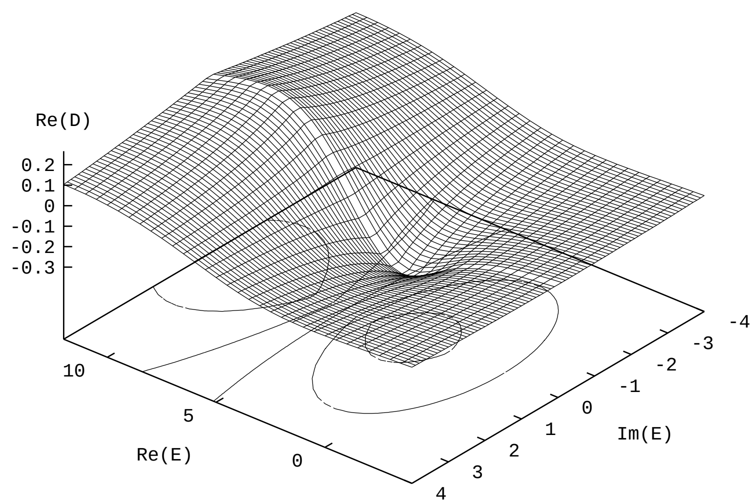


Abbildung 4.13: Der Realteil der exakten Amplitude $D_{exakt} = <\chi' \,|\, (E-\mathcal{H})^{-1} \,|\, \chi>$ vs. $\mathrm{Re}(E)$ und $\mathrm{Im}(E)$, bei $\lambda = 1.0$ und konstantem Boost $k = 2.5 (= \sqrt{6.25})$

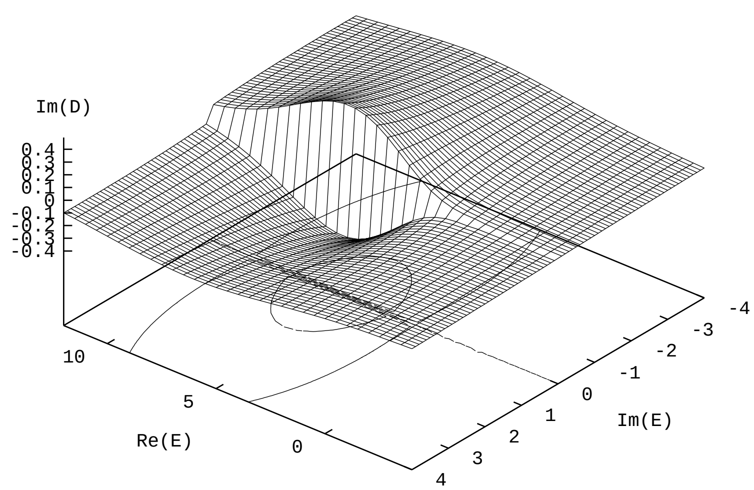


Abbildung 4.14: Der Imaginärteil der exakten Amplitude $D_{exakt} = <\chi' \,|\, (E-\mathcal{H})^{-1} \,|\, \chi>$ vs. $\mathrm{Re}(E)$ und $\mathrm{Im}(E)$, bei $\lambda = 1.0$ und konstantem Boost $k = 2.5 (= \sqrt{6.25})$

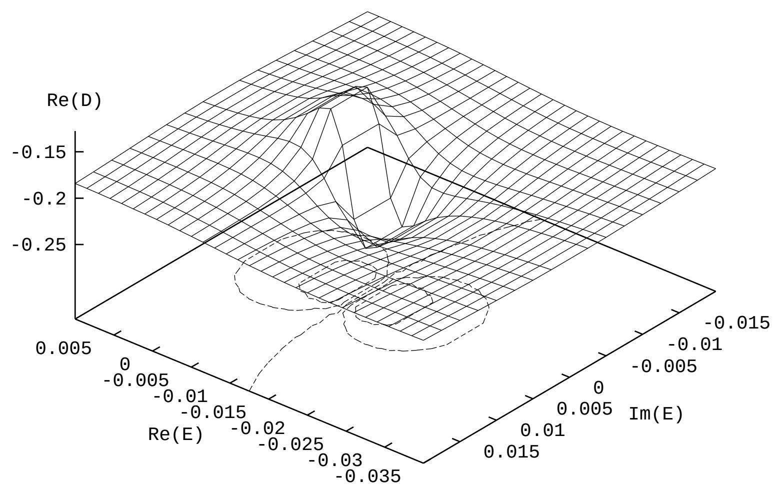


Abbildung 4.15: Ein Bindungszustand: Der Realteil der exakten Amplitude $D_{exakt} =< \chi' \,|\, (E-\mathcal{H})^{-1} \,|\, \chi >$ vs. Re(E) und Im(E), bei $\lambda = 1.0$ und konstantem Boost $k = 2.5$

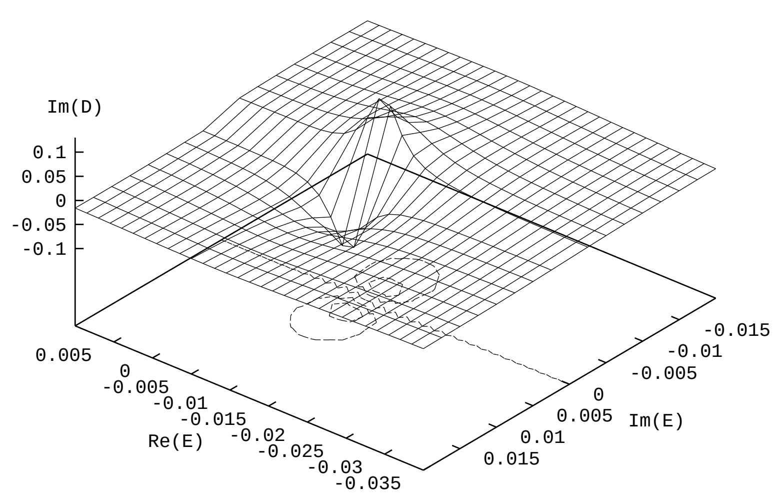


Abbildung 4.16: Ein Bindungszustand: Der Imaginärteil der exakten Amplitude $D_{exakt} =< \chi' \,|\, (E-\mathcal{H})^{-1} \,|\, \chi >$ vs. Re(E) und Im(E), bei $\lambda = 1.0$ und konstantem Boost $k = 2.5$

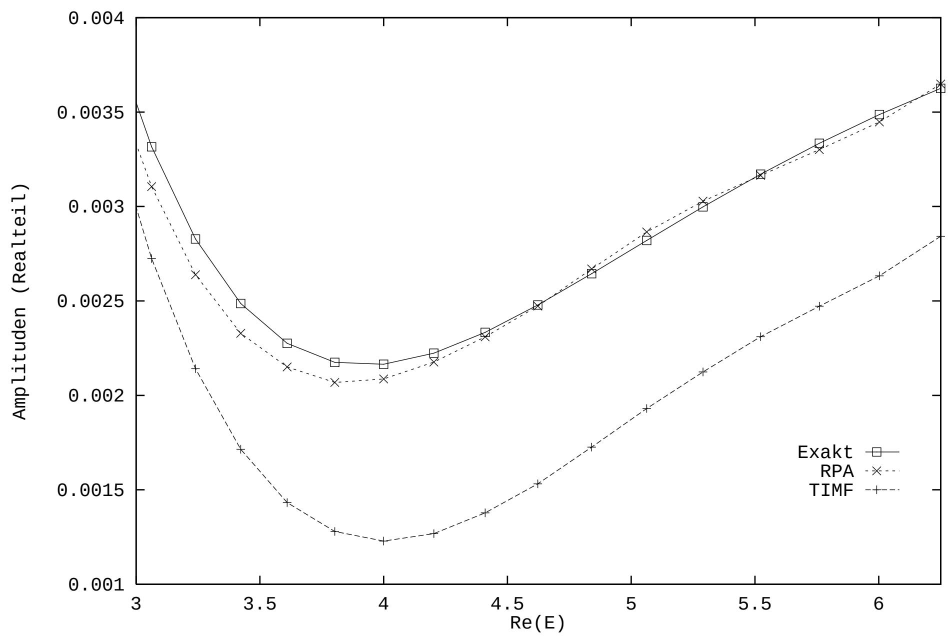


Abbildung 4.17: Der Realteil der exakten, TIMF- und SIRPA-Amplituden vs. Re(E), bei Im(E)=2.0 und $\lambda = 1.0$

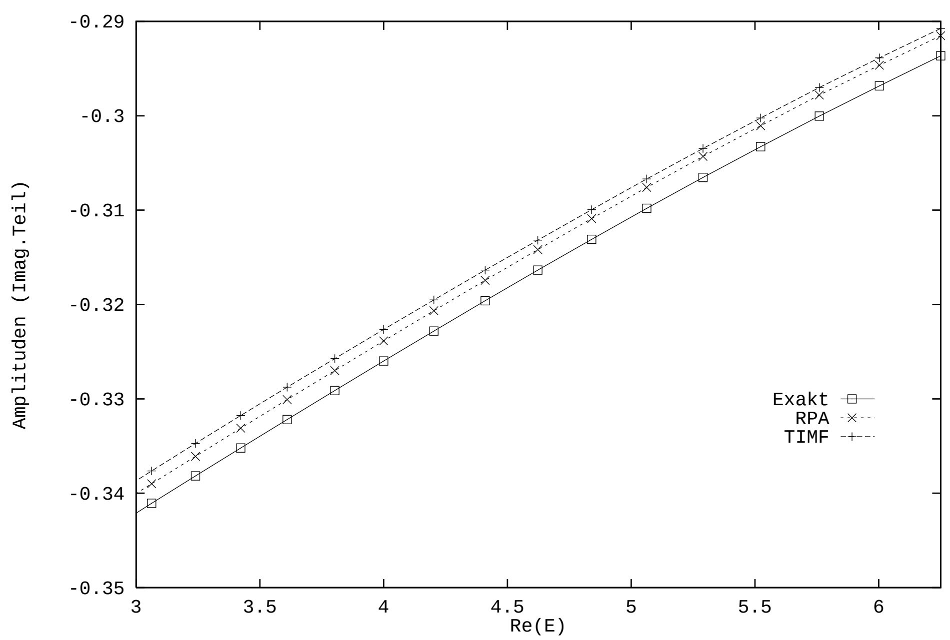


Abbildung 4.18: Der Imaginärteil der exakten, TIMF- und SIRPA-Amplituden vs. Re(E), bei Im(E)=2.0 und $\lambda = 1.0$

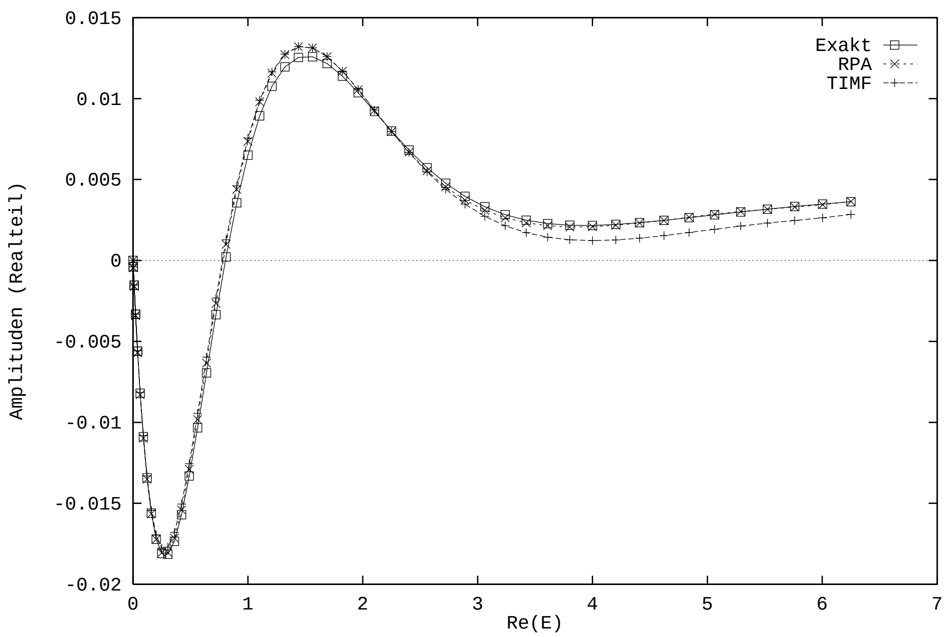


Abbildung 4.19: Der Realteil der exakten, TIMF- und SIRPA-Amplituden vs. Re(E), bei Im(E)=2.0 und $\lambda = 1.0$

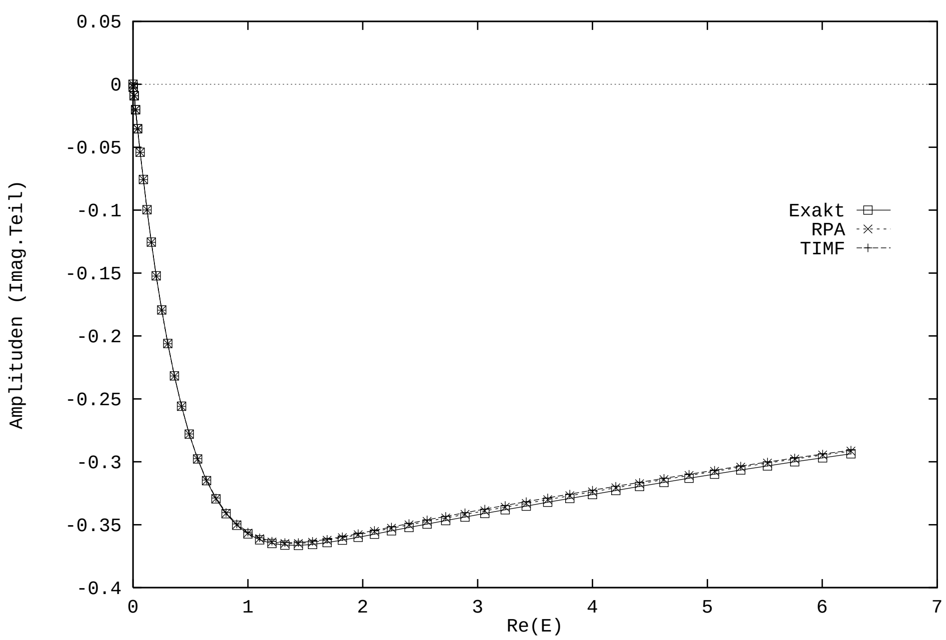


Abbildung 4.20: Der Imaginärteil der exakten, TIMF- und SIRPA-Amplituden vs. Re(E) bei Im(E)=2.0 und $\lambda = 1.0$

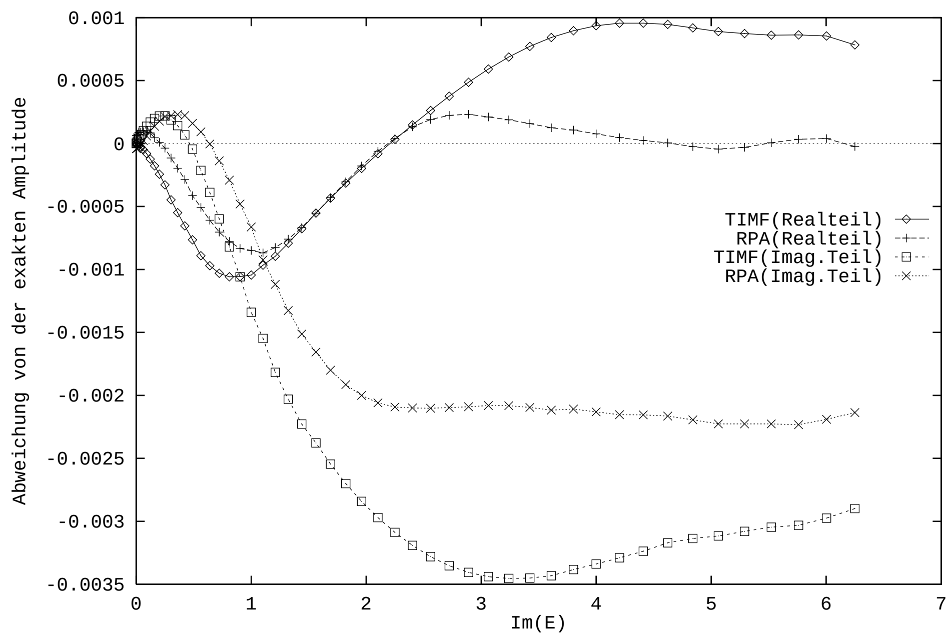


Abbildung 4.21: Die Abweichung der TIMF- und SIRPA-Amplituden von D_{Exakt} vs. Re(E), bei Im(E)=2.0 und $\lambda = 1.0$

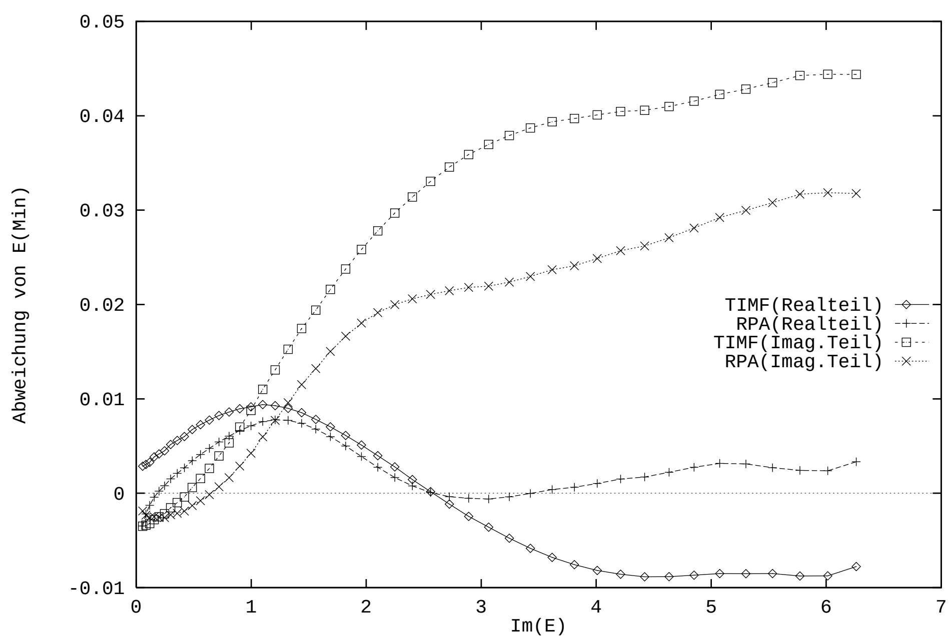


Abbildung 4.22: Die Abweichung der TIMF- und SIRPA-Energien von E_{Min} vs. Re(E), bei Im(E)=2.0 und $\lambda = 1.0$

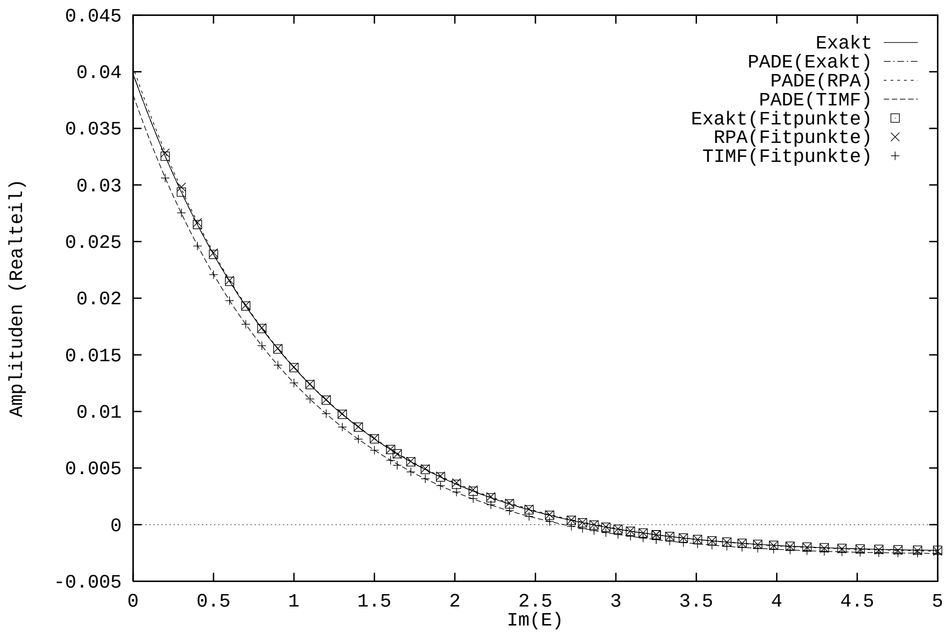


Abbildung 4.23: Die rationalen Approximanten von Re(D) mit $n = 7$, bei Re(E)=6.25 und $\lambda = 1.0$

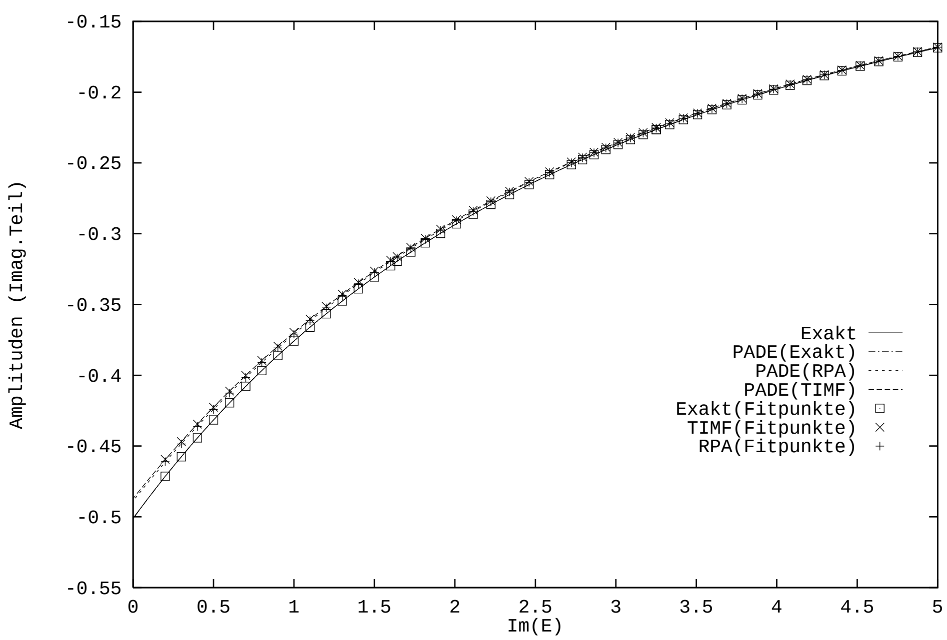


Abbildung 4.24: Die rationalen Approximanten von Im(D) mit $n = 7$, bei Re(E)=6.25 und $\lambda = 1.0$

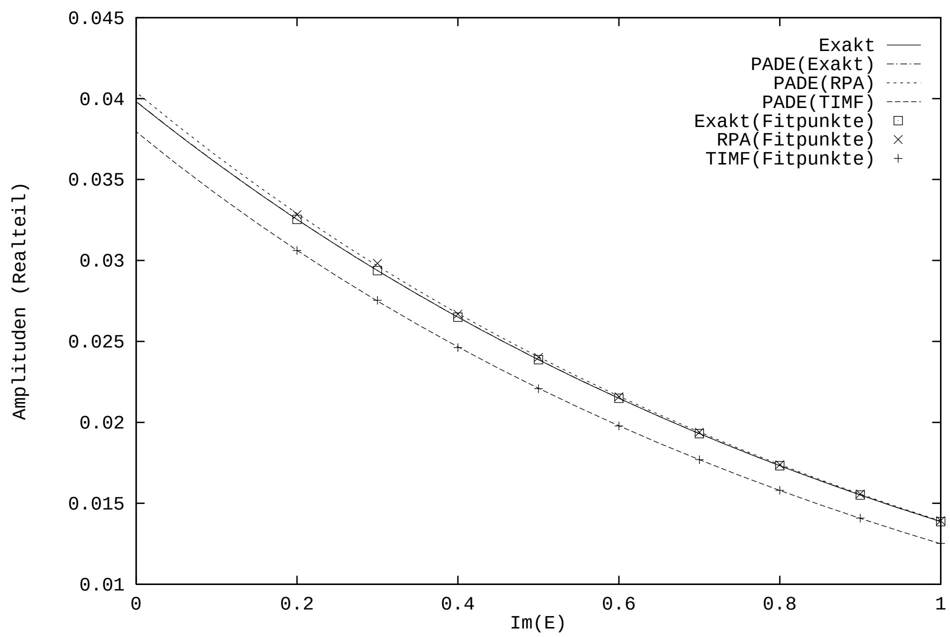


Abbildung 4.25: Die rationalen Approximanten von Re(D) mit $n = 7$, bei Re(E)=6.25 und $\lambda = 1.0$ (Ausschnitt)

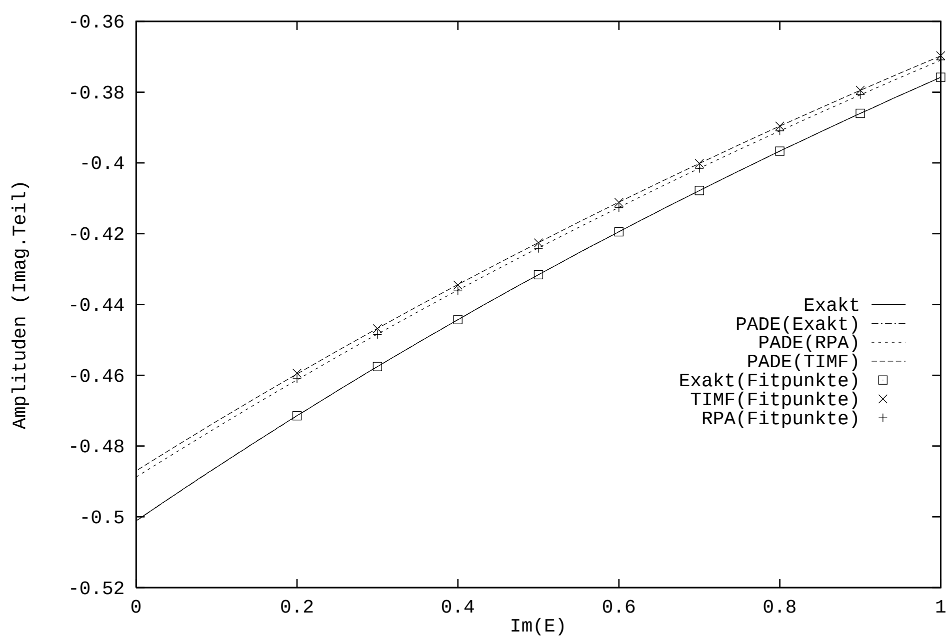


Abbildung 4.26: Die rationalen Approximanten von Im(D) mit $n = 7$, bei Re(E)=6.25 und $\lambda = 1.0$ (Ausschnitt)

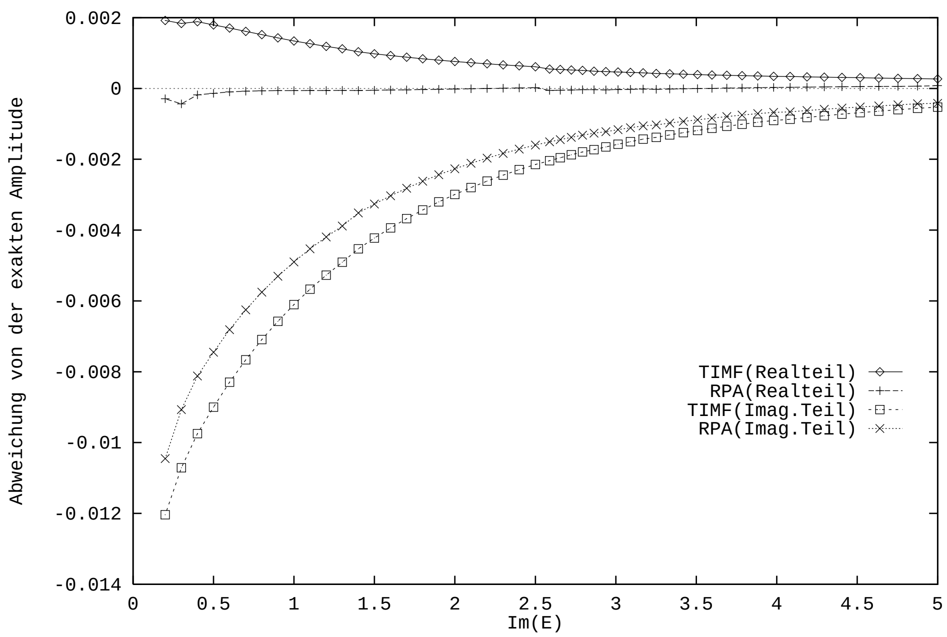


Abbildung 4.27: Die Abweichung der TIMF- und SIRPA-Amplituden von D_{Exakt} vs. Im(E), bei Re(E)=6.25 und $\lambda = 1.0$

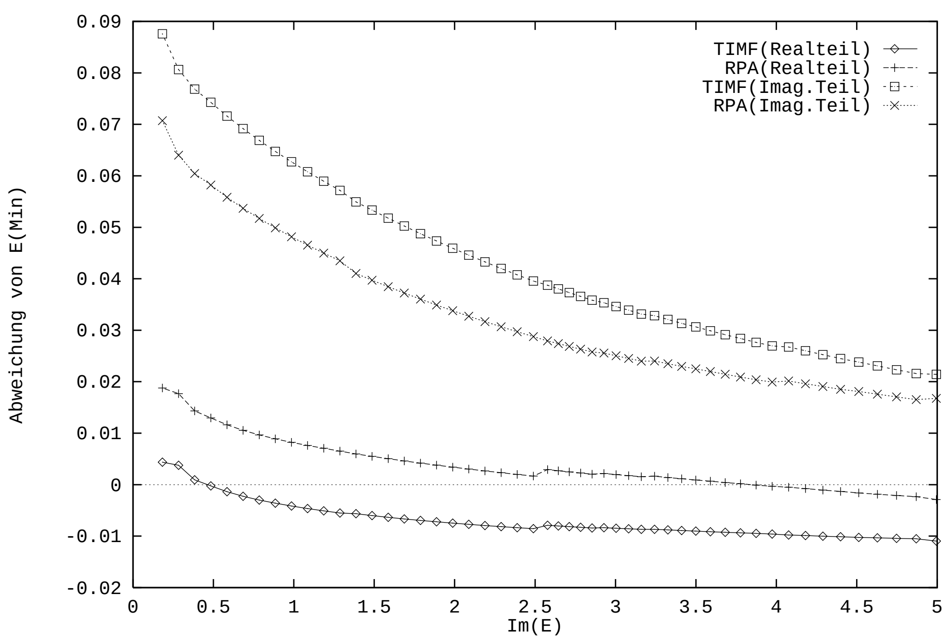


Abbildung 4.28: Die Abweichung der TIMF- und SIRPA-Energien von E_{Min} vs. Im(E), bei Re(E)=6.25 und $\lambda = 1.0$

Schlußbemerkung

In vorliegender Arbeit konnten erstmals Teilchen–Loch–Korrelationen in der zeitunabhängigen Mean–Field–Theorie (TIMF) mitberücksichtigt werden. Ausgehend von der antisymmetrisierten Fassung der TIMF wurde dazu unter Benutzung dreier „natürlicher“ Biorthogonalsysteme eine Formulierung der TIMF in zweiter Quantisierung entwickelt.

Dadurch, daß Matrixelemente eines Operatorinversen durch Rückführung auf ein Eigenwertproblem — mit anschließender Invertierung einer komplexwertigen Funktion — bestimmt werden können, gelang es Anschluß an bekannte homogene Methoden zu finden. Das führt, in Analogie zu der auf einer Hartree–Fock–Rechnung aufbauenden hermitischen RPA, auf eine nichthermitische RPA. Es konnte gezeigt werden, daß diese einer nichtunitären kanonischen Transformation entspricht, so daß Energiekorrekturen direkt den entsprechenden Eigenwerten entnommen werden können, ohne den komplizierten RPA-Zustand explizit ausrechnen zu müssen. Das bei der nichthermitischen RPA im Vergleich zum hermitischen Fall neu auftauchende Problem der Auswahl der für die Energiekorrektur relevanten Eigenwerte konnte gelöst werden. Die inhomogene RPA (IRPA) zur Berechnung eines Matrixelements $D(E)$ besteht dann aus der Inversion der durch nichthermitische RPA–Rechnungen erhaltenen $E(D)$–Beziehung.

Bei der numerischen Behandlung eines lösbaren Modells zeigte sich die Notwendigkeit, mit quadratintegrablen Teilchenorbitalen zu arbeiten. Dafür wurde die IRPA zur Square–Integrable Inhomogenous RPA (SIRPA) verallgemeinert. Der Test der SIRPA an dem ausgewählten Modell verlief erfolgreich. Sie erwies sich als numerisch durchführbar und verbesserte die TIMF–Ergebnisse. Es konnte an dem Modell gezeigt werden, daß auch der in der Streutheorie essentielle On–Shell–Limes $\mathrm{Im}(E) \to 0$ für die SIRPA durchgeführt werden kann. Damit kann die SIRPA auch für eine auf der TIMF aufbauende Beschreibung von Streuprozessen benutzt werden. Der zusätzliche Aufwand im Vergleich zur TIMF ist dabei verhältnismäßig gering. Die als Variationsverfahren nichtstörungstheoretische Methode der TIMF zur mikroskopischen Beschreibung quantenmechanischer Streuprozesse — die direkt Matrixelemente der Resolvente $\mathcal{G}$ oder des T–Operators liefert — kann daher um Teilchen–Loch–Korrelationen erweitert werden. Da die TIMF im Prinzip auf beliebige Streusituationen anwendbar ist, — also auch bei vielen offenen Kanälen und evtl. mehreren Fragmenten — gilt dasselbe für die SIRPA. Sie ist z.B. vom Ansatz her allgemeiner als die im Namen ähnliche

Kontinuums–RPA [67, 68, 69]. In dieser werden zu einem Schalenmodell eines Vielteilchenfragments zusätzliche Einteilchenorbitale aus dem Kontinuum in RPA–Näherung mit aufgenommen und damit im wesentlichen die Streuung eines einzelnen Teilchens an diesem Vielteilchenfragment behandelt.

Da weiterhin die TIMF ein allgemeines Variationsverfahren zur Bestimmung der Matrixelemente eines beliebigen Operatorinversen darstellt, ist auch eine Anwendung der SIRPA in einem anderen, nicht streutheoretischen Rahmen denkbar. So liefern beispielsweise die Polstellen von Matrixelementen der Resolvente $\mathcal{G} = (E - \mathcal{H})^{-1}$ die Bindungsenergien von $\mathcal{H}$.

Durch den Bezug inhomogener Gleichungen zu homogenen Problemen bietet es sich natürlich an, von Eigenwertproblemen bekannte, über die RPA hinausgehende Approximationen auf den nichthermitischen Fall zu verallgemeinern und so für inhomogene Gleichungen verfügbar zu machen. Neben Aufnahme von Teilchen–Teilchen–Korrelationen oder 2–Teilchen–2–Loch–Korrelationen [70] kann dabei auch an die von vornherein nichthermitische e^S–Theorie gedacht werden. Es eröffnen sich daher viele Wege, den in dieser Arbeit begonnenen Ansatz fortzuführen.

Anhang A

Der Kanalspinformalismus

Die Anfangs- und Endwechselwirkungen V, V' sind unter Nukleonenaustausch innerhalb der jeweiligen Fragmente symmetrisch, aber nicht bei Nukleonenaustausch zwischen den Fragmenten. Aufgrund dieses Fehlens einer totalen Permutationssymmetrie wurden in dem Kapitel über die antisymmetrisierte Fassung der TIMF entweder nur reine Produktwellenfunktionen, oder intrafragment-antisymmetrisierte Wellenfunktionen verwendet. In diesem Anhang soll gezeigt werden, daß ein äquivalenter Kanalspinformalismus erhalten werden kann, der nur mit total antisymmetrisierten, zweikomponentigen Kanalwellenfunktionen arbeitet. Um ein Nachschlagen zu ersparen, wird hier nochmals an die Notation erinnert: Reine Produkte von normalisierten Einteilchenorbitalen werden mit runden Klammern, wie $|\chi)$ oder $(\chi|$, gekennzeichnet. Geschwungene Klammern werden für Kanalwellenfunktionen verwendet, die normalisiert und innerhalb der Fragmente a, b bzw. c, d antisymmetrisiert sind:

$$|\chi\} = \sqrt{N_a!N_b!}\,\mathcal{A}_a\mathcal{A}_b|\chi), \tag{A.1}$$

$$\{\chi'| = \sqrt{N_c!N_d!}\,(\chi'|\mathcal{A}_c\mathcal{A}_d. \tag{A.2}$$

Eckige Klammern, wie in $|\,\Phi>$, sind reserviert für vollständig antisymmetrisierte Wellenfunktionen.

Eine Slaterdeterminante ist invariant unter linearen Transformationen l der Orbitale, wenn $\det l = 1$ ist. Diese Freiheit kann genutzt werden, um in der Theorie auftretende Kofaktormatrizen zu diagonalisieren und dadurch die Anzahl derjenigen Elemente, die berechnet werden müssen, drastisch zu reduzieren. Mit den nur teilweise antisymmetrisierten Kanalwellenfunktionen $|\chi\}$, $\{\chi'|$ ist es jedoch im allgemeinen nicht möglich, alle drei Überlappmatrizen $\alpha_{ij} =< \varphi'_i\,|\,\chi_j >$, $\alpha'_{ij} =< \chi'_i\,|\,\varphi_j >$, $\beta_{ij} =< \varphi'_i\,|\,\varphi_j >$ durch geeignete lineare Transformationen innerhalb der vier Gruppen von Orbitalen $\{\chi_i\}$, $\{\chi'_i\}$, $\{\varphi_i\}$, $\{\varphi'_i\}$ gleichzeitig zu diagonalisieren. Dies würde der Lösung folgenden Gleichungssystems für die Matrizen M, M' and B, B' entsprechen

$$M'\beta M = d_\beta, \quad M'\alpha B = d_\alpha, \quad B'\alpha' M = d_{\alpha'}, \tag{A.3}$$

mit Diagonalmatrizen d_α, $d_{\alpha'}$, d_β. Zusätzlich, als Konsequenz der nur partiellen Antisymmetrisierung, müssen die Matrizen B und B' eine Blockgestalt haben, die keine Orbitale aus verschiedenen Fragmenten mischt. Gl.A.3 bedeutet, daß $B^{-1}\alpha^{-1}\beta\alpha'^{-1}B'^{-1} = d_\alpha^{-1} d_\beta d_{\alpha'}^{-1}$ diagonal sein muß, was aber wegen der Blockgestalt von B und B' im allgemeinen nicht der Fall sein kann. Um wirklich alle drei Überlappmatrizen simultan zu diagonalisieren, braucht man vollständig antisymmetrisierte Kanalwellenfunktionen χ und χ'.

Da die Wirkung von $(\mathcal{H}-E)$ und V auf einen exakten Kanaleigenzustand identisch ist und ersteres mit dem totalen Antisymmetrisierer $\mathcal{A}$ vertauscht, könnte man V durch $(\mathcal{H}-E)$ ersetzen. Werden aber, wie in der Mean-Field-Rechnung, genäherte Kanalwellenfunktionen χ, χ' benutzt, so können sich beide Operatoren in ihrer Wirkung durchaus, und zwar auch um langreichweitige Anteile, unterscheiden. Da V üblicherweise kurzreichweitig ist, sollte dieses gewählt werden, um den Vorteil des Arbeitens mit Wellenpaketen in der TIMF nicht zu zerstören. Um die damit verbundene umständliche partielle Antisymmetrisierung zu umgehen, wird in diesem Anhang der Kanalspinformalismus eingeführt.

Dabei werden innerhalb der χ oder χ' enthaltenden Matrixelemente die Einteilchenorbitale χ_i, χ'_i und φ_i, φ'_i als zweikomponentige (Kanalspin-) Wellenfunktionen geschrieben:

$$|\chi_i> \to |\chi_i^{cs}> \;=\; \left|\begin{matrix}\chi_i\\ 0\end{matrix}\right\rangle, \qquad \text{für } i\,\epsilon\, a, \tag{A.4}$$

$$|\chi_i> \to |\chi_i^{cs}> \;=\; \left|\begin{matrix}0\\ \chi_i\end{matrix}\right\rangle, \qquad \text{für } i\,\epsilon\, b, \tag{A.5}$$

$$<\chi'_i| \to <\chi_i'^{cs}| \;=\; \left\langle\begin{matrix}\chi'_i\\ 0\end{matrix}\right|, \qquad \text{für } i\,\epsilon\, c, \tag{A.6}$$

$$<\chi'_i| \to <\chi_i'^{cs}| \;=\; \left\langle\begin{matrix}0\\ \chi'_i\end{matrix}\right|, \qquad \text{für } i\,\epsilon\, d, \tag{A.7}$$

$$|\varphi_i> \to |\varphi_i^{cs}> \;=\; \left|\begin{matrix}\varphi_i\\ \varphi_i\end{matrix}\right\rangle, \tag{A.8}$$

$$<\varphi'_i| \to <\varphi_i'^{cs}| \;=\; \left\langle\begin{matrix}\varphi'_i\\ \varphi'_i\end{matrix}\right|. \tag{A.9}$$

Wir transformieren also $|\chi\}$ und $\{\chi'|$ gemäß

$$|\chi\} \to |\chi^{cs}\} = \left(\sqrt{N_a!}\mathcal{A}_a \prod_{i\epsilon a}\left|\begin{matrix}\chi_i\\ 0\end{matrix}\right\rangle\right)\left(\sqrt{N_b!}\mathcal{A}_b \prod_{j\epsilon b}\left|\begin{matrix}0\\ \chi_j\end{matrix}\right\rangle\right), \tag{A.10}$$

$$\{\chi'| \to \{\chi'^{cs}| = \left(\sqrt{N_c!}\prod_{i\epsilon c}\left\langle\begin{matrix}\chi'_i\\ 0\end{matrix}\right|\mathcal{A}_c\right)\left(\sqrt{N_d!}\prod_{j\epsilon d}\left\langle\begin{matrix}0\\ \chi'_j\end{matrix}\right|\mathcal{A}_d\right). \tag{A.11}$$

Bezüglich χ_i bedeutet ein Kanalspin „up“, daß das Orbital zu Fragment a gehört, ein Kanalspin „down“bezeichnet ein Orbital aus Fragment b. Bei den χ'_i wird solcherart zwischen den Fragmenten c und d unterschieden. Den

Orbitalen φ_i bzw. φ'_i aus den Versuchsfunktionen Φ, Φ' werden im Kanalspinformalismus durch Gl.A.8 und A.9 jeweils zwei gleiche Komponenten zugeordnet. Bei dieser Zuordnung bleiben Φ und Φ' total antisymmetrisiert

$$|\Phi> \to |\Phi^{cs}> = \sqrt{N!}\mathcal{A}\prod_i \left| \begin{matrix} \varphi_i \\ \varphi_i \end{matrix} \right\rangle, \tag{A.12}$$

$$< \Phi'| \to < \Phi'^{cs}| = \sqrt{N!}\prod_i \left\langle \begin{matrix} \varphi'_i \\ \varphi'_i \end{matrix} \right| \mathcal{A}. \tag{A.13}$$

Als nächstes werden kanalspinabhängige Potentiale definiert, die V und V' ersetzen, aber deren benötigte Matrixelemente unverändert lassen sollen. Mit Hilfe der Paulimatrizen σ_z^i, die in χ-Kanalspindarstellung auf Teilchen i wirken, und analogen $\sigma_z'^i$ für die χ'-Kanalspindarstellung, definiert man für das zwischen den Teilchen i und j wirksame Potential v_{ij} die Ersetzungen

$$v_{ij}^{cs} = \frac{1}{2}(1 - \sigma_z^i \sigma_z^j)v_{ij} \quad \text{in } \chi\text{-Kanalspindarstellung}, \tag{A.14}$$

$$v_{ij}'^{cs} = \frac{1}{2}(1 - \sigma_z'^i \sigma_z'^j)v_{ij} \quad \text{in } \chi'\text{-Kanalspindarstellung}. \tag{A.15}$$

Dies setzt die Wechselwirkungen v_{ij}^{cs}, $v_{ij}'^{cs}$ innerhalb der Fragmente auf Null, aber läßt sie zwischen den Fragmenten unverändert gleich v_{ij}. Durch die Definitionen

$$V = \sum_{\substack{i\epsilon a \\ j\epsilon b}} v_{ij} \to V^{cs} = \sum_{i<j} \frac{1}{2}(1 - \sigma_z^i \sigma_z^j)v_{ij}, \tag{A.16}$$

$$V' = \sum_{\substack{i\epsilon c \\ j\epsilon d}} v_{ij} \to V'^{cs} = \sum_{i<j} \frac{1}{2}(1 - \sigma_z'^i \sigma_z'^j)v_{ij}, \tag{A.17}$$

bleiben die Werte der folgenden Matrixelemente auch im Kanalspinformalismus erhalten

$$< \Phi'|V|\chi\} \;=\; < \Phi'^{cs}|V^{cs}|\chi^{cs}\}, \tag{A.18}$$

$$\{\chi'|V'|\Phi> \;=\; \{\chi'^{cs}|V'^{cs}|\Phi^{cs}> . \tag{A.19}$$

In dem vergrößerten Kanalspinraum kommutieren nach A.16 bzw. A.17 nun V^{cs} und V'^{cs} mit $\mathcal{A}$

$$[V^{cs}, \mathcal{A}] = 0 = [V'^{cs}, \mathcal{A}], \tag{A.20}$$

und deshalb kann man wegen Gl.A.1 schreiben

$$< \Phi'^{cs}|V^{cs}|\chi^{cs}\} =< \Phi'^{cs}|\mathcal{A}V^{cs}|\chi^{cs}\} =$$

$$\sqrt{N_a!N_b!} < \Phi'^{cs}|V^{cs}\mathcal{A}\mathcal{A}_a\mathcal{A}_b|\chi^{cs}) = \sqrt{\frac{N_a!N_b!}{N!}} < \Phi'^{cs}|V^{cs}|\chi^{cs}>, \tag{A.21}$$

und wegen Gl.A.2

$$\{\chi'^{cs}|V'^{cs}|\Phi^{cs} >= \sqrt{\frac{N_c!N_d!}{N!}} < \chi'^{cs}|V'^{cs}|\Phi^{cs}>, \tag{A.22}$$

unter Verwendung von $\mathcal{A}\mathcal{A}_a = \mathcal{A}\mathcal{A}_b = \mathcal{A}$. Damit ist es möglich, ausschließlich mit vollständig antisymmetrisierten Wellenfunktionen zu arbeiten. Das Funktional 1.40 schreibt sich dann in der Kanalspinformulierung

$$\begin{aligned} F &= \sqrt{\frac{N_a!N_b!}{N!}} < \Phi'^{cs}|V^{cs}|\chi^{cs} > + \sqrt{\frac{N_c!N_d!}{N!}} < \chi'^{cs}|V'^{cs}|\Phi^{cs} > \\ &- < \Phi'|(E-\mathcal{H})|\Phi > . \end{aligned} \tag{A.23}$$

Dabei ist für das Matrixelement $< \Phi'|(E-\mathcal{H})|\Phi >$ die Einführung eines Kanalspins nicht nötig, wäre aber unter Hinzunahme eines Normalisierungsfaktors von $\frac{1}{\sqrt{2}}$ für jedes Orbital φ_i, φ'_i in diesem Matrixelement möglich, ohne daß dies weitere Konsequenzen hätte. Dieser Normalisierungsfaktor darf dann allerdings nur innerhalb $< \Phi'|(E-\mathcal{H})|\Phi >$ und nicht für die φ_i, φ'_i in den χ oder χ' enthaltenden Matrixelementen verwendet werden.

Innerhalb $|\chi^{cs} >$ und $< \chi'^{cs}|$ können die Orbitale nun linearkombiniert werden, wie innerhalb der Slaterdeterminanten Φ, Φ'. Das führt auf verallgemeinerte Kanalspinorbitale

$$|\chi_i^{cs} > \; = \; \left| \begin{matrix} \chi_i^1 \\ \chi_i^2 \end{matrix} \right\rangle , \tag{A.24}$$

$$< \chi_i'^{cs}| \; = \; \left\langle \begin{matrix} \chi_i'^1 \\ \chi_i'^2 \end{matrix} \right| . \tag{A.25}$$

Jetzt ist es möglich, die verallgemeinerten Überlappmatrizen $< \varphi_i'^{cs} \,|\, \chi_j^{cs} >$, $< \chi_i'^{cs} \,|\, \varphi_j^{cs} >$ und die verallgemeinerten Kofaktoren M_{ij}^{cs}, $M_{ij}'^{cs}$ durch lineare Transformationen l der χ_i^{cs}, $\chi_i'^{cs}$ mit $\det l = 1$ zu diagonalisieren, ohne die φ_i, φ'_i zu verändern. Damit verbleibt uns die Freiheit, mit Hilfe der letzteren auch $< \varphi'_i \,|\, \varphi_j >$ und $< \varphi'_i \,|\, h \,|\, \varphi_j >$ diagonal zu wählen.

Die antisymmetrisierte Fassung der TIMF für ΔT kann nun mit Hilfe des Kanalspins formuliert werden. In den Gln.1.64, 1.65 hat man dabei die Summe $\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta}$ durch $\frac{1}{4}\sum_{kl}$ zu ersetzen, wobei die Indizes k, l wegen der totalen Antisymmetrie jetzt über alle Orbitale laufen:

$$< \Phi'^{cs}|V^{cs}|\chi^{cs} > \; = \; \frac{1}{4}\sum_{ijkl} < \varphi_i'^{cs}\varphi_j'^{cs}|v^{cs}|\chi_k^{cs}\chi_l^{cs} > M_{ijlk}^{cs}, \tag{A.26}$$

$$< \chi'^{cs}|V'^{cs}|\Phi^{cs} > \; = \; \frac{1}{4}\sum_{ijkl} < \chi_k'^{cs}\chi_l'^{cs}|v'^{cs}|\varphi_i^{cs}\varphi_j^{cs} > M_{klji}'^{cs}. \tag{A.27}$$

Hierbei sind die Matrixelemente von v^{cs} und v'^{cs} als antisymmetrisch zu verstehen. Beim Bilden der Funktionalableitungen nach den Einteilchenorbitalen φ_i, φ'_i muß man berücksichtigen, daß die φ_i bzw. φ'_i in den Kanalspinversuchsfunktionen doppelt auftreten. Mit den Identitäten für die antisymmetrischen Matrixelemente mit verallgemeinerten Kanalspinwellenfunktionen

$$< \varphi_m'^{cs}\varphi_n'^{cs}|v^{cs}|\chi_k^{cs}\chi_l^{cs} > \; = \; < \varphi'_m\varphi'_n|v|\chi_k^1\chi_l^2 + \chi_k^2\chi_l^1 >, \tag{A.28}$$

$$< \chi_m'^{cs}\chi_n'^{cs}|v'^{cs}|\varphi_k^{cs}\varphi_l^{cs} > \; = \; < \chi_m'^1\chi_n'^2 + \chi_m'^2\chi_n'^1|v|\varphi_k\varphi_l >, \tag{A.29}$$

werden die Gln.1.68, 1.69 zu

$$\begin{aligned}\frac{\delta C}{\delta <\varphi_i'|} &= \sqrt{\frac{N_a!N_b!}{N!}}\Bigg(\frac{1}{2}\sum_{jkl} <\cdot\varphi_j'|v|\chi_k^1\chi_l^2+\chi_k^2\chi_l^1> M_{ijlk}^{cs} \\ &+ \frac{1}{4}\sum_{jmnkl} <\varphi_m'\varphi_n'|v|\chi_k^1\chi_l^2+\chi_k^2\chi_l^1> M_{mnijlk}^{cs}|\chi_j^1+\chi_j^2>\Bigg),\end{aligned} \tag{A.30}$$

$$\begin{aligned}\frac{\delta C'}{\delta|\varphi_i>} &= \sqrt{\frac{N_c!N_d!}{N!}}\Bigg(\frac{1}{2}\sum_{jkl} <\chi_k'^1\chi_l'^2+\chi_k'^2\chi_l'^1|v|\cdot\varphi_j> M_{klji}'^{cs} \\ &+ \frac{1}{4}\sum_{jmnkl} <\chi_k'^1\chi_l'^2+\chi_k'^2\chi_l'^1|v|\varphi_m\varphi_n> M_{kljinm}'^{cs} <\chi_j'^1+\chi_j'^2|\Bigg).\end{aligned} \tag{A.31}$$

Weiter werden nun die selbstkonsistenten Potentiale definiert durch

$$<\cdot|S_1|\chi_l^1> = \frac{1}{<\Phi'^{cs}|\chi^{cs}>}\sum_{nk} <\cdot\varphi_n'|v|\chi_l^1\chi_k^2> M_{nk}^{cs}, \tag{A.32}$$

$$<\cdot|S_2|\chi_l^2> = \frac{1}{<\Phi'^{cs}|\chi^{cs}>}\sum_{nk} <\cdot\varphi_n'|v|\chi_l^2\chi_k^1> M_{nk}^{cs}, \tag{A.33}$$

$$<\chi_l'^1|S_1'|\cdot> = \frac{1}{<\chi'^{cs}|\Phi^{cs}>}\sum_{kn} <\chi_l'^1\chi_k'^2|v|\cdot\varphi_n> M_{kn}'^{cs}, \tag{A.34}$$

$$<\chi_l'^2|S_2'|\cdot> = \frac{1}{<\chi'^{cs}|\Phi^{cs}>}\sum_{kn} <\chi_l'^2\chi_k'^1|v|\cdot\varphi_n> M_{kn}'^{cs}. \tag{A.35}$$

Die Gln.1.74, 1.75 sowie 1.76, 1.77 ändern sich nicht, da dort keine χ, χ' vorkommen, aber die Gln.1.78, 1.79 hat man jetzt zu schreiben als

$$\begin{aligned}\frac{\delta C}{\delta <\varphi_i'|} &= \sqrt{\frac{N_a!N_b!}{N!}} <\Phi'^{cs}|\chi^{cs}> \Bigg[\sum_j A_{ji}^{cs}(S_1|\chi_j^1>+S_2|\chi_j^2>) \\ &+ \frac{1}{2}\sum_{jml}\Big(<\varphi_m'|S_1|\chi_l^1>+<\varphi_m'|S_2|\chi_l^2>\Big)A_{ji}^{cs}A_{lm}^{cs}|\chi_j^1+\chi_j^2> \\ &- \sum_{jml}\Big(<\varphi_m'|S_1|\chi_l^1>+<\varphi_m'|S_2|\chi_l^2>\Big)A_{jm}^{cs}A_{li}^{cs}|\chi_j^1+\chi_j^2>\Bigg],\end{aligned} \tag{A.36}$$

$$\begin{aligned}\frac{\delta C'}{\delta|\varphi_i>} &= \sqrt{\frac{N_c!N_d!}{N!}} <\chi'^{cs}|\Phi^{cs}> \Bigg[\sum_j A_{ij}'^{cs}(<\chi_j'^1|S_1'+<\chi_j'^2|S_2') \\ &+ \frac{1}{2}\sum_{jml}\Big(<\chi_l'^1|S_1'|\varphi_m>+<\chi_l'^2|S_2'|\varphi_m>\Big)A_{ij}'^{cs}A_{ml}'^{cs} <\chi_j'^1+\chi_j'^2| \\ &- \sum_{jml}\Big(<\chi_l'^1|S_1'|\varphi_m>+<\chi_l'^2|S_2'|\varphi_m>\Big)A_{mj}'^{cs}A_{il}'^{cs} <\chi_j'^1+\chi_j'^2|\Bigg].\end{aligned} \tag{A.37}$$

Diese Gleichungen sind invariant unter den linearen Transformationen l der Orbitale χ_i^{cs}, $\chi_i'^{cs}$ mit $\det l = 1$ und reduzieren sich auf die Gln.1.78, 1.79, wenn die Wellenfunktionen A.4-A.7 benutzt werden. In einer Darstellung, in der beide Überlappmatrizen $< \varphi_i'^{cs}|\chi_j^{cs} >$ und $< \chi_i'^{cs}|\varphi_j^{cs} >$ diagonal sind, vereinfachen sich die Gln.A.36, A.37 zu

$$\begin{aligned}
\frac{\delta C}{\delta < \varphi_i'|} &= \sqrt{\frac{N_a!N_b!}{N!}} \frac{< \Phi'^{cs}|\chi^{cs} >}{< \varphi_i'|\chi_i^1 + \chi_i^2 >} \Bigg[(S_1|\chi_i^1 > + S_2|\chi_i^2 >) \\
&+ \frac{1}{2} \left(\sum_l \frac{< \varphi_l'|S_1|\chi_l^1 > + < \varphi_l'|S_2|\chi_l^2 >}{< \varphi_l'|\chi_l^1 + \chi_l^2 >} \right) |\chi_i^1 + \chi_i^2 > \\
&- \sum_j \frac{< \varphi_j'|S_1|\chi_i^1 > + < \varphi_j'|S_2|\chi_i^2 >}{< \varphi_j'|\chi_j^1 + \chi_j^2 >} |\chi_j^1 + \chi_j^2 > \Bigg], \qquad \text{(A.38)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\delta C'}{\delta |\varphi_i >} &= \sqrt{\frac{N_c!N_d!}{N!}} \frac{< \chi'^{cs}|\Phi^{cs} >}{< \chi_i'^1 + \chi_i'^2|\varphi_i >} \Bigg[(< \chi_i'^1|S_1' + < \chi_i'^2|S_2') \\
&+ \frac{1}{2} \left(\sum_l \frac{< \chi_l'^1|S_1'|\varphi_l > + < \chi_l'^2|S_2'|\varphi_l >}{< \chi_l'^1 + \chi_l'^2|\varphi_l >} \right) < \chi_i'^1 + \chi_i'^2| \\
&- \sum_j \frac{< \chi_i'^1|S_1'|\varphi_j > + < \chi_i'^2|S_2'|\varphi_j >}{< \chi_j'^1 + \chi_j'^2|\varphi_j >} < \chi_j'^1 + \chi_j'^2| \Bigg], \qquad \text{(A.39)}
\end{aligned}$$

mit

$$< \Phi'^{cs}|\chi^{cs} > = \prod_i < \varphi_i'|\chi_i^1 + \chi_i^2 > \text{ und} \qquad \text{(A.40)}$$

$$< \chi'^{cs}|\Phi^{cs} > = \prod_i < \chi_i'^1 + \chi_i'^2|\varphi_i > . \qquad \text{(A.41)}$$

Diese Gleichungen können jetzt mit den Gln.1.87, 1.88 kombiniert werden, in denen auch $< \varphi_i' \,|\, \varphi_j >$ und $< \varphi_i' \,|\, h \,|\, \varphi_j >$ diagonal sind. Da alle Kofaktoren gleichzeitig mit den drei Überlappmatrizen diagonal werden, reduziert sich damit die enorme Zahl der zu berechnenden Kofaktoren, wie z.B. N^6 für M_{mnijlk} mit sechs Indizes, auf die Anzahl der Diagonalelemente. Der Preis, der für diese Vereinfachung zu zahlen ist, besteht in der Einführung zweikomponentiger Wellenfunktionen. Dadurch entstehen im Vergleich zu den Gln.1.78, 1.79 bei linearen Transformationen der χ_i, χ_i' zwischen den Fragmenten zusätzliche Terme in den Gln.A.38, A.39.

Eine Verallgemeinerung dieses zweikomponentigen Kanalspinformalismus auf einen Fall mit mehr als zwei Fragmenten im Eingangs- und/oder Ausgangskanal ist ohne weiteres machbar. Bei n Fragmenten in einem Kanal ergibt die Einführung n-komponentiger Kanalspinwellenfunktionen wiederum die Möglichkeit, ausschließlich mit vollständig antisymmetrisierten Wellenfunktionen zu arbeiten.

Anhang B

Kanalspin in zweiter Quantisierung

In diesem Abschnitt soll auch der Fall nur partiell antisymmetrisierter Kanalwellenfunktionen in zweiter Quantisierung behandelt werden. Wir nehmen dabei die $<\Phi'| \cdots |\chi>$–Matrixelemente als Beispiel, bei den $<\chi'| \cdots |\Phi>$–Matrixelementen verfährt man genau analog. Matrixelemente zwischen voll und nur partiell antisymmetrisierten Vektoren bereiten keine Probleme, wenn kein Potential dazwischen steht,

$$<\Phi'|\chi\} =<\Phi'|\mathcal{A}|\chi\} = \sqrt{\frac{N_a!N_b!}{N!}} <\Phi'|\chi> . \tag{B.1}$$

Diese können also bei Berücksichtigung der unterschiedlichen Normierungsfaktoren voll antisymmetrisch behandelt werden. Entsprechendes gilt für den Vektor $|\chi_v\} = V|\chi>$. Denn wenn die Wirkung von V auf χ richtig beschrieben ist, kann danach χ_v antisymmetrisiert werden.

Das wesentliche Problem dabei ist die Darstellung der Kanalpotentiale, die nur selektiv zwischen den Fragmenten wirken sollen. Deshalb kann man zunächst zwei Mengen von Erzeugern $a^\dagger_\alpha$, $b^\dagger_\beta$ und Vernichtern a_α, b_β einführen, um über die Zugehörigkeit zu den Fragmenten Buch zu führen. Die $a^\dagger_\alpha$–Erzeuger erzeugen ein Orbital α in Fragment a, die $b^\dagger_\alpha$–Erzeuger in Fragment b. Die Kanalwellenfunktion χ hat dann die Gestalt

$$|\chi>= a^\dagger_1 \cdots b^\dagger_N|0> . \tag{B.2}$$

Mit antikommutierenden Erzeugern

$$[a^\dagger_\alpha, b^\dagger_\beta]_+ = 0, \quad [a^\dagger_\alpha, a^\dagger_\beta]_+ = 0, \quad [b^\dagger_\alpha, b^\dagger_\beta]_+ = 0, \tag{B.3}$$

ist der Zustand $|\chi>$ antisymmetrisch, denn es gelten dann die typischen Determinantenumformungen wie beispielsweise

$$a^\dagger_1 \cdots a^\dagger_i \cdots b^\dagger_N|0>= a^\dagger_1 \cdots (a^\dagger_i + b^\dagger_j) \cdots b^\dagger_N|0> . \tag{B.4}$$

Ein Kanalpotential V der Form $a^\dagger b^\dagger b\, a$ wirkt dadurch selektiv nur zwischen den Fragmenten und erhält zusätzlich die Anzahl der Teilchen in jedem Fragment, wenn man fordert

$$[a_\alpha, a^\dagger_\beta]_+ = <\alpha' \,|\, \beta>, \qquad [b_\alpha, b^\dagger_\beta]_+ = <\alpha' \,|\, \beta>, \tag{B.5}$$

$$[a_\alpha, b^\dagger_\beta]_+ = 0, \qquad [b_\alpha, a^\dagger_\beta]_+ = 0. \tag{B.6}$$

Aber anstatt wie in [43] mit den beiden unterschiedlichen Erzeugermengen $a^\dagger$, $b^\dagger$ zu arbeiten, wollen wir hier die Eigenschaft B.4 ausnutzen, um — wie im voll antisymmetrisierten Fall — wieder auf ein natürliches Biorthogonalsystem des Matrixelementes zu kommen. Dazu definieren wir

$$c^\dagger_{\binom{\alpha_1}{\alpha_2}} = a^\dagger_{\alpha_1} + b^\dagger_{\alpha_2}, \tag{B.7}$$

so daß also

$$c^\dagger_{\binom{\alpha}{0}} = a^\dagger_\alpha, \quad c^\dagger_{\binom{0}{\beta}} = b^\dagger_\beta, \tag{B.8}$$

und

$$|\,\chi> = c^\dagger_{\binom{1}{0}} \cdots c^\dagger_{\binom{0}{N}} |\, 0> . \tag{B.9}$$

Aufgrund der Vertauschungsrelationen

$$[c^\dagger_{\binom{\alpha_1}{\alpha_2}}, c^\dagger_{\binom{\beta_1}{\beta_2}}]_+ = 0, \tag{B.10}$$

können wir durch Operationen der Art B.4 χ nun auch wahlweise in $c^\dagger_{\binom{i}{j}}$ Operatoren ausdrücken, in denen nicht eine Komponente Null ist. Nennen wir die a_{χ_α} aus dem Kapitel 2 über die TIMF in zweiter Quantisierung jetzt c_α, so gilt weiterhin

$$[c_\alpha, c_\beta]_+ = 0, \tag{B.11}$$

und

$$<\Phi' \,| = <0\,| c_1 \cdots c_N. \tag{B.12}$$

Betrachten wir ein allgemeines Matrixelement, wie es bei einer Variation mit Potential zwischen zwei Slaterdeterminanten auszurechnen ist, als physikalischen Vakuumerwartungswert der Struktur

$$<0\,|\, c \cdots c(c^\dagger c)(c^\dagger c^\dagger cc)c^\dagger \cdots c^\dagger \,|\, 0> . \tag{B.13}$$

Bei Berechnung physikalischer Vakuumerwartungswerte mit physikalischen Erzeugern und Vernichtern benötigt man in jedem Fall immer nur Kontraktionen der Art $\overline{cc^\dagger}$. Es ist also völlig ausreichend, neben B.10 und B.11 noch zu fordern

$$[c_\alpha, c^\dagger_{\binom{\beta_1}{\beta_2}}]_+ = <\alpha' \,|\, \beta_1 + \beta_2> . \tag{B.14}$$

Vorausgesetzt wir können das Kanalpotential mit seiner selektiven Wirkung ebenfalls in c_α und $c^\dagger_{\binom{\beta_1}{\beta_2}}$ ausdrücken, benötigen wir keine Erzeuger mit nur einer Komponente $c^\dagger_\beta$ und keinen Vernichter mit zwei Komponenten $c_{\binom{\alpha_1}{\alpha_2}}$.

Wir setzen unter Verwendung dieser beiden Erzeuger und Vernichter für das Potential an

$$V = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \frac{v_{\alpha'\beta'\gamma\delta}}{m_\alpha m_\beta m_\gamma m_\delta} c^\dagger_{\binom{\alpha_1}{\alpha_2}} c^\dagger_{\binom{\beta_1}{\beta_2}} c_\delta \, c_\gamma \,, \tag{B.15}$$

mit den Matrixelementen

$$v_{\alpha'\beta'\gamma\delta} = v_{\alpha'\beta'\binom{\gamma_1}{\gamma_2}\binom{\delta_1}{\delta_2}} = v_{\alpha'\beta'\gamma_1\delta_2} + v_{\alpha'\beta'\gamma_2\delta_1}, \tag{B.16}$$

und $m_\alpha =< \varphi'_\alpha \,|\, \chi_\alpha >$. Dieser Ausdruck für das Potential bedarf einer Erklärung: Eine Basis $a^\dagger_\alpha, b^\dagger_\beta$ der Ket–Seite erhält man ausgehend von einer beliebigen Basis $|\,\alpha >$, indem man die Basisvektoren so auf die oberen ($a^\dagger$) oder unteren ($b^\dagger$) Indizes verteilt, daß die Kanalwellenfunktionen damit beschrieben werden können. Wegen $v_{\alpha'\beta' i\, i} = 0$ aufgrund der Antisymmetrie der v–Matrixelemente ist es *nicht* notwendig, *dieselben* Orbitale in Fragment a *und* b zu verwenden, um den Wert des gesamten Matrixelementes richtig zu erhalten. (In der Praxis unterscheiden sich die Fragmente auch immer zumindest um den Boost.) Die Basis des doppelt indizierten Hilbertraumes ist also nicht doppelt so groß, sondern nur, relativ zur Fragmentunterteilung in χ, in zwei Gruppen a und b aufgeteilt. Durch Übergang zu den allgemein doppeltindizierten Operatoren B.7 kann man durch Operationen der Art B.4 relativ zu einer Basis $< 0\,| c_\alpha =< \alpha'\,|$ der Bra–Seite biorthogonale Orbitale $c_{\binom{\alpha_1}{\alpha_2}}|\,0> = |\binom{\alpha_1}{\alpha_2}> = |\,\alpha>$ erzeugen, so daß als Spezialfall von B.14 gilt

$$[c_\alpha, c^\dagger_\beta]_+ = \delta_{\alpha\beta} < \alpha' \,|\, \alpha_1 + \alpha_2 > . \tag{B.17}$$

Hier wurde der Übersichtlichkeit halber die Doppelindizierung ohne Informationsverlust wieder weggelassen. Ein Ket–Vektor $|\,\alpha>$ oder Erzeugungsoperator $a^\dagger_\alpha$ besitzt dann jeweils eine a–Komponente α_1 und eine b–Komponente α_2. Für die Bra–Seite oder Vernichter ist eine solche Unterteilung nicht notwendig. Die selektive Wirkung entstammt bei dieser Formulierung nicht den Kontraktionen, sondern den Matrixelementen, die Null werden, wenn beide Orbitale aus demselben Fragment stammen

$$v_{\alpha'\beta'\binom{\gamma_1}{0}\binom{\delta_1}{0}} = v_{\alpha'\beta'\binom{0}{\gamma_2}\binom{0}{\delta_2}} = 0. \tag{B.18}$$

Bestimmt man $V|\,\chi>$ durch Kommutieren von V nach rechts zum physikalischen Vakuum, so ergeben die dabei entstehenden Kommutatorterme

$$[V, c^\dagger_{\binom{\epsilon_1}{\epsilon_2}}]_- = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma} \frac{v_{\alpha'\beta'\binom{\epsilon_1}{\epsilon_2}\binom{\gamma_1}{\gamma_2}}}{m_\alpha m_\beta m_\gamma} c^\dagger_{\binom{\alpha_1}{\alpha_2}} c^\dagger_{\binom{\beta_1}{\beta_2}} c_\gamma, \tag{B.19}$$

die gewünschte Wirkung von V auf $|\,\chi>$

$$V|\,\chi_1 \cdots \chi_N >= \sum_{\substack{i\epsilon a\\ j\epsilon b}} \sum_{\alpha\beta} \frac{(\alpha\beta|V|\chi_i\chi_j)}{m_\alpha m_\beta} |\,\chi_1 \cdots \chi_\alpha \cdots \chi_\beta \cdots \chi_N > . \tag{B.20}$$

Entsprechend der voll antisymmetrisierten Fassung erscheint in Gl.B.15 der Faktor 1/4 vor dem Potential, da bei unbeschränkter Summe und antisymmetrisierten Matrixelementen jeder Term auch viermal auftaucht.

Die Berechnung von Matrixelementen geschieht wieder mit Hilfe des Wickschen Theorems. Die Kontraktionen gewinnt man dafür aus den Vakuumerwartungswerten

$$\begin{aligned} \overline{c^\dagger_\alpha c_\beta} &= \frac{<0\,|\,c_1 \cdots c_N c^\dagger_\alpha c_\beta c^\dagger_{\binom{1}{0}} \cdots c^\dagger_{\binom{0}{N}}\,|\,0>}{<\Phi'\,|\,\chi>} \\ &= \sum_{ij} <\beta'\,|\,i_1 + i_2> A_{ij} <j'\,|\,\alpha_1 + \alpha_2>, \end{aligned} \tag{B.21}$$

und insbesondere bei biorthogonalen Orbitalen, d.h. diagonalen Inversen A_{ij}, gilt

$$\overline{c^\dagger_\alpha c_\beta} = \sum_i \frac{1}{m_i} <\beta'\,|\,i_1 + i_2><i'\,|\,\alpha_1 + \alpha_2> . \tag{B.22}$$

Dies definiert einen nichthermitischen Einteilchendichteoperator

$$\rho = \sum_{ij} |\,i> A_{ij} <j'\,| = \sum_{ij} |\,i_1 + i_2> A_{ij} <j'\,|, \tag{B.23}$$

dessen Matrixelemente den Kontraktionen entsprechen

$$\overline{c^\dagger_\alpha c_\beta} =<\beta\,|\,\rho\,|\,\alpha>, \quad \overline{c_\beta c^\dagger_\alpha} =<\beta\,|\,\alpha> - <\beta\,|\,\rho\,|\,\alpha> . \tag{B.24}$$

Beispielsweise benötigen wir bei einer Variation $c^\dagger_i c_x / m_i$ mit $i < N$ und beliebigen $<0\,|c_x =<x'\,|$ u.a. folgende Kontraktion

$$\overline{c^\dagger_i c_x} =<x'\,|\,i>=<x'\,|\,i_1 + i_2> . \tag{B.25}$$

In den Skalarprodukten ist die Unterscheidung zwischen den a– und b–Komponenten auch auf der Ket–Seite nicht nötig. Damit ist alles vollkommen analog zum voll antisymmetrisierten Fall, wenn man nur für die Matrixelemente von V nach B.16 setzt $v_{\alpha'\beta'\gamma\delta} = v_{\alpha'\beta'\gamma_1\delta_2} + v_{\alpha'\beta'\gamma_2\delta_1}$. Wir können also ohne jegliche weitere Rechnung die Ergebnisse bezüglich des vollen $\mathcal{V}$ übernehmen und erhalten nach Gl.2.103

$$\begin{aligned} &<\Phi'\,|\,\frac{c_i}{m_i}^\dagger c_x V\,|\,\chi>= \\ &\qquad \sqrt{\frac{N_a! N_b!}{N!}} \frac{\det\alpha}{m_i} <x'\,|\,\frac{1}{2}\sum_{k,l<N} \frac{v_{k'l'kl}}{n_k n_l} + \mathcal{P}_p \sum_{l<N} \frac{v_{\cdot l'\cdot l}}{m_l}\,|\,\chi_i> \\ &= \sqrt{\frac{N_a! N_b!}{N!}} \frac{\det\alpha}{m_i} <x'\,|\,\frac{1}{2}\sum_{k,l<N} \frac{v_{k'l'kl}}{n_k n_l} + \sum_{l<N} \frac{v_{\cdot l'\cdot l}}{m_l} - \mathcal{P}_h \sum_{l<N} \frac{v_{\cdot l'\cdot l}}{m_l}\,|\,\chi_i> \\ &= \sqrt{\frac{N_a! N_b!}{N!}} \frac{\det\alpha}{m_i} <x'\,|\,(<\overline{V}> + S - \mathcal{P}_h S)\,|\,\chi_i>, \end{aligned} \tag{B.26}$$

geschrieben mit Hilfe der nichthermitischen Projektoren $\mathcal{P}_p$ und $\mathcal{P}_h$ auf den Teilchen– bzw. Lochraum, dem selbstkonsistenten Kanalpotential

$$S = \sum_{l<N} \frac{v_{\cdot l' \cdot l}}{m_l}, \tag{B.27}$$

sowie der i–unabhängigen Kanalselbstenergie

$$< \overline{V} >= \frac{1}{2} \sum_{k,l<N} \frac{v_{k'l'kl}}{n_k n_l}. \tag{B.28}$$

Die Ersetzung nach B.16 führt auf Gleichung A.38

$$\begin{aligned}
&< \Phi' \,|\, \frac{c_i}{m_i}^{\dagger} c_x V \,|\, \chi >= \\
&\quad \sqrt{\frac{N_a! N_b!}{N!}} \frac{\det \alpha}{m_i} < x' \,|\, \frac{1}{2} \sum_{k,l<N} \frac{v_{k'l'k_1 l_2} + v_{k'l'k_2 l_1}}{n_l n_k} \,|\, \chi_i > \\
&\quad + < x' \,|\, \left(\sum_{l<N} \frac{v_{\cdot l' \cdot l_2}}{m_l} |\, \chi_{i_1} > + \sum_{l<N} \frac{v_{\cdot l' \cdot l_1}}{m_l} |\, \chi_{i_2} > \right) \\
&\quad - \sum_{k,l<N} < x' \,|\, \chi_k > \frac{v_{k'l'i_1 l_2} + v_{k'l'i_2 l_1}}{m_l m_k},
\end{aligned} \tag{B.29}$$

denn es gilt

$$S_1 = \sum_{l<N} \frac{v_{\cdot l' \cdot l_2}}{m_l}, \quad S_2 = \sum_{l<N} \frac{v_{\cdot l' \cdot l_1}}{m_l}. \tag{B.30}$$

Die entsprechende Formel mit nichtdiagonalen Kofaktoren bekommt man bei Verwendung der allgemeinen, die Kofaktoren enthaltenden Kontraktionen. Nach Definition des Kanalpotentials kann das Ergebnis also einfach durch Ablesen aus den Diagrammen gewonnen werden.

Sind die vorgegebenen φ'_i Rechtseigenvektoren von $\mathcal{P}_h V \mathcal{P}_h$, oder sieht man von ihnen ab und geht über zu Rechts– und Linkseigenvektoren von $\mathcal{P}_h V \mathcal{P}_h$, die damit auch biorthogonal sind, so entsteht aus $\mathcal{P}_h S |\, \chi_i > = \omega_i |\, \chi_i >$ ein i–abhängiger Teil der Kanalselbstenergie

$$< \Phi' \,|\, \frac{c_i}{m_i}^{\dagger} c_x V \,|\, \chi >= \sqrt{\frac{N_a! N_b!}{N!}} \frac{\det \alpha}{m_i} < x' \,|\, (< \overline{V} > - \omega_i + S) \,|\, \chi_i > . \tag{B.31}$$

Offensichtlich funktioniert alles analog auch bei $< \chi' \,|\, \cdots \,|\, \Phi >$–Matrixelementen. Der TIMF-Formalismus kann damit auch bei nur partiell antisymmetrisierten Kanalwellenfunktionen und “Post„– oder “Prior„–Potentiale enthaltenden Matrixelementen in zweiter Quantisierung durchgeführt werden.

Anhang C

Selbstkonsistente Symmetrien

In vielen Anwendungen werden Kanalwellenfunktionen χ, χ' verwendet, die bestimmte Symmetrien aufweisen. Unter bestimmten Voraussetzungen kann man dann auch Versuchsfunktionen φ, φ' derselben Symmetrie verwenden, die mit den Selbstkonsistenzbedingungen der TIMF-Gleichungen verträglich sind. Dieser Ansatz, der einer Projektion vor der Variation entspricht, kann in einigen Fällen die Zahl der zu lösenden gekoppelten Mean-Field-Gleichungen drastisch reduzieren.

Beginnen wir mit einem unitären Operator P im Raum der Einteilchenfunktionen, dessen Wirkung auf die χ_i, χ_i' bis auf eine eventuelle Phase einer Permutation entspricht

$$P|\chi_i >= e^{i\theta_i}|\chi_{\sigma(i)} > \text{ und } < \chi_i'|P^+ =< \chi'_{\sigma(i)}|e^{-i\theta_i}, \tag{C.1}$$

wobei σ die Permutation und θ_i eine beliebige i-abhängige Phase bezeichnen. Dann kann man auch für die φ_i, φ_i' ansetzen

$$P|\varphi_i >= e^{i\theta_i}|\varphi_{\sigma(i)} > \text{ und } < \varphi_i'|P^+ =< \varphi'_{\sigma(i)}|e^{-i\theta_i}, \tag{C.2}$$

unter der Voraussetzung, daß die Kommutatorbeziehungen

$$[t, P] = 0\,,\ [v, P \otimes P] = 0 \tag{C.3}$$

erfüllt sind und die Transformation P entweder alle Orbitale im selben Fragment beläßt oder alle Orbitale zum jeweils anderen Fragment hin abbildet. Definieren wir die Matrix ρ (bzw. ρ'), deren Matrixelemente 0 sind, wenn χ_i und χ_j (bzw. χ_i' and χ_j') aus dem selben Fragment stammen, und 1, wenn sie aus verschiedenen Fragmenten kommen, so heißt das

$$\rho_{ij} = \rho_{\sigma(i)\sigma(j)} \text{ und } \rho'_{ij} = \rho'_{\sigma(i)\sigma(j)}. \tag{C.4}$$

Die Unitarität von P garantiert die Invarianz der Überlappmatrizen

$$\beta_{ij} =< \varphi_i'|\varphi_j >\,,\ \alpha_{ij} =< \varphi_i'|\chi_j >\,,\ \alpha'_{ij} =< \chi_i'|\varphi_j >, \tag{C.5}$$

d.h.

$$\beta_{ij} = e^{i(\theta_j-\theta_i)}\beta_{\sigma(i)\sigma(j)}, \tag{C.6}$$

$$\alpha_{ij} = e^{i(\theta_j-\theta_i)}\alpha_{\sigma(i)\sigma(j)}, \tag{C.7}$$

$$\alpha'_{ij} = e^{i(\theta_j-\theta_i)}\alpha'_{\sigma(i)\sigma(j)}. \tag{C.8}$$

Vergleicht man die allgemeine Kofaktorentwicklung

$$\delta_{ki}\det\beta = \sum_j \beta_{ij}N_{kj} = \sum_j e^{i(\theta_j-\theta_i)}\beta_{\sigma(i)\sigma(j)}N_{kj}, \tag{C.9}$$

mit

$$\delta_{\sigma(k)\sigma(i)}\det\beta = \sum_j \beta_{\sigma(i)j}N_{\sigma(k)j} = \sum_j \beta_{\sigma(i)\sigma(j)}N_{\sigma(k)\sigma(j)}, \tag{C.10}$$

so findet man mit Hilfe von $\delta_{ki} = \delta_{\sigma(k)\sigma(i)}$

$$N_{ij} = e^{-i(\theta_j-\theta_i)}N_{\sigma(i)\sigma(j)}, \tag{C.11}$$

oder für die Inverse B der Überlappmatrix β

$$B_{ij} = e^{i(\theta_j-\theta_i)}B_{\sigma(i)\sigma(j)}. \tag{C.12}$$

Auf die gleiche Weise erhält man

$$M_{ij} = e^{-i(\theta_j-\theta_i)}M_{\sigma(i)\sigma(j)}\,,\; M'_{ij} = e^{-i(\theta_j-\theta_i)}M'_{\sigma(i)\sigma(j)}, \tag{C.13}$$

sowie

$$< \varphi'_i|t|\varphi_j >= e^{i(\theta_j-\theta_i)} < \varphi'_{\sigma(i)}|t|\varphi_{\sigma(j)} >, \tag{C.14}$$

und

$$< \varphi'_i\varphi'_k|v|\varphi_j\varphi_l >= e^{i(\theta_j+\theta_l-\theta_i-\theta_k)} < \varphi'_{\sigma(i)}\varphi'_{\sigma(k)}|v|\varphi_{\sigma(j)}\varphi_{\sigma(l)} > . \tag{C.15}$$

Aus den Gln. C.11, C.12 sowie C.14, C.15 erhält man für die selbstkonsistenten Einteilchenoperatoren U und h

$$< \varphi'_i|U|\varphi_j >= e^{i(\theta_j-\theta_i)} < \varphi'_{\sigma(i)}|U|\varphi_{\sigma(j)} > \tag{C.16}$$

sowie

$$< \varphi'_i|h|\varphi_j >= e^{i(\theta_j-\theta_i)} < \varphi'_{\sigma(i)}|h|\varphi_{\sigma(j)} >, \tag{C.17}$$

bzw. erweitert auf den vollen Hilbertraum der Einteilchenbewegung

$$[U,P] = 0\,,\; [h,P] = 0. \tag{C.18}$$

Analog bekommt man

$$< \cdot|[S,P]|\chi_i >= 0\,,\; < \chi'_i|[S',P]|\cdot >= 0, \tag{C.19}$$

wobei

$$S|\chi_i >= (\det\alpha)^{-1}\sum_{kl}\rho_{il} < \cdot\varphi'_k|v|\chi_i\chi_l > M_{kl}, \tag{C.20}$$

und

$$< \chi_i'|S' = (\det \alpha')^{-1} \sum_{kl} \rho_{ki}' < \chi_i' \chi_k' |v| \cdot \varphi_l > M_{kl}'. \tag{C.21}$$

Für einen Beweis der Selbstkonsistenz des Ansatzes C.2 hat man zu zeigen, daß

$$P \frac{\delta F}{\delta < \varphi_i'|} = e^{i\theta_i} \frac{\delta F}{\delta < \varphi_{\sigma(i)}'|}. \tag{C.22}$$

Dies wird vorgeführt für die Gl.1.80, wobei das Symbol $\bar{\eta}$ für den i-unabhängigen Teil der Selbstenergie verwendet wird

$$\begin{aligned} P \det \beta & \left[\sum_j (E - h - \bar{\eta}) B_{ji} + \sum_{jkl} < \varphi_k' |h| \varphi_l > B_{li} B_{jk} \right] |\varphi_j > \\ &= e^{i\theta_i} \det \beta \left[\sum_j (E - h - \bar{\eta}) B_{\sigma(j)\sigma(i)} \right. \\ & \left. + \sum_{jkl} < \varphi_{\sigma(k)}' |h| \varphi_{\sigma(l)} > B_{\sigma(l)\sigma(i)} B_{\sigma(j)\sigma(k)} \right] |\varphi_{\sigma(j)} >, \end{aligned} \tag{C.23}$$

unter Verwendung von C.12 und C.17, C.18. Dies ist das erwünschte Resultat, da in der Summe für jeden Summationsindex $\sigma(j)$ durch j ersetzt werden kann. Das Analoge für die rechte Seite der Mean-Field-Gleichungen sowie bzgl. der Orbitale $< \varphi_i'|$ kann auf die gleiche Art gezeigt werden, wodurch die Selbstkonsistenz des Ansatzes C.2 bewiesen ist.

Der zweite Fall sind antiunitäre Symmetrien wie z.B. die Zeitumkehrinvarianz. Antiunitäre Operatoren A sind stets zu schreiben als Produkt eines unitären Operators und des Operators der Komplexkonjugation bezüglich einer festen Basis. Es gelten für sie folgende Beziehungen aufgrund der Antilinearität

$$A(\lambda|\varphi >) = \lambda^* A|\varphi >, \tag{C.24}$$

sowie

$$< \varphi'|(A|\varphi >) = (< \varphi'|A)|\varphi >^*, \tag{C.25}$$

und wegen der Unitariät

$$A^+ A = A A^+ = 1 \text{ oder } < \varphi'|\varphi >= \left[(< \varphi'|A^+)(A\varphi >) \right]^*. \tag{C.26}$$

Betrachten wir eine Situation mit

$$A|\chi_i >= e^{i\theta_i} |\chi_{\sigma(i)}' > \text{ und } < \chi_i'|A^+ =< \chi_{\sigma(i)}|e^{-i\theta_i}. \tag{C.27}$$

Dann kann man für die Versuchsfunktionen ansetzen

$$A|\varphi_i >= e^{i\theta_i} |\varphi_{\sigma(i)}' > \text{ und } < \varphi_i'|A^+ =< \varphi_{\sigma(i)}|e^{-i\theta_i}, \tag{C.28}$$

vorausgesetzt A genügt den Bedingungen

$$A\, t = t^+ A\,,\, (A \otimes A) v = v^+ (A \otimes A), \tag{C.29}$$

und

$$\rho_{ij} = \rho'_{\sigma(j)\sigma(i)}\,,\ \rho'_{ij} = \rho_{\sigma(j)\sigma(i)}. \tag{C.30}$$

Bei hermitischen t und v werden diese Bedingungen zu Kommutatorbeziehungen. Mit Hilfe von Gl.C.26 sieht man, daß

$$\beta_{ij} = e^{i(\theta_i-\theta_j)}\beta_{\sigma(j)\sigma(i)}, \tag{C.31}$$

$$\alpha_{ij} = e^{i(\theta_i-\theta_j)}\alpha'_{\sigma(j)\sigma(i)}, \tag{C.32}$$

$$\alpha'_{ij} = e^{i(\theta_i-\theta_j)}\alpha_{\sigma(j)\sigma(i)} \tag{C.33}$$

und

$$\det\alpha = \det\alpha'. \tag{C.34}$$

Wie in Gl.C.9 und C.10 hat man damit beispielsweise

$$\delta_{ki}\det\alpha = \sum_j \alpha_{ij}M_{kj} = \delta_{\sigma(k)\sigma(i)}\det\alpha' = \sum_j e^{i(\theta_i-\theta_j)}\alpha'_{\sigma(j)\sigma(i)}M'_{\sigma(j)\sigma(k)}, \tag{C.35}$$

und wir können folgern

$$M_{ij} = e^{-i(\theta_i-\theta_j)}M'_{\sigma(j)\sigma(i)}, \tag{C.36}$$

$$M'_{ij} = e^{-i(\theta_i-\theta_j)}M_{\sigma(j)\sigma(i)}, \tag{C.37}$$

$$N_{ij} = e^{-i(\theta_i-\theta_j)}N_{\sigma(j)\sigma(i)}. \tag{C.38}$$

Für die Matrixelemente von t findet man

$$<\varphi'_i|t|\varphi_j> = e^{i(\theta_i-\theta_j)} <\varphi'_{\sigma(j)}|t|\varphi_{\sigma(i)}>, \tag{C.39}$$

sowie für v

$$\begin{aligned} <\varphi'_i\varphi'_k|v|\varphi_j\varphi_l> &= <\varphi'_i\varphi'_k|\left[v(A\otimes A)^+(A\otimes A)|\varphi_j\varphi_l>\right] \\ &= \left(\left[<\varphi'_i\varphi'_k|(A\otimes A)^+\right] v^+ \left[(A\otimes A)|\varphi_j\varphi_l>\right]\right)^* \\ &= e^{i(\theta_i+\theta_k-\theta_j-\theta_l)} <\varphi'_{\sigma(j)}\varphi'_{\sigma(l)}|v|\varphi_{\sigma(i)}\varphi_{\sigma(k)}>\,. \end{aligned} \tag{C.40}$$

Dies bedeutet sowohl, daß

$$<\varphi'_i|U|\varphi_j> = e^{i(\theta_i-\theta_j)} <\varphi'_{\sigma(j)}|U|\varphi_{\sigma(i)}>, \tag{C.41}$$

und damit

$$<\varphi'_i|h|\varphi_j> = e^{i(\theta_i-\theta_j)} <\varphi'_{\sigma(j)}|h|\varphi_{\sigma(i)}>, \tag{C.42}$$

als auch, daß S folgendermaßen mit S' verbunden ist:

$$<\varphi'_i|S|\chi_j> = e^{i(\theta_i-\theta_j)} <\chi'_{\sigma(j)}|S'|\varphi_{\sigma(i)}>, \tag{C.43}$$

$$<\chi'_i|S'|\varphi_j> = e^{i(\theta_i-\theta_j)} <\varphi'_{\sigma(j)}|S|\chi_{\sigma(i)}>\,. \tag{C.44}$$

Damit lauten die Kommutatorbeziehungen für S, S' und U, h mit A

$$AU = U^+A\,,\; Ah = h^+A, \tag{C.45}$$

$$< \cdot|(AS|\chi_i >) =< \cdot|(S'^+A|\chi_i >), \tag{C.46}$$

$$(< \chi_i'|AS')|\cdot >= (< \chi_i'|S^+A)|\cdot >, \tag{C.47}$$

und analog zu Gl.C.23 können wir folgern

$$A\det\beta\left[\sum_j (E-h-\bar{\eta})B_{ji} + \sum_{jkl} < \varphi_k'|h|\varphi_l > B_{li}B_{jk}\right]|\varphi_j >=$$

$$e^{i\theta_i}\det\beta\left[\sum_j (E^*-h^+-\bar{\eta}^*)B_{ij}^* + \sum_{jkl} < \varphi_k'|h|\varphi_l >^* B_{lj}^*B_{\sigma(i)k}^*\right]|\varphi_j' > \;. \tag{C.48}$$

Hier erkennen wir, bis auf den Phasenfaktor, das Komplexkonjugierte der linken Seite der aus $\delta F/\delta|\varphi_{\sigma(i)} >$ stammenden Mean-Field-Gleichung. Indem man dasselbe für die rechte Seite wiederholt, zeigt man die Selbstkonsistenz des Ansatzes C.28. Es sei angemerkt, daß der Beweis sich vereinfacht, wenn man die diagonale Repräsentation des Kanalspinformalismus benutzt.

Es ist möglich, die Fälle C.1 oder C.27 zu verallgemeinern. Betrachten wir die Situation, bei der durch Anwendung eines unitären Operators P auf die χ_i bzw. χ_i' der durch diese Orbitale aufgespannte Raum nicht verlassen wird

$$P|\chi_i >= \sum_j L_{ji}|\chi_j > \text{ und } < \chi_i'|P^+ = \sum_j < \chi_j'|L_{ij}^+. \tag{C.49}$$

Dann ist folgender Ansatz selbstkonsistent

$$P|\varphi_i >= \sum_j L_{ji}|\varphi_j > \text{ und } < \varphi_i'|P^+ = \sum_j < \varphi_j'|L_{ij}^+, \tag{C.50}$$

oder anders gesagt

$$P\frac{\delta F}{\delta < \varphi_i'|} = \sum_j L_{ji}\frac{\delta F}{\delta < \varphi_j'|} = \frac{\delta F}{\delta(< \varphi_i'|P^+)}, \tag{C.51}$$

vorausgesetzt neben den Kommutatorrelationen C.3 gilt weiterhin

$$[\rho, L] = [\rho', L] = 0. \tag{C.52}$$

Ist Gl.C.51 erfüllt, so erzeugt P aus der i-ten Mean-Field-Gleichung die Gleichung für das transformierte Orbital, welches demzufolge nicht mehr eigens berechnet werden muß. Der Beweis beginnt mit der Feststellung, daß

$$\alpha_{ij} = \sum_{kl} L_{ik}^+L_{lj}\alpha_{kl}, \tag{C.53}$$

oder in Kurzschreibweise

$$\alpha = L^+\alpha L. \tag{C.54}$$

Dieses führt auf

$$[\alpha, L] = 0 \,\text{und}\, [\tilde{N}, L] = 0. \tag{C.55}$$

Dabei ist $\tilde{N}$ die Transponierte der Kofaktormatrix N_{ij}. Genauso findet man

$$[\tilde{M}, L] = 0 \,\text{und}\, [\tilde{M}', L] = 0. \tag{C.56}$$

Unter Benutzung von Gl.C.3 kommt man zu

$$\begin{aligned} U \det \alpha &= \sum_{kl} < \cdot\varphi_k' |v| \cdot \varphi_l > N_{kl} \\ &= P^+ \left(\sum_{kl} \sum_{mn} L_{kn}^+ L_{ml} < \cdot\varphi_k' |v| \cdot \varphi_l > N_{kl} \right) P, \end{aligned} \tag{C.57}$$

und mit Hilfe von Gl.C.55

$$U = P^+ \left((\det \alpha)^{-1} \sum_{mn} N_{nm} < \cdot\varphi_n' |v| \cdot \varphi_m > \right) P = P^+ U P. \tag{C.58}$$

Damit kann man die folgenden Beziehungen auflisten

$$[U, P] = 0\,, \; [S, P] = [S', P] = 0 \text{ und } [h, P] = 0, \tag{C.59}$$

oder auch

$$[\bar{U}, L] = 0\,, \; [\bar{S}, L] = [\bar{S}', L] = 0\,, \text{ und}\, [\bar{h}, L] = 0. \tag{C.60}$$

$\bar{U}$, $\bar{S}$, $\bar{S}'$ und $\bar{h}$ sind dabei als die Matrizen $\bar{U}_{ij} =< \varphi_i' |U| \varphi_j >$ etc. definiert. Damit ist der Beweis von Gl.C.51 einfach: Für den Anteil aus Gleichung 1.80 schreibt sich die linke Seite der Gl.C.51 als

$$\begin{aligned} &(\det \beta) \sum_j \left[(E - h - \bar{\eta}) (LB)_{ji} + \left(LB\bar{h}B \right)_{ji} \right] |\varphi_j > \\ &= (\det \beta) \sum_j \left[(E - h - \bar{\eta}) (BL)_{ji} + \left(B\bar{h}BL \right)_{ji} \right] |\varphi_j >, \end{aligned} \tag{C.61}$$

worin man die rechte Seite von Gl.C.51 erkennt.

Die gleiche Verallgemeinerung kann für antiunitäre Transformationen erhalten werden. Auf der anderen Seite ermöglicht es die Invarianz von Slaterdeterminanten unter linearen Transformationen u der Orbitale mit $\det u = 1$, Orbitale $u\chi_i$ so auszuwählen, daß sich dafür Gl.C.49 in Gl.C.1 transformiert. Die Bedingungen C.3, C.4 bedeuten, daß L eine Blockstruktur besitzt

$$\text{a)} \begin{pmatrix} l_1 & 0 \\ 0 & l_2 \end{pmatrix} \text{ oder b)} \begin{pmatrix} 0 & l_1 \\ l_2 & 0 \end{pmatrix}, \tag{C.62}$$

während u auf Typ a) beschränkt ist, da die χ_i und χ_i''s nur partiell antisymmetrisiert sind. Bei unitären Matrizen L, l_1 and l_2 existiert eine ebenfalls unitäre Matrix, die jene diagonalisiert. Nimmt man diese Matrix als u, so erscheint Gl.C.49 in der Form der Gl.C.1, mit $e^{i\theta_i}$ als den Eigenwerten. Für den Typ a) erhält man $\sigma(i) = i$, für Typ b) hat man $\sigma^2(i) = i$, wobei $\sigma(i)$ und i sich auf verschiedene Fragmente beziehen. Bei Berechnungen von $\mathcal{G}$ anstelle von ΔT mit Hilfe der TIMF sind dieselben Überlegungen gültig, man kann dabei aber natürlich auf die Bedingungen C.4 bzw. C.30 verzichten.

Literaturverzeichnis

[1] Bohm, D., Pines, D.: Phys. Rev. **92**, 609 (1953)

[2] Baranger, M.: Phys. Rev. **120**, 957 (1960)

[3] Brown, G.E.; Evans, J.A., Thouless, D.J.: Nucl. Phys. **24**, 1 (1961)

[4] Rowe, D.J.: Nuclear Collective Motion. London: Methuen 1970

[5] Eisenberg, J.M., Greiner, W,: Microscopic Theory of the Nucleus. Amsterdam: North–Holland 1972

[6] Griffin, J.J., Wheeler, J.A,: Phys. Rev. **108**, 311 (1957)

[7] Jancovici, B., Schiff, D.H.: Nucl. Phys. **58**, 678 (1964)

[8] Brink, D.M.; Weiguny, A.: Phys. Lett. B**26**, (1968)

[9] Brink, D.M.; Weiguny, A.: Nucl. Phys. A**120**, 59 (1968)

[10] Garbaczewski, P.: Phys. Rep. **36**, 65 (1978)

[11] Ring, P., Schuck, P.: The Nuclear Many–Body Problem. New York: Springer 1980

[12] Kümmel, H., Lührmann, K.H., Zabolitzky, J.G.: Phys. Rep. **36**, 1 (1978)

[13] Arponen, J.: Ann. Phys. (N.Y.) **151**, 311 (1983)

[14] Yang, S.D., Heyer, J., Kuo, T.T.S.: Nucl. Phys. A**448**, 420 (1986)

[15] Taylor, J.R.: Scattering Theory. New York: Wiley 1972

[16] Joachain, J.: Quantum Collision Theory. Amsterdam: North Holland 1975

[17] Goldberger, M.L., Watson, K.M.: Collision Theory. New York: Wiley sec.ed. 1965

[18] Roman, P., Advanced Quantum Theory. Massachusetts: Addison Wesley 1965

[19] Rodberg, L.S., Thaler, R.M.: Introduction to Quantum Theory of Scattering. New York: Academic Press 1967

[20] Giraud, B.G., Mekideche, F., Zepalowa, M.L.: Variational Approach of Faddeev Equations (unveröffentlicht)

[21] Giraud, B.G., Nagarajan, M.A.: J. Phys. G**4**, 1739 (1978)

[22] Giraud, B.G., Nagarajan, M.A.: J. Physique(Paris) **41**, 477 (1980)

[23] Nagarajan, M.A., Giraud, B.G.: Phys. Rev. C**27**, 232 (1983)

[24] Giraud, B.G., Nagarajan, M.A.: Phys. Rev. C**28**, 1918 (1983)

[25] Amiot, P., Giraud, B.G., Nagarajan, M.A.: Phys. Rev. C**29**, 2374 (1984)

[26] Giraud, B.G., Nagarajan, M.A., Thompson, I.J.: Ann. Phys. (N.Y.) **152**, 475 (1984)

[27] Giraud, B.G.: Nucl. Phys. A**428**, 285c (1984)

[28] Giraud, B.G., Nagarajan, M.A.: Phys. Rev. A**31**, 51 (1985)

[29] Abe, Y., Giraud, B.G.: Nucl. Phys. A**440**, 311 (1985)

[30] Giraud, B.G., Contribution to the Meeting „Dynamics of Wave packets in Molecular and Nuclear Physics“, Anvers, July 2–4, 1985

[31] Giraud, B.G.: Physica D**19**, 112 (1986)

[32] Giraud, B.G., Nagarajan, M.A., Noble, C.J.: Phys. Rev. A**34**, 1034 (1986)

[33] Giraud, B.G., Nagarajan, M.A., Weiguny, A.: Phys. Rev. C**35**, 55 (1987)

[34] Giraud, B.G., Kessal, S., Liu, L.C.: Phys. Rev. C**35**, 1844 (1987)

[35] Giraud, B.G., Kessal, S., Weiguny, A,: J. Math. Phys. **29**, 2084, 1988

[36] Kessal, S., Giraud, B.G.: Phys. Rev. A**39**, 5014 (1989)

[37] Giraud, B.G.: A new theory of collisions, in Recent Progress in Many–Body Theories, Vol. 2, Y. Avishai (ed.). New York: Plenum Press 1990

[38] Lemm, J., Weiguny, A., Giraud, B.G.: Z. Phys. A**336**, 179 (1990)

[39] Giraud, B.G., Nagarajan, M.A.: Ann. Phys. (N.Y.)**212**, 260 (1991)

[40] Demkov, Y.N.: Variational Principles in the Theory of Collisions. Oxford: Pergamon Press 1963

[41] Goeke, K., Cusson, R.Y., Grümmer, F., Reinhard, P.–G., Reinhardt, H.: Prog. Theor. Phys. [Suppl.] **74 & 75**, 33 (1983)

[42] Goeke, K.: Die zeitabhängige Hartree–Fock–Theorie für kollektive Kernbewegungen. Universität Bonn: Habilitationsschrift 1976

[43] Reinhardt, H.: Nucl. Phys. A**390**, 70 (1982)

[44] Wheeler, J.A.: Phys. Rev. **52**, 1083, 1107 (1937)

[45] Wildermuth, K., Tang, Y.C.: A Unified Theory of the Nucleus. Braunschweig: Vieweg 1977

[46] Tang, Y.C., Le Mere, M., Thompson, D.R.: Phys. Rep. **47**, 167 (1978)

[47] Lemm, J.: Ein Vergleich des Mean–Field Ansatzes mit einer exakten Rechnung beim Vierkörperproblem. WWU Münster: Diplomarbeit 1989

[48] Wierling, A.: Ansätze zur Beschreibung der elastischen α–α–Streuung mit der zeitunabhängigen Mean–Field Theorie. WWU Münster: Diplomarbeit 1992

[49] Messiah, A.: Quantenmechanik, Bd. 2. Berlin: de Gruyter 2te Aufl. 1985

[50] Newton, R.G.: Scattering Theory of Waves and Particles. New York: Springer 1982

[51] Austern, N.: Direct Nuclear Reactions. New York: Wiley 1970

[52] Wierling, A., Giraud, B.G., Mekideche, F., Horiuchi, H., Maruyama, T., Ohnishi, A., Lemm, J.C., Weiguny, A.: demnächst in Z. Phys. A

[53] Koecher, M.: Lineare Algebra und analytische Geometrie. Berlin: Springer 1985

[54] Giraud, B.G., Mekideche, F.: J. Phys. G**17**, 1871 (1991)

[55] Hill, D.L., Wheeler, J.A.: Phys. Rev. **89**, 1102 (1953)

[56] Griffin, J., Wheeler, J.A.: Phys. Rev. **108**, 311 (1957)

[57] Wong, C.W.: Phys. Rep. **15**, 283 (1975)

[58] Friedrich, H.: Phys. Rep. **74**, 209 (1981)

[59] Giraud, B.G., Lemm, J., Weiguny, A., Wierling, A.: Z. Phys. A **343**, 249 (1992)

[60] Kessal, S., Giraud, B.G.: Phys. Rev. C**35**, 1252 (1987)

[61] Blaizot, J.–P., Ripka, G.: Quantum Theory of Finite Systems. Cambridge, Massachusetts: MIT Press 1986

[62] Balian, R., Brezin, E.: Nuove Cim. **64**, 37 (1969)

[63] Balian, R., De Dominicis, C., Itzykson, I,: Nucl. Phys. **67**, 609 (1965)

[64] Bloch; C., Messiah, A.: Nucl. Phys. **39**, 95 (1962)

[65] Thouless, D.J.: Nucl. Phys. **21**, 225 (1960)

[66] Thouless, D.J.: Nucl. Phys. **22**, 78 (1961)

[67] Lemmer, R.H., Vénéroni, M.: Phys. Rev. **170**, 883 (1968)

[68] Krewald, S., Klemt, V., Speth, J., Faessler, A.: Nucl. Phys. A**281**, 166 (1977)

[69] Shigehara, T., Shimizu, K., Arima, A.: Nucl. Phys. A**492**, 388 (1989)

[70] Takayanagi, K., Shimizu, K., Arima. A.: Nucl. Phys. A**477**, 205 (1988)

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Insbesondere danke ich Herrn Prof. Dr. A. Weiguny für die Betreuung der Arbeit, die anregenden Diskussionen und die angenehme Arbeitsatmosphäre. Herrn Dr. B. Giraud bin ich zu Dank verpflichtet für seinen Vorschlag, eine RPA für die TIMF zu versuchen, und für zahlreiche ergiebige Diskussionen während seiner Besuche in Münster oder meiner Besuche im CEN Saclay.

Vor allem meiner Frau Anja Gruner–Lemm sei gedankt für ihre liebevolle Unterstützung und ihre Bereitschaft, unseren beiden Kindern, Marius und Julia, in der Zeit häufiger Abwesenheit des Vaters auch diesen mit zu ersetzen.

Es verbleibt noch meinen Eltern Rolf und Friederun Lemm zu danken, ohne deren Unterstützung meine Ausbildung in dieser Form nicht möglich gewesen wäre.

Die numerischen Rechnungen sind mit den Rechenanlagen der Westfälischen Wilhelms–Universität ausgeführt worden.