

Zeitunabhängige Mean-Field-Theorie
für die Vielteilchenresolvente
über die Pfadintegraldarstellung
des Zeitentwicklungsoperators

Als Diplomarbeit im November 1996 vorgelegt von
Joerg Uhlig

Westfälische Wilhelms-Universität Münster
Institut für Theoretische Physik I
Wilhelm-Klemm-Straße 9
48149 Münster

Zeitunabhängige Mean-Field-Theorie
für die Vielteilchenresolvente
über die Pfadintegraldarstellung
des Zeitentwicklungsoperators

Als Diplomarbeit im November 1996 vorgelegt von
Joerg Uhlig

Westfälische-Wilhelms-Universität Münster
Institut für Theoretische Physik I
Wilhelm-Klemm-Straße 9
48149 Münster

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Vorstellung der zeitunabhängigen Mean-Field Methode (TIMF)	5
1.1 Bedeutung der Resolvente	5
1.2 Inhomogene Version der TIMF	7
1.3 Homogene Version der TIMF	11
1.4 Nichtthermitische Random-Phase-Approximation (IRPA) als Korrektur zur TIMF	13
2 Pfadintegralbeschreibung von quantenmechanischen Vielteilchensystemen	17
2.1 Darstellung des Zeitentwicklungsoperators	17
2.2 Mean-Field-Approximation für Pfadintegrale	22
2.3 Entwicklung des Pfadintegrals um ein beliebiges Mean-Field	28
3 TIMF in Dichtematrizen	33
3.1 Nichtthermitische Dichtematrizen	33
3.2 Homogene Version in Dichtematrizen	35
3.3 Inhomogene Version in Dichtematrizen	38
4 1. Herleitung der TIMF aus Pfadintegraldarstellung: homogene Version	40
4.1 Darstellung der Resolvente	40
4.2 Stationäre Phasen-Approximation (SPA) im statischen Grenzfall . . .	43
4.3 Gaußsche Näherung (1. Teil)	48
4.4 Gaußsche Näherung (2. Teil)	53
5 2. Herleitung der TIMF aus Pfadintegraldarstellung: inhomogene Version	63
5.1 Abbildung der Vielteilchenresolvente auf ein Produkt von Einteilchenoperatoren	63
5.2 SPA zu Pfad- und Energie-Integralen	66
5.3 SPA zu Zeitintegralen	69
Schlußbemerkung	73

A Spektraler Zugang zur TIMF	75
Literaturverzeichnis	79

Einleitung

Unter Vielteilchentheorie versteht man die mathematische Beschreibung von untereinander wechselwirkenden Teilchen, die in einem endlichen quantenmechanischen System zusammengefaßt werden können. Beispiele hierfür sind Atomkerne, wo Nukleonen als identische Teilchen wechselwirken, aber auch elektrische Leiter und Supraleiter aus dem Bereich der Festkörperphysik mit Elektronen bzw. Quasiteilchen als elementaren Konstituenten.

Für die verschiedenen Vielteilchen-Probleme werden abstrahierende Modelle aufgestellt, bei deren Behandlung man in der Regel auf Approximationen des exakten Problems angewiesen ist. Als schlagkräftige Näherungsstrategie hat sich dabei die Mean-Field-Approximation herausgestellt. Hierbei werden die Wechselwirkungen eines einzelnen Teilchens mit allen übrigen durch ein effektives Einteilchen-Feld simuliert. Für Nukleonen-Systeme gilt die Faustregel, daß bis zu einer Anregungsenergie von maximal 10 MeV pro Nukleon direkte Zweierstöße von Nukleonen aufgrund des Pauli-Prinzips und seiner abstoßenden Wirkung weitgehend auszuschließen sind, d.h. für kleinere Energie scheint die Mean-Field-Annahme gerechtfertigt zu sein.

Für die Darstellung von quantenmechanischen Streuprozessen, in denen die Streupartner selbst als Vielteilchensysteme aufzufassen sind, gibt es nun zwei äquivalente Zugänge:

- i)* In der *zeitabhängigen* Formulierung, die mit dem Zeitentwicklungsoperator arbeitet, wird das quantenmechanische Vielteilchen-System zu jedem Zeitpunkt 'beobachtet', d.h. die Entwicklung vom Eingangskanal-Zustand bei t_i in den Ausgangskanal-Zustand bei t_f wird zeitlich verfolgt, und es können direkt zeitabhängige Erwartungswerte von Observablen berechnet werden. Physikalisch interessante Größen, wie zum Beispiel die Matrixelemente des S-Operators, werden im Grenzwert $t_i \rightarrow -\infty, t_f \rightarrow \infty$ erhalten.

Die Mean-Field-Approximation zu dieser Darstellung führt auf das zeitabhängige Mean-Field-Verfahren (TDMF) [1]. Dieses unterscheidet sich von der zeitabhängigen Hartree-Fock-Theorie (TDHF) dadurch, daß nicht ein einfaches zeitliches Anfangswertproblem vorliegt, bei dem man das System sich von einer Zeit t_i an weiterentwickeln läßt, sondern daß zum Mean-Field sämtliche Zeiten $t \in [t_i; t_f]$ beitragen, indem sich der Ausgangskanal in der Zeit 'rückwärts' und der Eingangskanal 'vorwärts' entwickelt (Bilokalität in der Zeit).

Es gibt mehrere mathematische Zugänge zur Ableitung dieses Verfahrens: Die natürliche Erweiterung der statischen HF-Rechnung auf zeitabhängige Slaterdeterminanten [2] oder der Ansatz eines zeitabhängigen Funktionals,

welches unter Annahme von Slaterdeterminanten als Versuchsfunktionen stationär gemacht wird [3]. Der elegantere Weg ist die Darstellung des Zeitentwicklungsoperators als Pfadintegral. Dort wird mit Hilfe der Stationären Phasen-Approximation (SPA) in erster Ordnung die TDMF reproduziert. Quadratische Korrekturen erfassen Teilchen-Loch-Korrelationen im Rahmen der Random-Phase-Approximation (RPA) [3, 4].

Probleme tauchen allerdings auf, wenn S-Matrixelemente betrachtet werden. Durch den selbstkonsistenten Charakter der Mean-Field-Gleichungen und der Bilokalität in der Zeit ist eine Konvergenz der genäherten Operatoren für $t \rightarrow \pm\infty$ nicht gewährleistet. Reinhardt bietet in [5] diesbezüglich einen Lösungsvorschlag an.

- ii) Bei *zeitunabhängiger* Beschreibung von Streuprozessen ist die Zeit auf Kosten der Energie eliminiert worden. Dies geschieht durch Fouriertransformation der zeitabhängigen Darstellungen. Die Aufgaben des Zeitentwicklungsoperators übernimmt hier der Greensche-Operator; somit hat man mit Vielteilchen-Inversions-Problemen und damit inhomogenen Gleichungen zu tun (statt Diagonalisierungs-Problem und Eigenwertgleichung bei der Hartree-Fock-Rechnung).

In der zeitunabhängigen Mean-Field-Theorie (TIMF) [6, 7, 8] wird unter Gebrauch eines Variationsverfahrens eine Einschränkung des Variationsraums auf Slaterdeterminanten als Näherung durchgeführt. Dieses führt auf Inversionsgleichungen im Einteilchenraum unter Vorgabe von Orbitalen der Ein- und Ausgangskanäle (inhomogene Version). In [8] wird gezeigt, daß dieses äquivalent zu einer *nicht*-hermiteschen Hartree-Fock-Rechnung ist (homogene Version). Gleichzeitig wird dort angegeben, wie Verbesserungen des Mean-Field-Ansatzes möglich sind: Es gelingt eine Verallgemeinerung auf eine nichthermitesche Random-Phase-Approximation (IRPA). Die Ergebnisse der TIMF-Theorie wurden für Probleme mit wenigen Teilchen unter Annahme von einfachen Wechselwirkungen mit den exakten (numerisch berechneten) Lösungen verglichen und eine akzeptable Übereinstimmung festgestellt [9, 10].

Wegen der Nichtlinearität beider Approximationsansätze können die TIMF-Gleichungen nicht mehr durch Fouriertransformation aus den TDMF-Gleichungen erhalten werden. Ziel der Arbeit ist es nun, eine Verbindung zwischen TDMF und TIMF herzustellen und sie damit vergleichbar zu machen.

Der Lösungsansatz besteht darin, die Vielteilchenresolvente mittels exakter Energie-Zeit-Fouriertransformation auf den Zeitentwicklungsoperator abzubilden und über ein Pfadintegral darzustellen {1}. Indem für das Funktionalintegral nur nach *statischen* Stationaritätspunkten gesucht wird, erfolgt wieder eine Zurückführung auf die zeitunabhängigen Mean-Field-Gleichungen, obwohl man eigentlich in der Lage wäre, die TDMF-Theorie darzustellen {2}. Unter Ausnutzung von Nichteindeutigkeiten bei der Pfadintegraldefinition gelangt man zu den erwünschten TIMF-Gleichungen. Wenn man quadratische Korrekturen zur SPA ausrechnen will, muß man wieder zeitliche Variationen um die Mean-Field-Lösung (Quantenfluktuationen) zulassen; man wird auf RPA-Energieverschiebungen geführt, die mit den Ergebnis-

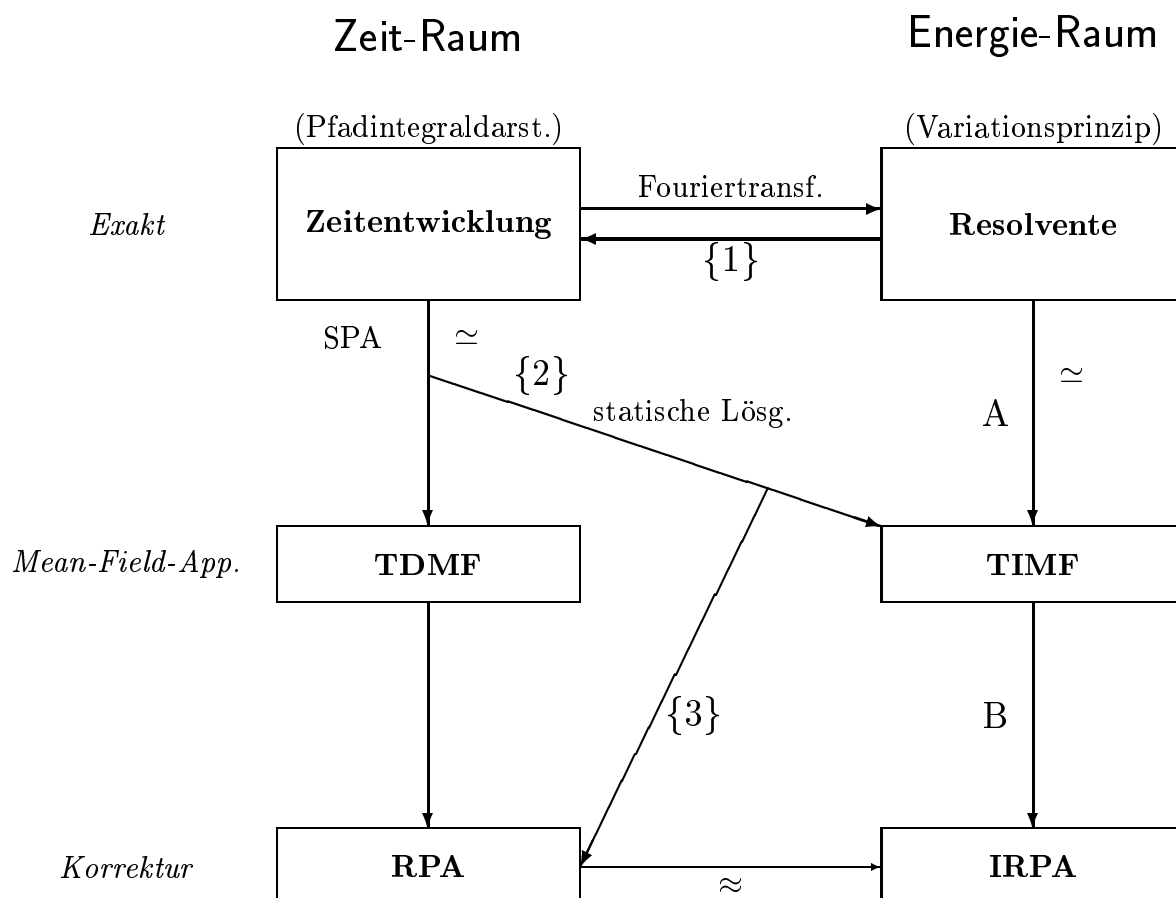


Abbildung: Ableitung der TIMF durch zeitabhängige Darstellung. In der Arbeit wird der 'Weg' 1,2,3 statt A,B gegangen

sen der IRPA verglichen werden können {3}. Die Arbeit ist wie folgt strukturiert: In den ersten beiden Kapiteln werden die Grundlagen für die Arbeit geliefert. So werden in Kapitel 1 der Ansatz und die wichtigsten Ergebnisse der TIMF-Theorie erläutert und in Kapitel 2 die große Flexibilität beim Einsatz von Pfadintegralen in der Quantenmechanik vorgestellt. Die Ableitung der TIMF-Theorie in einer etwas anderen Darstellung wird in Kapitel 3 präsentiert. Dabei wird die Äquivalenz der TIMF in homogener Version zur nichthermiteschen Hartree-Fock-Rechnung ausgenutzt, um in natürlicher Weise zu einer Darstellung in Einteilchen-Dichtematrizen zu gelangen. In Kapitel 4 erfolgt dann ein 'Vorschlag', die TIMF-Gleichungen und teilweise die Ergebnisse der IRPA anhand des im Diagramm zurückgelegten Weges 1-2-3 nachzuvollziehen. Hierbei ist das Ziel die homogene Version der TIMF (Variationsfunktionen werden über Eigenwert-Gleichungen eingeführt). Es wird dabei die Chance ausgenutzt, mittels Pfadintegraleinführung auch ein nicht-hermisches Mean-Field zu erzeugen. In Kapitel 5 wird eine alternative Ableitung geliefert. Die Idee hierfür brachte eine Veröffentlichung von Giraud, Hahn [11], in der die TIMF-Gleichungen über eine spektrale Integraldarstellung der Variationsfunktionen des TIMF-Funktional hergeleitet wurden (im Anhang A wird der Einbau von Pfadintegralen in diesen Ansatz dargestellt). Es gelingt mit ähnlicher Vorgehensweise, die

Vielteilchenresolvente auf ein Produkt von Einteilchenresolventen unter Einführung von Energie- und Pfadintegralen abzubilden. Bei gleichzeitiger SPA dieser Integrale und unter Ausnutzung von inhomogenen Einteilchengleichungen werden die TIMF-Gleichungen und -Matrixelemente erhalten.

Kapitel 1

Vorstellung der zeitunabhängigen Mean-Field Methode (TIMF)

1.1 Bedeutung der Resolvente

Der Greensche Operator (Resolvente) ist definiert als inverser Operator zu $(E - \mathcal{H})$:

$$\mathcal{G}(E) \equiv \frac{1}{E - \mathcal{H}} \quad ; \quad \mathcal{H} = \mathcal{T} + \mathcal{V} \quad ; \quad (1.1)$$

wobei für E auch komplexe Energie-Werte zugelassen werden. Für einen hermiteschen Hamiltonoperator \mathcal{H} liegen die Eigenwerte auf der reellen Achse, somit ist der Operator \mathcal{G} beschränkt und damit wohldefiniert für $\text{Im}E \neq 0$. Eine spektrale Darstellung der Resolvente erhält man, indem man \mathcal{G} in Eigenfunktionen von \mathcal{H} ausdrückt. Ein typisches Spektrum eines in der Streutheorie auftretenden Hamiltonoperators [12] besitzt Bindungszustände (diskrete Pole) mit Eigenenergien kleiner Null und einen Schnitt auf der positiven reellen Achse zur Beschreibung von ungebundenen Zuständen (Streukanäle). Entwicklung in diese diskreten und kontinuierlichen Eigenzustände

$$\mathcal{H} | \Psi_n \rangle = E_n | \Psi_n \rangle \quad \text{bzw.} \quad \mathcal{H} | \Psi'_{E'} \rangle = E' | \Psi'_{E'} \rangle \quad (1.2)$$

unter Ausnutzung der Vollständigkeit liefert:

$$\mathcal{G}(E) = \sum_n \frac{|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|}{E - E_n} + \int \frac{|\Psi'_{E'}\rangle\langle\Psi'_{E'}|}{E - E'} dE' \quad . \quad (1.3)$$

Die gewünschten physikalischen Matrixelemente von \mathcal{G} zwischen beliebigen Vielteilchenzuständen χ, χ'

$$D(E) = \langle \chi' | \frac{1}{E - \mathcal{H}} | \chi \rangle = \sum_n \frac{\langle \chi' | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \chi \rangle}{E - E_n} + \int \frac{\langle \chi' | \Psi'_{E'} \rangle \langle \Psi'_{E'} | \chi \rangle}{E - E'} dE' \quad ; \quad E \in \mathbb{C} \quad (1.4)$$

werden im Limes $\text{Im}E \rightarrow 0$ erhalten. Anhand von (1.4) ist zu sehen, daß die Matrixelemente für alle $E \in \mathbb{C} \setminus \{E_n \mid n \in \mathbb{N}\}$ als in E analytische Funktion angesehen

werden können. Dabei wird vorausgesetzt, daß die Überlappe $\langle \chi' | \Psi_n \rangle$ bzw. $\langle \Psi_n | \chi \rangle$ nicht verschwinden (hebbare Singularitäten). Die Polstellen $E = E_n$ fallen mit dem Spektrum von \mathcal{H} zusammen, wobei dann die Residuen der Pole $\langle \chi' | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \chi \rangle$ betragen. Man sagt auch $\mathcal{G}(E)$ hat bei den Eigenenergien E_n von \mathcal{H} den Projektionsoperator auf das n -te Energieniveau $|\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|$ als Residuum (bzw. bei Entartung den Projektor auf den Unterraum der Eigenfunktionen). Mit (1.3) und (1.4) steht fest, daß die vollständige Kenntnis über den Greenschen-Operator völlig äquivalent zum Eigenwertproblem (1.2) ist, da in beiden Gleichungen Eigenwert *und* Eigenfunktionen bekannt sein müssen.

Der prinzipielle Ansatz beim Arbeiten mit der Resolvente ist eine zeitunabhängige Beschreibung von physikalischen Problemen:

- i)* So können in der zeitunabhängigen Streutheorie wichtige Größen mit Hilfe des Greenschen-Operators und seinem 'komplexerem Verwandten' – dem T-Operator – dargestellt werden. Beispiel hierfür ist der Møller-Operator und damit die Matrixelemente der S-Matrix.
- ii)* Mit Methoden der zeitunabhängigen Störungstheorie können Näherungen für die Lippmann-Schwinger-Gleichung $\mathcal{G}(E) = \mathcal{G}^0(E) + \mathcal{G}(E)\mathcal{V}\mathcal{G}^0(E)$ mit $\mathcal{G}^0 = (E - \mathcal{T})^{-1}$ in Ordnungen der 'Störung' \mathcal{V} angegeben werden.
- iii)* Um zu Aussagen über zeitabhängige Phänomene zu gelangen, muß $\mathcal{G}(E)$ wie üblich einer Energie-Zeit-Fouriertransformation unterzogen werden. So läßt sich der Zeitentwicklungsoperator erhalten als:

$$\theta(T)e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathcal{H}-i\kappa)T} = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}ET} \frac{1}{E - \mathcal{H} + i\kappa} dE \quad (1.5)$$

mit $\kappa > 0$ infinitesimal.

Mit Gleichung (1.5) können dann z.B. Übergangsamplituden bzw. Zerfallswahrscheinlichkeiten ausgerechnet werden [13]. Die Pfadintegraldarstellung des Zeitentwicklungsoperators $e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}T}$ bei inverser Transformation und verschiedene Näherungen hierfür werden einen Schwerpunkt in dieser Arbeit einnehmen, um die exakte Resolvente und das dadurch gegebene Vielteilchenproblem zu approximieren.

Mittels einer von Giraud und Nagarajan entwickelten Variationsmethode [6] gelingt es, die Matrixelemente der Vielteilchenresolvente genähert zu berechnen. Hierbei sind χ, χ' von außen vorgegebene, quadratintegrale N -Teilchenzustände, und für \mathcal{H} wird ein Hamiltonoperator mit kinetischem Anteil und Zweiteilchenwechselwirkung angenommen:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N t_i + \sum_{i<j=1}^N v_{ij} \quad (1.6)$$

bzw. in Formulierung der 2. Quantisierung

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha\gamma} (\alpha | t | \gamma) a_{\alpha}^{\dagger} a_{\gamma} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} (\alpha\beta | v | \gamma\delta) a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\delta} a_{\gamma} \quad (1.7)$$

mit *nicht*-antisymmetrischen Matrixelementen $(\alpha\beta | v | \gamma\delta)$ und Darstellung in willkürlicher Fock-Raum-Basis. Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren erfüllen dabei die bekannten Fermionen-Antivertauschungsrelationen

$$[a_\alpha; a_\gamma]_+ = 0 \quad ; \quad [a_\alpha^\dagger; a_\gamma^\dagger]_+ = 0 \quad \text{und} \quad [a_\alpha; a_\gamma^\dagger]_+ = \delta_{\alpha\gamma} \quad . \quad (1.8)$$

Es gibt nun zwei verschiedene Zugänge zur TIMF-Theorie, welche sich durch die zugrunde liegenden Funktionale, deren stationäre Punkte gesucht werden, unterscheiden.

- Bei der inhomogenen Version wird die Gesamtenergie E von außen fixiert vorgegeben. Die dazugehörigen Funktionale führen bei Mean-Field-Näherung auf Inversion eines Einteilchenoperators. Die Matrixelemente der Vielteilchen-resolvente $D(E)$ sind als stationärer Wert des genäherten Funktionals eine Funktion der exakten Energie E .
- Bei der homogenen Version liegt ein verallgemeinertes Ritzsches Funktional mit nichthermischem Hamiltonoperator zugrunde. Naturgemäß führen die zugehörigen Stationaritätsgleichungen bei Mean-Field-Näherung auf Eigenwertgleichungen im Einteilchenraum. Als Ergebnis erhält man eine approximierte Gesamtenergie $E(D)$ als Funktion eines fixierten Wertes für die Matrixelemente D .

1.2 Inhomogene Version der TIMF

Für die beiden in einem Paar unabhängiger Versuchsfunktionen Ψ, Ψ' gegebenen Funktionale

$$F[\Psi, \Psi'] = \langle \chi' | \Psi \rangle + \langle \Psi' | \chi \rangle - \langle \Psi' | E - \mathcal{H} | \Psi \rangle \quad (\text{additive Variante}) \quad (1.9)$$

bzw.

$$F'[\Psi, \Psi'] = \frac{\langle \Psi' | \chi \rangle \langle \chi' | \Psi \rangle}{\langle \Psi' | E - \mathcal{H} | \Psi \rangle} \quad (\text{multiplikative Variante}) \quad (1.10)$$

wird Stationarität unter uneingeschränkter Variation von Ψ und Ψ' genau dann erreicht, wenn die Funktionalableitungen bezüglich der Versuchsfunktionen gleichzeitig verschwinden:

$$0 \stackrel{!}{=} \frac{\delta F}{\delta | \Psi \rangle} = \langle \chi' | - \langle \Psi' | (E - \mathcal{H}) \quad (1.11)$$

$$0 \stackrel{!}{=} \frac{\delta F}{\delta \langle \Psi' |} = | \chi \rangle - (E - \mathcal{H}) | \Psi \rangle \quad (1.12)$$

bzw.

$$0 \stackrel{!}{=} \frac{\delta F'}{\delta | \Psi \rangle} = \frac{\langle \Psi' | E - \mathcal{H} | \Psi \rangle}{\langle \chi' | \Psi \rangle} \langle \chi' | - \langle \Psi' | (E - \mathcal{H}) \quad (1.13)$$

$$0 \stackrel{!}{=} \frac{\delta F'}{\delta \langle \Psi' |} = \frac{\langle \Psi' | E - \mathcal{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi' | \chi \rangle} | \chi \rangle - (E - \mathcal{H}) | \Psi \rangle \quad . \quad (1.14)$$

Werden die Lösungen Ψ, Ψ' des Inversionsproblems der Sattelpunktgleichungen wieder in das Funktional F (bzw. F') eingesetzt, so erhält man die gewünschten *exakten* Matrixelemente von $(E - \mathcal{H})^{-1}$:

$$F_{stat} = F'_{stat} = \langle \chi' | \frac{1}{E - \mathcal{H}} | \chi \rangle = D(E) \quad . \quad (1.15)$$

Hierbei liegen die Vorzüge des multiplikativen Funktionals gegenüber dem additiven in der Invarianz unter Umnormierung der Lösungen von (1.13, 1.14). Außerdem gelingt mittels des Funktionals F' die Umschreibung der inhomogenen Theorie auf die homogene Version (siehe unten).

Das Problem bei der Suche nach Lösungen von (1.11, 1.12, 1.13, 1.14) liegt in der Inversion auf dem N -Teilchen-Niveau: Das Prinzip der folgenden Näherung ist, die exakte Inversion im N -Teilchenraum auf eine approximierte Inversion im Einteilchenraum (bzw. auf Eigenwertgleichungen im Einteilchenraum) zurückzuführen.

Zur zeitunabhängigen Mean-Field-Näherung (TIMF) gelangt man, indem man den Variationsraum der Versuchsfunktionen Ψ, Ψ' auf faktorisierte Wellenfunktionen (reine Produktzustände oder auch Slaterdeterminanten) einschränkt, und die Stationaritätsgleichungen in diesem Raum löst [8]. Die gleiche Annahme wird für die Kanalzustände χ, χ' gemacht. Letzteres beinhaltet keine Einschränkung des Problems, da nach vollzogener TIMF-Näherung beliebige physikalische Kanalzustände durch Superposition der Slaterdeterminanten (oder Produktzustände) erzeugt werden können (Vollständigkeit!). Indem man fordert, daß Ψ, Ψ' aus N Teilchen konstruierte Slaterdeterminanten sind, berücksichtigt man im Folgenden zumindest die Pauli-Korrelationen für ununterscheidbare Fermionen; d.h. es wird allen durch die erzwungene Antisymmetrisierung erzeugten quantenmechanischen Effekten Rechnung getragen.

N -Teilchen Slaterdeterminanten können durch Anwendung des Antisymmetrisierers $\mathcal{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P}} (-1)^{\mathcal{P}} \mathcal{P}$ auf einfache Produkte der Orbitale erzeugt werden:

$$| \Psi \rangle \equiv | \Phi \rangle = \sqrt{N!} \mathcal{A} \prod_{i=1}^N | \varphi_i \rangle \quad ; \quad \langle \Psi' | \equiv \langle \Phi' | = \sqrt{N!} \left(\prod_{i=1}^N \langle \varphi'_i | \right) \mathcal{A} \quad (1.16)$$

$$| \chi \rangle = \sqrt{N!} \mathcal{A} \prod_{i=1}^N | \chi_i \rangle \quad ; \quad \langle \chi' | = \sqrt{N!} \left(\prod_{i=1}^N \langle \chi'_i | \right) \mathcal{A} \quad . \quad (1.17)$$

Setzt man diese antisymmetrisierten Zustände in das obige Funktional F (bzw. F') ein, so ergeben die Stationaritätsbedingungen bezüglich *aller* Orbitale φ_i, φ'_i :

$$0 = \frac{\delta F}{\delta | \varphi_i \rangle} \quad \text{und} \quad 0 = \frac{\delta F}{\delta \langle \varphi'_i |} \quad , \quad i = 1, \dots, N \quad (1.18)$$

und nach leichter, aber 'unangenehmer' Rechnung mit Überlappmatrizen und deren Kofaktoren die inhomogenen Einteilchengleichungen (TIMF-Gleichungen):

$$\langle \varphi'_i | (\eta_i - h) = \lambda'_i \langle \chi'_i | \quad \text{und} \quad (\eta_i - h) | \varphi_i \rangle = \lambda_i | \chi_i \rangle \quad ; \quad i = 1, \dots, N \quad . \quad (1.19)$$

Dabei sind

$$\langle \cdot | h | \cdot \rangle = \langle \cdot | t | \cdot \rangle + \sum_{k=1}^N \frac{\langle \cdot | \varphi'_k | v | \cdot | \varphi_k \rangle}{\langle \varphi'_k | \varphi_k \rangle} \quad ; \quad h = t + U \quad (1.20)$$

ein nichthermitischer, vom Teilchenindex i unabhängiger Einteilchen-Hamiltonoperator mit dem Mean-Field-Potential U ,

$$\eta_i = E - \sum_{k=1}^N \frac{\langle \varphi'_k | t + \frac{U}{2} | \varphi_k \rangle}{\langle \varphi'_k | \varphi_k \rangle} + \frac{\langle \varphi'_i | t + U | \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} = E - \frac{\langle \Phi' | \mathcal{H} | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} + \epsilon_i \quad (1.21)$$

komplexe Selbstenergie des i -ten Teilchens im Mean-Field Potential, und

$$\lambda_i = \frac{\langle \Phi' | \chi \rangle \langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle \langle \varphi'_i | \chi_i \rangle} \quad ; \quad \lambda'_i = \frac{\langle \chi' | \Phi \rangle \langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle \langle \chi'_i | \varphi_i \rangle} \quad (1.22)$$

legen die Normen und die Phasen der zuzuberechnenden φ_i, φ'_i fest.

Es wurde in der Rechnung die Freiheit ausgenutzt, daß mittels unitärer Transformation innerhalb der endlichen Orbitalmengen der vier Slaterdeterminanten χ, χ', Φ, Φ' deren Überlappmatrizen und die Matrixelemente des Mean-Field Hamiltonoperators im Lochraum ($i, j = 1, \dots, N$) diagonalisiert werden können

$$\alpha_{ij} \equiv \langle \varphi'_i | \chi_j \rangle = \delta_{ij} m_i \quad ; \quad \alpha'_{ij} \equiv \langle \chi'_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij} m'_i \quad (1.23)$$

$$\beta_{ij} \equiv \langle \varphi'_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij} n_i \quad ; \quad h_{ij} \equiv \langle \varphi'_i | h | \varphi_j \rangle = \delta_{ij} \epsilon_i n_i \quad , \quad (1.24)$$

ohne den stationären Wert des Funktionals (1.9, 1.10) zu verändern.

Wie bei einer Mean-Field-Näherung zu erwarten, müssen die Gleichungen (1.19) selbstkonsistent gelöst werden, wobei E und χ_i, χ'_i durch die betrachtete Reaktion oder Zerfall vorgegeben sind.

Das lineare (eindeutige) Problem der Inversion im N -Teilchenraum (1.11, 1.12) ist also auf ein nichtlineares (nichteindeutiges) Invertieren im Einteilchenraum (1.19) approximativ abgebildet worden. In der Mean-Field-Näherung wird der Propagator D dann zu einem Produkt von Matrixelementen der Einteilchenresolventen $g_i = (\eta_i - h)^{-1}$:

Der stationäre Wert des additiven Funktionals F kann dann auf folgende Form gebracht werden, in der alle Summanden aus (1.9) denselben Wert annehmen:

$$\begin{aligned} D_{TIMF} &= \prod_{i=1}^N \langle \varphi'_i | \chi_i \rangle = \prod_{i=1}^N \lambda'_i \langle \chi'_i | \frac{1}{\eta_i - h} | \chi_i \rangle \\ &= \prod_{i=1}^N \lambda'_i \langle \chi'_i | g_i | \chi_i \rangle = \det \alpha \end{aligned} \quad (1.25)$$

bzw.

$$\begin{aligned} D_{TIMF} &= \prod_{i=1}^N \langle \chi'_i | \varphi_i \rangle = \prod_{i=1}^N \lambda_i \langle \chi'_i | \frac{1}{\eta_i - h} | \chi_i \rangle \\ &= \prod_{i=1}^N \lambda_i \langle \chi'_i | g_i | \chi_i \rangle = \det \alpha' \quad . \end{aligned} \quad (1.26)$$

Beim normunabhängigen multiplikativen Funktional F' ergibt sich:

$$D_{TIMF} = \frac{\langle \chi' | \Phi \rangle \langle \Phi' | \chi \rangle}{\bar{\eta} \langle \Phi' | \Phi \rangle} = \frac{\det \alpha' \det \alpha}{\bar{\eta} \det \beta} \quad (1.27)$$

mit der Abkürzung

$$\bar{\eta} \equiv \eta_i - \epsilon_i = E - \frac{\langle \Phi' | \mathcal{H} | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} \quad (1.28)$$

Dabei müssen hier die Orbitale von Φ , Φ' anstatt der TIMF-Gleichungen (1.19) nur die vereinfachten Gleichungen

$$\langle \varphi'_i | (\eta_i - h) = \langle \chi'_i | \quad \text{und} \quad (\eta_i - h) | \varphi_i \rangle = | \chi_i \rangle \quad ; \quad i = 1, \dots, N \quad (1.29)$$

erfüllen, denn η_i und h sind ebenfalls invariant unter Umnormierung von φ_i , φ'_i ! Eine elegantere Darstellung der Theorie ergibt sich über die Ausnutzung der Vorzüge der 2. Quantisierung [8]. Alle Unannehmlichkeiten, die beim Rechnen mit Slaterdeterminanten entstehen können, werden auf das Arbeiten mit Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren abgewälzt. Die Beschreibung in 2. Quantisierung ist unverzichtbar für den Einbau von Teilchen-Loch-Korrelationen im Rahmen der Random-Phase-Approximation (RPA) und die unten eingeführte Biorthogonalbasis des Fock-Raums wird ebenfalls für den Pfadintegralzugang zur TIMF benötigt.

Um die vier N -Teilchen-Slaterdeterminanten χ , χ' , Φ , Φ' aufzubauen, benutzt man nach [8] drei verknüpfte Biorthogonalsysteme:

Die Erzeuger und Vernichter der einzelnen Orbitalmengen sind in folgender Tabelle dargestellt:

Lochvakuum	$ \chi \rangle$	$\langle \Phi' $	$ \Phi \rangle$	$\langle \chi' $
Lochorbitale: $i \leq N$	$a_{\chi_i}^\dagger$	$a_{\chi_i} = a_i$	$a_i^\dagger = a_{\chi'_i}^\dagger$	$a_{\chi'_i}$
Teilchenorbitale: $n > N$	$a_{\chi_n}^\dagger$	$a_{\chi_n} \neq a_n$	$a_n^\dagger \neq a_{\chi'_n}^\dagger$	$a_{\chi'_n}$

– wobei durch einen senkrechten Strich getrennte Erzeuger und Vernichter jeweils biorthogonal¹ sind. Die antisymmetrischen Zustände werden durch Wirkung der entsprechenden Erzeuger bzw. Vernichter auf das Fermionenvakuum generiert:

$$| \Phi \rangle = \left(\prod_{i=1}^N a_i^\dagger \right) | 0 \rangle \quad ; \quad \langle \Phi' | = \langle 0 | \left(\prod_{i=1}^N a_i \right) \quad (1.32)$$

$$| \chi \rangle = \left(\prod_{i=1}^N a_{\chi_i}^\dagger \right) | 0 \rangle \quad ; \quad \langle \chi' | = \langle 0 | \left(\prod_{i=1}^N a_{\chi'_i} \right) \quad (1.33)$$

¹Biorthogonalität bedeutet, daß die Überlappmatrizen im *gesamten* Hilbertraum diagonal sind, was man zusammenfassend in den Vertauschungsrelationen

$$\text{z.B.} \quad [a_p; a_q^\dagger]_+ = \langle \varphi'_p | \varphi_q \rangle = \delta_{pq} \langle \varphi'_p | \varphi_p \rangle \quad \forall p, q \in \text{Teilchen- und Lochraum} \quad (1.30)$$

ausdrücken kann. Der Einsoperator des Einteilchen-Hilbert-Raums läßt sich dann darstellen als:

$$\underline{1} = \sum_p \frac{| \varphi_p \rangle \langle \varphi'_p |}{\langle \varphi'_p | \varphi_p \rangle} \quad (1.31)$$

In [8] ist die i.a. nicht-unitäre, kanonische Transformation², welche auf die in der Tabelle angegebenen Quasiteilchenoperatoren führt, explizit angegeben. Die Eigenschaft, daß die Operatoren a_p, a_q^\dagger die Zustände Φ und Φ' als Rechts- bzw. Linksvakuum besitzen, läßt sich in den bekannten Annihilierungseigenschaften zusammenfassen:

$$a_i^\dagger | \Phi \rangle = 0 \quad ; \quad a_n | \Phi \rangle = 0 \quad ; \quad \langle \Phi' | a_i = 0 \quad ; \quad \langle \Phi' | a_n^\dagger = 0 \quad , \quad (1.34)$$

wobei i Loch- und n Teilchenorbitale indizieren. Zur Motivation in der obigen Basis zu arbeiten, kann man sagen, daß die in den TIMF-Funktionalen auftretenden Matrixelemente

$$\langle \Phi' | \dots | \Phi \rangle \quad , \quad \langle \chi' | \dots | \Phi \rangle \quad \text{und} \quad \langle \Phi' | \dots | \chi \rangle \quad (1.35)$$

leicht nach Darstellung der Operatoren in dieser Basis mittels Wick-Theorem [3] ausgewertet werden können, da die normalgeordneten Produkte verschwinden und nur Kontraktionen effektiv beitragen.

Bei der Festlegung von $a_{\chi_i} = a_i$ bzw. $a_i^\dagger = a_{\chi'_i}^\dagger$ wurde die bereits oben erwähnte mögliche Diagonalisierung der Überlappmatrizen α, α' durch unitäre Transformation der Loch-Orbitale χ_i und χ'_i ausgenutzt. Nach Darstellung des Hamiltonoperators \mathcal{H} in dieser Basis gelingt die Variationsableitung analog zu (1.18) mittels Thouless-Parametrisierung für Slaterdeterminanten. Die dabei auftretenden Matrixelemente der Form (1.35) können durch Rechnung mit Kontraktionen (bzw. Diagrammregeln) bewältigt werden. Als Ergebnis erhält man die obigen TIMF-Gleichungen (1.19, 1.20, 1.21, 1.22).

1.3 Homogene Version der TIMF

Mittels eines eleganten Tricks kann man das Inversionsproblem bei den Sattelpunktgleichungen des TIMF-Funktional (1.11-1.14) in ein Eigenwertproblem auf dem N -Teilchenniveau umwandeln. Indem man die inhomogenen Seiten der Gleichung (1.11, 1.12) mit dem stationären Wert (1.15) der TIMF-Funktionale F, F' (1.9, 1.10) erweitert ($F'_{stat} = F_{stat} = \langle \chi' | \Psi \rangle = \langle \Psi' | \chi \rangle = D$)

$$1 = \frac{\langle \chi' | \Psi \rangle}{D} = \frac{\langle \Psi' | \chi \rangle}{D} \quad , \quad (1.36)$$

und sich die Größe $D \equiv \frac{1}{\Delta}$ fixiert denkt, erhält man die beiden adjungierten Gleichungen

$$(E - \mathcal{H}) | \Psi \rangle = \Delta | \chi \rangle \langle \chi' | \Psi \rangle \quad , \quad \langle \Psi' | (E - \mathcal{H}) = \Delta \langle \Psi' | \chi \rangle \langle \chi' | \quad (1.37)$$

²Dadurch, daß $\langle \Phi' |$ im allgemeinen nicht der zu $| \Phi \rangle$ hermitisch adjungierte Zustand ist (bzw. $\langle \chi' |$ nicht zu $| \chi \rangle$), bleiben bei der erforderlichen Transformation für die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren zwar die gewöhnlichen Fermionen-Vertauschungsrelationen (1.8) erhalten, aber a_i^\dagger und a_i sind i.a. nur kanonisch konjugiert – und nicht hermitisch konjugiert, wie bei unitären Transformationen.

Die Gleichungen (1.37) sind immer noch Stationaritätsgleichungen des bezüglich Ψ , Ψ' norminvarianten multiplikativen Funktionals. Sie können auch als Eigenwertgleichung gelesen werden:

$$(E - \mathcal{H}') | \Psi \rangle = 0 \quad ; \quad \langle \Psi' | (E - \mathcal{H}') = 0 \quad (1.38)$$

mit

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H}'(\Delta) = \mathcal{H} + \Delta | \chi \rangle \langle \chi' | \quad . \quad (1.39)$$

Die Versuchsfunktionen $| \Psi \rangle$ und $\langle \Psi' |$ sind also Rechts- bzw. Links-Eigenzustände eines nichthermiteschen N -Teilchen Ersatz-Hamiltonoperators \mathcal{H}' zur Gesamt-Energie E . In der Sprache der 2. Quantisierung bekommt \mathcal{H}' bei der Wahl der oben genannten Biorthogonalbasis die Gestalt:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}' = & \sum_{\alpha\beta} \frac{\langle \varphi'_\alpha | t | \varphi_\beta \rangle}{n_\alpha n_\beta} a_\alpha^\dagger a_\beta + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \frac{\langle \varphi'_\alpha \varphi'_\beta | v | \varphi_\gamma \varphi_\delta \rangle}{n_\alpha n_\beta n_\gamma n_\delta} a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\delta a_\gamma \\ & + \Delta a_{\chi_1}^\dagger \dots a_{\chi_N}^\dagger a_{\chi'_N} \dots a_{\chi'_1} \quad . \end{aligned} \quad (1.40)$$

Insgesamt kann man sagen, daß D (also Δ) und E gegenüber der inhomogenen Funktionalversion die Rollen getauscht haben; denn hier wird jetzt bei Fixierung von D und gleichzeitiger Variation von Ψ bzw. Ψ' in (1.36) nach Lösungen $E = E(D)$ in (1.37) gesucht – und nicht umgekehrt (1.15). Sucht man einen bestimmten Wert $D = D(E)$, so muß man Δ solange verschieben, bis man die gewünschte Energie E als Eigenwert von $\mathcal{H}'(\Delta)$ erhält.

Lösungen von (1.38) werden in völliger Analogie zum hermiteschen Eigenwertproblem mittels Stationarität des Ritz-Funktional

$$E[\Psi, \Psi'] = \langle \Psi' | E - \mathcal{H}' | \Psi \rangle \quad (1.41)$$

gefunden. Hartree-Fock-Rechnung als Mean-Field-Näherung (also Einschränkung der Variation auf die Slaterdeterminanten Φ , Φ') führt dann in natürlicher Weise auf Einteilchen-Eigenwertgleichungen, die sich bei näherem Hinsehen als die Ergebnisse der inhomogenen Version (1.19) herausstellen:

$$(\eta_i - h') | \varphi_i \rangle = 0 \quad , \quad \langle \varphi'_i | (\eta_i - h') = 0 \quad , \quad i = 1, \dots, N \quad (1.42)$$

Dabei sind:

i) h' ein nichthermitescher Hartree-Fock-Operator

$$h' = h + \Delta \frac{\det \alpha \det \alpha'}{\det \beta} \sum_{i=1}^N \frac{n_i}{m_i m'_i} | \chi_i \rangle \langle \chi'_i | \quad , \quad (1.43)$$

der sich um einen separablen Einteilchenterm vom Mean-Field-Hamiltonoperator (1.20) unterscheidet;

ii) η_i die komplexen Eigenenergien, die durch Diagonalisierung von h' und (1.42) berechnet werden können. Im Lochraum kommt man im Hinblick auf (1.27) mit der Definition

$$\bar{\eta}(\Delta) \equiv \Delta \frac{\det \alpha \det \alpha'}{\det \beta} = \frac{\det \alpha \det \alpha'}{D \det \beta} \quad (1.44)$$

und (1.43) zu dem Ergebnis:

$$\eta_i = \epsilon_i + \bar{\eta}(\Delta) \stackrel{!}{=} E - \frac{\langle \Phi' | \mathcal{H}(\Delta) | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} + \frac{\langle \varphi'_i | h(\Delta) | \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} . \quad (1.45)$$

Zur genäherten Gesamtenergie E_{TIMF} als Funktion von D gelangt man, indem man (1.45) auflöst:

$$E_{TIMF}(\Delta) = \bar{\eta}(\Delta) + \frac{\langle \Phi' | \mathcal{H} | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} = \frac{\langle \Phi' | \mathcal{H}' | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} . \quad (1.46)$$

Bei diagonalen Überlappmatrizen α, α' entsprechen diese Gleichungen offensichtlich, bis auf den oben erwähnten Rollentausch, den Mean-Field-Gleichungen der inhomogenen Version (1.19). Eine wichtige Konsequenz der Hartree-Fock-Gleichungen (1.42) ist, daß die Polstellen der TIMF-Resolvente D , an denen $\Delta = 0$ ist, mit den Eigenenergien der HF-Gleichung für $h'(\Delta = 0) = h$ zusammenfallen.

Durch die homogene Formulierung (1.41, 1.38) des TIMF-Funktional sind die Voraussetzungen geschaffen, eine Beschreibung der Theorie in Einteilchen-Dichtematrizen zu vollziehen. Diese wird im Kapitel 2 vorgestellt.

1.4 Nichtthermitische Random-Phase-Approximation (IRPA) als Korrektur zur TIMF

Durch die Analogie der homogenen TIMF-Version zur 'klassischen' Hartree-Fock-Rechnung wird klar, wie man zur Verbesserung der Theorie über die einfache Mean-Field Näherung hinausgehen kann: 1995 hat Lemm gezeigt, wie Teilchen-Loch-Korrelationen für den Grundzustand (Random-Phase-Approximation) in die bestehende Theorie eingebaut werden können, indem man die hermitische RPA in natürlicher Weise für den nichtthermitischen Ersatzhamiltonoperator \mathcal{H}' erweitert [8, 14]. Diese Ergebnisse seien hier kurz vorgestellt.

Bei der Methode der Bewegungsgleichungen werden formal Operatoren $\mathcal{Q}_\nu, \mathcal{Q}_\nu^\dagger$ eingeführt, deren Wirkungsweise darin besteht, angeregte Zustände der exakten Lösung der Stationaritätsgleichung (1.38) der homogenen Version zu erzeugen:

$$\mathcal{Q}_\nu^\dagger | \Psi \rangle = | \Psi_\nu \rangle \quad \text{mit} \quad \mathcal{H}' | \Psi_\nu \rangle = E_\nu | \Psi_\nu \rangle \quad (1.47)$$

bzw.

$$\langle \Psi' | \mathcal{Q}_\nu = \langle \Psi'_\nu | \quad \text{mit} \quad \langle \Psi'_\nu | \mathcal{H}' = E_\nu \langle \Psi'_\nu | \quad (1.48)$$

oder als Kommutatorbeziehung

$$[\mathcal{H}'; \mathcal{Q}_\nu^\dagger]_- = (E_\nu - E) \mathcal{Q}_\nu^\dagger \quad , \quad [\mathcal{Q}_\nu; \mathcal{H}']_- = (E_\nu - E) \mathcal{Q}_\nu \quad , \quad (1.49)$$

wobei $\langle \Psi' |$ als Linksvakuum von \mathcal{Q}_ν^\dagger und $| \Psi \rangle$ als Rechtsvakuum von \mathcal{Q}_ν vorausgesetzt wird:

$$\mathcal{Q}_\nu | \Psi \rangle = 0 \quad , \quad \langle \Psi' | \mathcal{Q}_\nu^\dagger = 0 \quad . \quad (1.50)$$

Dabei sind \mathcal{Q}_ν^\dagger und \mathcal{Q}_ν im allgemeinen nur kanonisch konjugiert und nicht hermitisch adjungiert. Für die so definierten Erzeuger und Vernichter macht man den approximativen Ansatz:

$$\mathcal{Q}_\nu^\dagger = \sum_{nj} \left(X_{nj}^\nu a_n^\dagger a_j - Y_{nj}^\dagger a_j^\dagger a_n \right) \quad , \quad \mathcal{Q}_\nu = \sum_{nj} \left(U_{nj}^\nu a_j^\dagger a_n - V_{nj}^\nu a_n^\dagger a_j \right) \quad , \quad (1.51)$$

wobei im Folgenden j, i Loch- und n, m Teilchenorbitale bezeichnen und $a_\alpha^\dagger, a_\beta$ für die oben angegebene Biorthogonalbasis (S.10) stehen sollen. $|\Psi_\nu\rangle$ soll also eine Superposition von Zuständen sein, die sich durch 1-Teilchen-1-Loch-Erzeugung gewichtet mit der Amplitude X_{nj}^ν (bzw. deren Vernichtung – gewichtet mit Y_{nj}^ν) aus dem exakten Eigenzustand $|\Psi\rangle$ zusammensetzt (analog für $\langle\Psi'_\nu|$ bezüglich $\langle\Psi'|$). Als RPA-Referenz-Zustände werden jetzt die Rechts- und Linksvakua der *genäherten* Operatoren (1.51) definiert:

$$\mathcal{Q}_\nu |RPA\rangle = 0 \quad , \quad \langle RPA' | \mathcal{Q}_\nu^\dagger = 0 \quad . \quad (1.52)$$

Indem man – wie üblich – die exakten Zustände Ψ und Ψ' durch die Lösungen der nichthermitischen Hartree-Fock-Gleichungen (TIMF-Lösungen) $|\Phi\rangle, \langle\Phi'|$ ersetzt (Quasi-Boson-Approximation[2]), kann der RPA-Ansatz (1.51) zusammen mit den Operator-Gleichungen (1.49) in eine verallgemeinerte RPA-Eigenwertgleichung zur Bestimmung von (X^ν, Y^ν) bzw (V^ν, U^ν) und deren Eigenfrequenzen $\omega_\nu \equiv (E_\nu - E)$ umgewandelt werden:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^\nu \\ Y^\nu \end{pmatrix} = \omega_\nu \begin{pmatrix} X^\nu \\ -Y^\nu \end{pmatrix} \quad (1.53)$$

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V^\nu \\ U^\nu \end{pmatrix} = \omega_\nu \begin{pmatrix} V^\nu \\ -U^\nu \end{pmatrix} \quad (1.54)$$

mit den Blockmatrizen (bei Bi-Normierung der Basis $n_\alpha = \langle\varphi'_\alpha | \varphi_\alpha\rangle = 1$ für *alle* Orbitale)

$$\begin{aligned} A_{minj} &= \langle\Phi' | [a_i^\dagger a_m; [\mathcal{H}'; a_n^\dagger a_j]_-]_- | \Phi \rangle \\ &= \delta_{ij} \delta_{mn} (\eta_m - \eta_i) - \delta_{ij} \bar{\eta} \sum_{l=1}^N \frac{\langle\varphi'_m | \chi_l \rangle \langle\chi'_l | \varphi_n \rangle}{m_l m'_l} \\ &\quad + \langle\varphi'_m \varphi'_j | v | \varphi_i \varphi_n \rangle + \bar{\eta} \frac{\langle\varphi'_m | \chi_i \rangle \langle\chi'_j | \varphi_n \rangle}{m_i m'_j} \quad , \end{aligned} \quad (1.55)$$

$$\begin{aligned} B_{minj} &= - \langle\Phi' | [a_i^\dagger a_m, [\mathcal{H}'; a_j^\dagger a_n]_-]_- | \Phi \rangle \\ &= \langle\varphi'_m \varphi'_n | v | \varphi_i \varphi_j \rangle + \bar{\eta} \frac{\langle\varphi'_m \varphi'_n | \chi_i \chi_j \rangle}{m_i m_j} \quad , \end{aligned} \quad (1.56)$$

$$\begin{aligned} C_{minj} &= - \langle\Phi' | [a_m^\dagger a_i; [\mathcal{H}'; a_n^\dagger a_j]_-]_- | \Phi \rangle \\ &= \langle\varphi'_i \varphi'_j | v | \varphi_m \varphi_n \rangle + \bar{\eta} \frac{\langle\chi'_i \chi'_j | \varphi_m \varphi_n \rangle}{m'_i m'_j} \quad , \end{aligned} \quad (1.57)$$

$$D_{minj} = \langle\Phi' | [a_m^\dagger a_i; [\mathcal{H}'; a_j^\dagger a_n]_-]_- | \Phi \rangle = A_{njmi} \quad . \quad (1.58)$$

Der Ausdruck 'Quasi-Boson-Approximation' kommt daher, daß der Austausch der Zustände $|RPA\rangle \rightarrow |TIMF\rangle$ aufgrund der Vakuum-Eigenschaften bezüglich der Operatoren a_α^\dagger und a_β exakt wäre, wenn die Teilchen-Loch-Erzeuger und -Vernichter

$$\mathcal{B}_{im} \equiv a_i^\dagger a_m \quad \text{und} \quad \mathcal{B}_{nj}^\dagger \equiv a_n^\dagger a_j \quad (1.59)$$

bosonische Vertauschungsrelationen

$$[\mathcal{B}_{im}; \mathcal{B}_{nj}]_- = [\mathcal{B}_{im}^\dagger; \mathcal{B}_{nj}^\dagger]_- = 0 \quad \text{und} \quad [\mathcal{B}_{im}; \mathcal{B}_{nj}^\dagger]_- = \delta_{ij} \delta_{mn} \quad (1.60)$$

erfüllen würden, so wie es zwischen den TIMF-Zuständen der Fall ist:

$$\langle \Phi' | [a_i^\dagger a_m; a_n^\dagger a_j]_- | \Phi \rangle = \delta_{ij} \delta_{mn} \quad (1.61)$$

Insgesamt liegt in der Näherung eine Entwicklung eines Fermionen-Erzeuger-Vernichter-Paares in Operatoren mit bosonischen Vertauschungsrelationen vor, wobei nur die erste Ordnung mitgenommen wird [2].

Gegenüber der hermiteschen RPA ist die Symmetrie der Matrix $\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$ 'geschwächt'. Statt der gewohnten Hermitizität von A bei $D=A$ und der Matrixsymmetrie von B bei $C=B^*$, gelten hier nur die Transpositions-Relationen

$$A = \tilde{D} \quad ; \quad B = \tilde{B} \quad \text{und} \quad C = \tilde{C} \quad . \quad (1.62)$$

Die Eigenwertgleichung (1.53, 1.54) entspricht einer Diagonalisierung der Matrix

$$Z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \quad (1.63)$$

durch Ähnlichkeitstranformation mittels der Matrix T mit

$$T^{-1} = \begin{pmatrix} X^\nu & V^\nu \\ Y^\nu & U^\nu \end{pmatrix} \quad , \quad (1.64)$$

also:

$$TZT^{-1} = \Omega \quad (1.65)$$

mit der Diagonalmatrix Ω der ω_ν -Frequenzen.

In [8] wird gezeigt, daß T zu einer (i.a. nicht-unitären) kanonischen, bosonischen Transformation korrespondiert, da die Matrix T die erforderliche Bedingung [3]

$$T \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \tilde{T} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.66)$$

erfüllt. Dieses ist auf die Eigenschaft zurückzuführen, daß die Eigenwerte der Matrix Z sich zu Paaren $(\omega_\nu; -\omega_\nu)$ zusammenfassen lassen (obwohl sie nicht – wie im hermiteschen Fall – reell sind). Also kann Ω auf die Form

$$\Omega = \begin{pmatrix} \omega & 0 \\ 0 & -\omega \end{pmatrix} \quad (1.67)$$

mit Diagonalmatrix ω gebracht werden. Mit (1.65, 1.66, 1.67) ist das Eigenwertproblem (1.53, 1.54) nach [2] völlig äquivalent zu einer Diagonalisierung eines in bosonischen Operatoren (1.60) quadratischen Hamiltonoperators \mathcal{H}^B :

$$\mathcal{H}^B \equiv E_{TIMF} + \sum_{minj} A_{minj} \mathcal{B}_{mi}^\dagger \mathcal{B}_{jn} + \frac{1}{2} \sum_{minj} (B_{minj} \mathcal{B}_{mi}^\dagger \mathcal{B}_{nj}^\dagger + C_{minj} \mathcal{B}_{im} \mathcal{B}_{jn}) \quad (1.68)$$

mittels kanonischer (d.h. vertauschungsrelationenerhaltender) Transformation T zu den obigen RPA-Operatoren \mathcal{Q}_ν , \mathcal{Q}_ν^\dagger . Diese führt auf

$$\mathcal{H}^B = E_{TIMF} + \mathcal{Q}^\dagger \omega \mathcal{Q} + \frac{1}{2} \text{Tr} \omega - \frac{1}{2} \text{Tr} A \quad (1.69)$$

mit dem Zeilenvektor $\mathcal{Q}^\dagger = (\mathcal{Q}_1^\dagger, \dots, \dots)$ und dem Spaltenvektor $\mathcal{Q} = \begin{pmatrix} \mathcal{Q}_1 \\ \vdots \end{pmatrix}$.

\mathcal{H}^B erzeugt harmonische Anregungen aus den TIMF-Zuständen Φ , Φ' , ohne deren Gesamtenergie zu verschieben. Als Energiekorrektur ΔE zur Energie $E_{TIMF}(D)$ (1.46) erhält man die Differenz des Erwartungswerts von \mathcal{H}^B zwischen den RPA-Zuständen (1.52) und den TIMF-Zuständen:

$$\Delta E = \langle RPA' | \mathcal{H}^B | RPA \rangle - \langle \Phi' | \mathcal{H}^B | \Phi \rangle = \frac{1}{2} \text{Tr} \omega - \frac{1}{2} \text{Tr} A. \quad (1.70)$$

Dabei wurden die Gleichung (1.52) und die Eigenschaft der Biorthogonalbasis von Seite 10 ausgenutzt.

Abschließend sei noch das Problem der Aufteilung der Eigenwerte in die Matrizen ω und $-\omega$ angesprochen: Dadurch, daß komplexe Frequenzen zu erwarten sind, besteht hier eine gewisse Willkür. Bei der hermiteschen RPA mit ihren reellen Frequenzen schlägt man alle positiven Frequenzen der Matrix ω zu; damit wird $\text{Tr} \omega$ betragsmäßig maximal. Für die Energiekorrektur ergibt sich [2]:

$$\frac{1}{2} \sum_{\omega_\nu > 0} \omega_\nu - \frac{1}{2} \text{Tr} A = - \sum_{\nu} \omega_\nu \sum_{mi} |Y_{mi}^\nu|^2 \quad (1.71)$$

(Also verschwindet für die Tamm-Dancoff-Approximation (TDA), bei der $Y_{mi}^\nu = 0$ gesetzt wird, die Korrektur, und $|RPA\rangle$ und $|TIMF\rangle$ fallen zusammen.) Bei der nichthermiteschen RPA sieht [8] verschiedene Auswahlkriterien für das Sortieren der Frequenzen vor. Bei den RPA-Ergebnissen, die auf quadratischer Korrektur der Stationären-Phasen-Approximation bei der Pfadintegral-Rechnung basieren (Kapitel 4), wird man auf eine Aufteilung geführt, in der alle ω_ν mit $\text{Im} \omega_\nu > 0$ (bzw. $\text{Re} \omega_\nu > 0$) der Matrix ω und mit $\text{Im} \omega_\nu < 0$ (bzw. $\text{Re} \omega_\nu < 0$) der Matrix $-\omega$ zugeordnet werden. Eigenwerte $\omega_\nu = 0$ bedürfen dabei einer Sonderbehandlung.

Kapitel 2

Pfadintegralbeschreibung von quantenmechanischen Vielteilchensystemen

In diesem Kapitel wird die Benutzung von Funktionalintegralmethoden zur Beschreibung wechselwirkender Vielteilchensystemen vorgestellt. Die Vorzüge in diesem Zugang liegen in der großen Flexibilität beim Umgang mit Pfadintegralen und der Möglichkeit, diese als 'Startpunkt' für Approximationen zu nutzen, welche gleichzeitig physikalische Interpretationen liefern. So ist die SPA als Mean-Field-Näherung als eine Art semiklassischer Grenzfall der exakten Quantenmechanik anzusehen. Näherungen höherer Ordnung können als Störungstheorie eingebaut werden und führen zu Quantenkorrekturen der Mean-Field-Lösung, wie zum Beispiel harmonische Anregungen (RPA).

2.1 Darstellung des Zeitentwicklungsoperators

Ein quantenmechanischer Übergang von einem Anfangszustand $|\chi\rangle$ zu einem Endzustand $\langle\chi'|\chi(t_f)\rangle$ wird über die Matrixelemente des Zeitentwicklungsoperators

$$\mathcal{U}(t_f, t_i) = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}(t_f-t_i)} \quad (2.1)$$

beschrieben, wobei hier \mathcal{H} als der zugrundeliegende Vielteilchen-Hamiltonoperator als zeitunabhängig angenommen wurde. Der Operator \mathcal{U} steuert die Zeitentwicklung, wenn das System sich zum Zeitpunkt t_i im Zustand χ befindet, zu einem Zustand $\chi(t_f)$ zum Zeitpunkt t_f :

$$|\chi(t_f)\rangle = \mathcal{U}(t_f, t_i) |\chi\rangle \quad (2.2)$$

Als Übergangsamplitude $\langle\chi'|\chi(t_f)\rangle$ erhält man also die Matrixelemente von (2.1)

$$\langle\chi'|\mathcal{U}(t_f, t_i)|\chi\rangle \quad (2.3)$$

und die Betragsquadrate $|\langle\chi'|\chi(t_f)\rangle|^2$ geben die Übergangswahrscheinlichkeiten an.

Ziel ist es, die Matrixelemente (2.3) approximativ anzugeben, wobei willkürliche von außen vorgegebene Kanalzustände χ, χ' zugrundeliegen. Der Hamiltonoperator \mathcal{H} wird bequemerweise in Form der 2. Quantisierung (1.7) beschrieben, da die Statistik der Fermionen dann bereits berücksichtigt ist. Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $a_\alpha^\dagger, a_\beta$ korrespondieren dabei vorerst zu einer beliebigen Fock-Raum-Basis.

Bei der Darstellung von Zeitentwicklungsoperatoren gibt es mehrere Möglichkeiten, Pfadintegrale einzuführen. Am geläufigsten sind die Zugänge mittels Hubbard-Stratonovich-Transformation [4, 15, 16], welche hier aus didaktischen Gründen vorerst benutzt werden, oder die Ausnutzung der Übereivollständigkeit von Slaterdeterminanten als Basis für den Hilbertraum [4]. Weiter unten wird eine andere Methode beschrieben, die auf einem erzeugenden Funktional beruht, welches die übrigen Ansätze – in Bezug auf die mathematische Flexibilität – bei weitem übertrifft. Die Motivation für das weitere Vorgehen ist, den Zweiteilchenwechselwirkungsterm von \mathcal{H} auf Kosten der Einführung eines Funktionalintegrals auf einen Einteilchenoperator abzubilden. Schlüssel hierfür ist die Gaußsche Operator-Identität (Hubbard-Stratonovich-Transformation)

$$e^{\pi \mathcal{W}^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\pi x^2 + 2\pi \mathcal{W}x} \quad , \quad (2.4)$$

welche für beschränkte Operatoren \mathcal{W} erfüllt ist.

Zwecks Anwendbarkeit empfiehlt es sich, den normalgeordneten Hamiltonoperator umzuschreiben und zu den neuen Operatoren

$$\rho_{\alpha\gamma} \equiv a_\alpha^\dagger a_\gamma \quad (2.5)$$

überzugehen:

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha\gamma} K'_{\alpha\gamma} \rho_{\alpha\gamma} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} v_{\alpha\beta\gamma\delta} \rho_{\alpha\gamma} \rho_{\beta\delta} \quad (2.6)$$

mit

$$K'_{\alpha\gamma} = t_{\alpha\gamma} - \frac{1}{2} \sum_{\beta} v_{\alpha\beta\beta\gamma} \quad (2.7)$$

und nicht-antisymmetrischen Matrixelementen

$$v_{\alpha\beta\gamma\delta} = (\alpha\beta | v | \gamma\delta) . \quad (2.8)$$

Dabei entsteht die unphysikalische Selbstwechselwirkung $\frac{1}{2} \sum_{\beta} v_{\alpha\beta\beta\gamma}$ durch die Vertauschungsrelationen (1.8). Der Übergang von den individuellen Teilchenoperatoren $a_\alpha^\dagger, a_\beta$ zu $\rho_{\alpha\gamma}$, welche offensichtlich auf Teilchenkorrelationen führen, ist rein intuitiv. Da man aber vor allem an kollektiven Eigenschaften des Vielteilchensystems interessiert ist, welche gerade durch die Zweiteilchenwechselwirkung gesteuert werden, ist dieses im Hinblick auf geeignete Näherungen nicht nur aus mathematischen Gründen sinnvoll. Die Anwendung des Gauß-'Tricks' (2.4) mit ρ als zu linearisierendem Operator macht deutlich, daß die Formulierung des Problems in 2. Quantisierung unerlässlich ist.

Durch Aufteilung des Zeitabschnitts $t_f - t_i$ in M Intervalle (M vorerst endlich) der

Länge $\epsilon = \frac{t_f - t_i}{M}$ erreicht man im Limes $\epsilon \rightarrow 0$ die Faktorisierung der e-Funktion des Zeitentwicklungsoperators in den in ρ linearen und quadratischen Term, obwohl die Operatoren \mathcal{V} und \mathcal{T} offensichtlich nicht kommutieren:

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\mathcal{H}} &= e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\left(\sum_{\alpha\beta} K'_{\alpha\beta}\rho_{\alpha\beta} + \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} v_{\alpha\beta\gamma\delta}\rho_{\alpha\gamma}\rho_{\beta\delta}\right)} \\ &\stackrel{\epsilon\rightarrow 0}{\approx} e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\sum_{\alpha\beta} K'_{\alpha\beta}\rho_{\alpha\beta}} e^{-\frac{i}{2\hbar}\epsilon\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} v_{\alpha\beta\gamma\delta}\rho_{\alpha\gamma}\rho_{\beta\delta}} \end{aligned} \quad (2.9)$$

Unter Ausnutzung des reellen Gauß-Integrals im mehrdimensionalen Fall bekommt (2.4) die Gestalt:

$$e^{\frac{1}{2}b\mathcal{A}^{-1}b} = \sqrt{\det \mathcal{A}} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^M \frac{dx_i}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x\mathcal{A}x + bx} \quad (2.10)$$

mit den gewöhnlichen Abkürzungen

$$x\mathcal{A}x = \sum_{i,j=1}^M x_i A_{ij} x_j \quad \text{und} \quad bx = \sum_{i=1}^M b_i x_i \quad (2.11)$$

und reeller symmetrischer Matrix \mathcal{A} . Die Konvergenz des Integrals ist nur gewährleistet, wenn \mathcal{A} positiv definit ist.

Nun kann die Linearisierung des 2. Faktors aus (2.9) vorgenommen werden¹:

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{2\hbar}\epsilon\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \rho_{\alpha\gamma} v_{\alpha\beta\gamma\delta} \rho_{\beta\delta}} &= \\ &\sqrt{\det \left(\frac{\epsilon}{\hbar} v_{\alpha\beta\gamma\delta}^{-1} \right)} \int \prod_{\alpha\gamma} \frac{d\tilde{\sigma}_{\alpha\gamma}}{\sqrt{2\pi i}} e^{\frac{i}{2\hbar}\epsilon\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \tilde{\sigma}_{\alpha\gamma} v_{\alpha\beta\gamma\delta}^{-1} \tilde{\sigma}_{\beta\delta} - \frac{i}{\hbar}\epsilon\sum_{\alpha\gamma} \tilde{\sigma}_{\alpha\gamma} \rho_{\alpha\gamma}} \end{aligned} \quad (2.12)$$

oder nach der Variablentransformation

$$\sigma_{\alpha\gamma} = \sum_{\beta\delta} v_{\alpha\beta\gamma\delta}^{-1} \tilde{\sigma}_{\beta\delta} \quad : \quad (2.13)$$

$$\sqrt{\det \left(\frac{\epsilon}{\hbar} v_{\alpha\beta\gamma\delta} \right)} \int \prod_{\alpha\gamma} \frac{d\sigma_{\alpha\gamma}}{\sqrt{2\pi i}} e^{\frac{i}{2\hbar}\epsilon\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sigma_{\alpha\gamma} v_{\alpha\beta\gamma\delta} \sigma_{\beta\delta} - \frac{i}{\hbar}\epsilon\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sigma_{\alpha\gamma} v_{\alpha\beta\gamma\delta} \rho_{\beta\delta}} \quad (2.14)$$

Dabei sind die Darstellungen (2.12) und (2.14) völlig äquivalent. Es wird diejenige gewählt, in der sich am bequemsten arbeiten läßt. Bei Gleichung (2.12) haben die Koordinaten $\tilde{\sigma}$ die Dimension des Potentials, während sich in (2.14) σ die Dichtverteilung der Teilchen widerspiegelt. Vollführt man den Schritt (2.12) für jeden der M Teilschritte (indiziert mit k), so ergibt sich für den gesamten Zeitentwicklungsoperator:

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}(t_f - t_i)} &= \frac{1}{\mathcal{N}(\epsilon)} \int \prod_{k=1}^M \prod_{\alpha\gamma} d\sigma_{\alpha\gamma}(k) e^{\frac{i}{2\hbar}\epsilon\sum_k \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sigma_{\alpha\gamma}(k) v_{\alpha\beta\gamma\delta} \sigma_{\beta\delta}(k)} \\ &\quad \times \prod_{k=1}^M e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon\sum_{\alpha\gamma} \left(K'_{\alpha\gamma} + \sum_{\beta\delta} \sigma_{\beta\delta}(k) v_{\beta\alpha\delta\gamma} \right) \rho_{\alpha\gamma}} \end{aligned} \quad (2.15)$$

¹Die obige Symmetrieforderung setzt nur voraus, daß \mathcal{V} unter Teilchenvertauschung invariant ist.

mit der Normierung des Hilfsintegrals

$$\frac{1}{\mathcal{N}(\epsilon)} = \prod_{k=1}^M \sqrt{\frac{\det\left(\frac{\epsilon}{\hbar} v_{\alpha\beta\gamma\delta}\right)}{\prod_{\alpha\gamma} 2\pi i}} \quad . \quad (2.16)$$

Es liegt nun auf der Hand, den Limes $M \rightarrow \infty$ (also $\epsilon \rightarrow 0$) durchzuführen, um so die endgültige infinitesimale Pfadintegral-Darstellung von (2.15) zu erhalten: Der Zeitindex k wird durch die kontinuierliche Variable t (bzw. ϵ durch dt) und die Summation über k durch das entsprechende Integral ($\epsilon \sum_{k=1}^M f(k) \rightarrow \int_{t_i}^{t_f} dt f(t)$) ersetzt:

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(t_f - t_i)} &= \frac{1}{\mathcal{N}} \int \prod_{\alpha\gamma} d\sigma_{\alpha\gamma}(t) e^{\frac{i}{2\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sigma_{\alpha\gamma}(t) v_{\alpha\beta\gamma\delta} \sigma_{\beta\delta}(t)} \\ &\quad \times \hat{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \sum_{\alpha\gamma} h_{\alpha\gamma}^{\sigma}(t) a_{\alpha}^{\dagger} a_{\gamma}} \end{aligned} \quad (2.17)$$

mit der Pfadintegralnormierung

$$\mathcal{N} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathcal{N}(\epsilon) = \int \prod_{\alpha\gamma} d\sigma_{\alpha\gamma}(t) e^{\frac{i}{2\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \sigma(t) v \sigma(t)} \quad . \quad (2.18)$$

Hierbei muß der Zeitordnungsoperator \hat{T} eingeführt werden, da die Operatoren der Exponentialreihe zu verschiedenen Zeiten i.a. nicht kommutieren.

$$[h^{\sigma(t)}; h^{\sigma(t')}] \neq 0 \quad , \quad t \neq t' \quad . \quad (2.19)$$

Für die Matricelemente des Zeitentwicklungsoperators ergibt sich insgesamt die Funktionalintegral-Darstellung

$$\langle \chi' | \mathcal{U}(t_f, t_i) | \chi \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \int D\sigma(t) e^{\frac{i}{2\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \sigma(t) v \sigma(t)} \langle \chi' | \mathcal{U}_{\sigma}(t_f, t_i) | \chi \rangle \quad (2.20)$$

mit den Abkürzungen

$$D\sigma(t) = \prod_{\alpha\gamma} d\sigma_{\alpha\gamma}(t) \quad , \quad \sigma(t) v \sigma(t) = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sigma_{\alpha\gamma}(t) v_{\alpha\beta\gamma\delta} \sigma_{\beta\delta}(t) \quad (2.21)$$

und dem vom Feld abhängigen Einteilchen-Zeitentwicklungsoperator

$$\mathcal{U}_{\sigma}(t_f, t_i) = \hat{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \sum_{\alpha\gamma} h_{\alpha\gamma}^{\sigma}(t) \rho_{\alpha\gamma}} \quad (2.22)$$

mit dem Hamiltonoperator in 2. Quantisierung

$$h^{\sigma}(t) = \sum_{\alpha\gamma} \left(K'_{\alpha\gamma} + \sum_{\beta\delta} \sigma_{\beta\delta}(t) v_{\beta\alpha\delta\gamma} \right) \rho_{\alpha\gamma} \quad . \quad (2.23)$$

Zur Interpretation von (2.20) läßt sich sagen, daß ein Vielteilchen-Zeitentwicklungsoperator mit zeitunabhängiger Zweiteilchenwechselwirkung äquivalent als Superposition von Einteilchen-Zeitentwicklungsoperatoren, welche das System durch einen

zeitabhängigen Hamiltonoperator in einem äußeren kollektiven Feld $\sigma(t)$ dirigieren, beschrieben werden kann. Dabei muß im funktionalen Sinn über alle möglichen Felder mit der Gaußgewichtung $e^{\frac{i}{\hbar} \int dt \sigma v \sigma}$ integriert (gemittelt) werden. Durch den Gauß-Trick (2.4) ist erreicht worden, daß die Feldoperatoren $\rho_{\alpha\gamma}$ nur noch linear im Exponenten auftreten. Dieses geschieht durch ein Pfadintegral, in dem dafür die Integrationsvariable in quadratischer Ordnung auftritt.

Alle kollektiven Eigenschaften des wechselwirkenden Systems sind jetzt in dem Hilfsfeld σ enthalten und können durch geeignete Näherungen erhalten werden. Es lohnt sich zu betonen, daß die Gleichung (2.20) exakt ist. Eine ebenso exakte Darstellung hätte man bei einer anderen Umordnung von \mathcal{H} in (2.6, 2.7) erreicht. So gibt zum Beispiel:

i)

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha\gamma} \tilde{K}_{\alpha\gamma} \rho_{\alpha\gamma} - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} v_{\alpha\beta\delta\gamma} \rho_{\alpha\gamma} \rho_{\beta\delta} \quad (2.24)$$

$$\tilde{K}_{\alpha\gamma} = t_{\alpha\gamma} + \frac{1}{2} \sum_{\beta} v_{\alpha\beta\gamma\beta} \quad (2.25)$$

unter Ausnutzung von

$$e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} v_{\alpha\beta\delta\gamma} \rho_{\alpha\gamma} \rho_{\beta\delta}} = \sqrt{\det \left(-\frac{\epsilon}{\hbar} v_{\alpha\beta\delta\gamma}^{-1} \right)} \int \prod_{\alpha\gamma} \frac{d\sigma_{\alpha\gamma}}{\sqrt{2\pi i}} e^{-\frac{i}{\hbar} \sum \sigma_{\alpha\gamma} v_{\alpha\beta\delta\gamma} \sigma_{\beta\delta} + \frac{i}{\hbar} \epsilon \sum \sigma_{\alpha\gamma} v_{\alpha\beta\delta\gamma} \rho_{\beta\delta}} \quad (2.26)$$

als Ergebnis:

$$\begin{aligned} \langle \chi' | \mathcal{U}(t_f, t_i) | \chi \rangle &= \frac{1}{\mathcal{N}} \int D\sigma(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \sum \sigma_{\alpha\gamma}(t) v_{\alpha\beta\delta\gamma} \sigma_{\beta\delta}(t)} \\ &\times \langle \chi' | \tilde{\mathcal{U}}_{\sigma}(t_f, t_i) | \chi \rangle \end{aligned} \quad (2.27)$$

mit

$$\tilde{\mathcal{U}}_{\sigma} = \hat{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \sum_{\alpha\gamma} \left(\tilde{K}_{\alpha\gamma} - \sum_{\beta\delta} \sigma_{\beta\delta}(t) v_{\beta\alpha\gamma\delta} \right) \rho_{\alpha\gamma}} \quad , \quad (2.28)$$

das trotz seiner 'optisch' abweichenden Form mit (2.22), (2.23) äquivalent ist.

ii) Hätte man mit antisymmetrischen Matrixelementen in (2.6) gearbeitet:

$$\mathcal{V} = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\delta} a_{\gamma} \quad (2.29)$$

mit

$$\bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} = \langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle = (\alpha\beta | v | \gamma\delta) - (\alpha\beta | v | \delta\gamma) \quad , \quad (2.30)$$

so hätte sich bei identischer Herleitung der veränderte Faktor $\frac{1}{2}$ durch die gesamte Rechnung gezogen, und in den Gleichungen (2.20)-(2.23) müßten alle $v_{\alpha\beta\gamma\delta}$ durch $\frac{1}{2}\bar{v}$ ersetzt werden.

Erst wenn man Näherungen für die Funktionalintegrale anstrebt, erhält man durch

die Nichteindeutigkeit der Darstellung unterschiedliche Mean-Field-Potentiale (Hartree, Fock bzw. $\frac{1}{2}$ Hartree-Fock, in der Reihenfolge der obigen Ansätze). Hierin zeigen sich die 'Licht- und Schattenseiten', die sich beim Arbeiten mit Pfadintegralen ergeben: Einerseits kann man die Freiheit in der Darstellung teilweise ausnutzen, um gewünschte mittlere Potentiale zu erzeugen; andererseits zeigt sich weiter unten, daß man auf diesem Weg nicht zum 'normalen' Hartree-Fock-Feld und zur Eliminierung der unphysikalischen Selbstwechselwirkung gelangt. Durch einen weiter unten vorgestellten Zugang wird dieses Problem gelöst.

2.2 Mean-Field-Approximation für Pfadintegrale

Es empfiehlt sich, daß in (2.20) erhaltene Funktional für den Vielteilchen-Zeitentwicklungsoperator auf eine kompaktere Form zu bringen:

$$\langle \chi' | \mathcal{U}(t_f, t_i) | \chi \rangle = \int \frac{D\sigma(t)}{\mathcal{N}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{eff}[\sigma(t)]} \quad (2.31)$$

mit der 'kollektiven Wirkung'

$$S_{eff}[\sigma] = \frac{1}{2} \int_{t_i}^{t_f} dt \sigma(t) v \sigma(t) - i\hbar \ln \langle \chi' | \hat{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt (K' + \sigma(t)v)\rho} | \chi \rangle \quad (2.32)$$

Wäre die Integration über das Feld σ in (2.31) durchführbar, hätte man das quantenmechanische Vielteilchenproblem exakt gelöst. Dieses ist aber durch die komplizierte Struktur (Nichtlinearität) der effektiven Wirkung meist unmöglich.

Die Integral-Darstellung ist aber anwenderfreundlich gegenüber störungstheoretischen Approximationsstrategien. Hierbei wird der Integrand meist mit Hilfe eines reellen Parameters bis zu einer endlichen Ordnung um seinen stationären Wert entwickelt und die Integration für den approximierten Integranden ausgeführt. Als Beispiel sei hier das eindimensionale reelle Integral von der Form

$$I(l) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{f(x)}{l}} \quad , \quad l \in \mathbb{R}^+ \quad (2.33)$$

mit beliebiger Funktion $f(x)$ angegeben. Ist l betragsmäßig sehr klein, so wird der Wert des Integrals von der Stelle x_0 dominiert, bei der der Funktionswert $f(x_0)$ minimal wird ($\hat{=} f'(x_0) = 0; f''(x_0) > 0$). Eine Entwicklung von $f(x)$ um x_0 liefert:

$$f(x) = f(x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0)^2 f''(x_0) + \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n!} (x - x_0)^n f^{(n)}(x_0) \quad (2.34)$$

und für das Integral

$$\begin{aligned} I(l) &= e^{-\frac{f(x_0)}{l}} \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2l} f''(x_0)} + \mathcal{O}(l^{\frac{3}{2}}) \right) \\ &= e^{-\frac{f(x_0)}{l}} \left(\sqrt{\frac{2\pi l}{f''(x_0)}} + \mathcal{O}(l^{\frac{3}{2}}) \right) \quad (2.35) \end{aligned}$$

In erster Ordnung nimmt das Integral I den einfachen Wert des Integranden an der Stationaritätsstelle des Exponenten an. Die quadratische Korrektur wird über die 'Krümmung' $f''(x_0)$ ($\hat{=}$ Breite des Gauß-Peaks) an dieser Stelle diktiert.

Nun liegt in der Darstellung (2.31) ein komplexwertiger Integrand vor – d.h. es werden Sattelpunkte angenommen und keine Minima und Maxima wie in der reellen Analysis – wobei aber nach (2.12) eigentlich reelle Hilfsvariable σ eingeführt wurden. Deshalb generalisiert man das Beispiel, indem man σ analytisch in die komplexe Ebene fortsetzt; man erlaubt, den eigentlichen Integrationsweg der reellen Achse zu verlassen und 'über die Stellen zu ziehen', an denen das Integral stationär wird. Bei holomorphem Integranden wäre dieses exakt, solange keine Polstellen auf dem Deformationsgebiet liegen. Bei der Mean-Field-Näherung für den Zeitentwicklungsoperator bietet sich \hbar als der isolierte reelle Entwicklungsparameter an. Ist die Wirkung S_{eff} an der Stationaritätsstelle groß im Verhältnis zu \hbar (was für Bewegungen von Teilchen mit großen Amplituden zu erwarten ist), dann haben wir eine Rechtfertigung für die Stationäre Phasen-Approximation.

Entscheidend für die Güte der Mean-Field-Näherung ist nicht nur der Betrag von S_{eff} im Vergleich zu \hbar , sondern auch wie stark S_{eff} insbesondere am Stationaritätspunkt oszilliert, wenn σ variiert wird (Ausprägung des stationären Werts). Wenn alle Teilchen bei dem Übergang $|\chi\rangle \rightarrow \langle\chi'|$ beteiligt sind, ist anzunehmen, daß kleine Änderungen in σ große Variationen in der Wirkung S_{eff} erzeugen.

Die Sattelpunktgleichungen für die SPA lauten:

$$\frac{\delta S_{eff}[\sigma]}{\delta \sigma_{\alpha\gamma}(t)} = 0 \quad \forall \alpha\gamma \quad . \quad (2.36)$$

Die stationären Lösungen $\tilde{\sigma}$ von (2.36) liefern den größten Beitrag zum Integral und legen somit die Matrixelemente (2.3) fest. Sie definieren das Mean-Field für das Vielteilchenproblem und führen physikalisch auf eine semiklassische Näherung der quantenmechanischen Beschreibung, da sie der ersten Entwicklungsordnung in $\frac{1}{\hbar}$ entsprechen. Ausführung von Gleichung (2.36) unter Ausnutzung von (2.32) liefert eine selbstkonsistente 'klassische' Bewegungsgleichung, die die Mean-Field-Dichten festlegt:

$$\tilde{\sigma}_{\alpha\gamma}(t) = \frac{\langle \chi' | \mathcal{U}_{\tilde{\sigma}}(t_f, t) \rho_{\alpha\gamma} \mathcal{U}_{\tilde{\sigma}}(t, t_i) | \chi \rangle}{\langle \chi' | \mathcal{U}_{\tilde{\sigma}}(t_f, t_i) | \chi \rangle} \quad . \quad (2.37)$$

Nach Durchführung einer Zeitableitung kommt man zur Matrixgleichung:

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\sigma}(t)}{\partial t} = [h(\tilde{\sigma}(t)); \tilde{\sigma}] \quad (2.38)$$

mit h aus (2.23). Dieses ist offenbar nichts anderes als die zeitabhängige Hartree-Fock-Gleichung (TDHF) für die Dichtematrizen, *aber* unter anderen Randbedingungen. So stellt (2.38) eine nichtlineare Differentialgleichung erster Ordnung dar, deren Lösung von der Angabe der *beiden* Randbedingungen $|\chi\rangle$ und $\langle\chi'|$ festgelegt wird. Diese Besonderheit der Mean-Field-Gleichung erzeugt eine nichtlokale Zeitabhängigkeit: Der Eingangszustand entwickelt sich von der Zeit t_i an durch den MF-Operator $\mathcal{U}_{\tilde{\sigma}}$ 'vorwärts' bis zur Zeit t , während sich der Ausgangszustand zur

Zeit t_f 'rückwärts' dorthin entwickelt; d.h. die Mean-Field-Gleichung koppelt ihre Lösungen für alle $t \in [t_i; t_f]$ in einer nichtlinearen Weise [1]. Definiert man die Zustände

$$|\chi^{\tilde{\sigma}}(t)\rangle = \mathcal{U}_{\tilde{\sigma}}(t, t_i) |\chi\rangle \quad \text{und} \quad \langle \chi'^{\tilde{\sigma}}(t) | = \langle \chi' | \mathcal{U}_{\tilde{\sigma}}(t_f, t) \quad , \quad (2.39)$$

so erhält man die kompakte Form

$$\tilde{\sigma}_{\alpha\gamma}(t) = \frac{\langle \chi'^{\tilde{\sigma}}(t) | \rho_{\alpha\gamma} | \chi^{\tilde{\sigma}}(t) \rangle}{\langle \chi'^{\tilde{\sigma}}(t) | \chi^{\tilde{\sigma}}(t) \rangle} \quad , \quad (2.40)$$

wobei der Nenner insgesamt zeitunabhängig ist. Damit läßt sich das Stationaritätsproblem auf zwei Bewegungsgleichungen mit Einteilchen-Hamiltonoperator in Schrödingerdarstellung umschreiben:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\chi^{\tilde{\sigma}}(t)\rangle = h^{\tilde{\sigma}}(t) |\chi^{\tilde{\sigma}}(t)\rangle \quad \text{mit} \quad |\chi^{\tilde{\sigma}}(t_i)\rangle = |\chi\rangle \quad (2.41)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \chi'^{\tilde{\sigma}}(t) | = \langle \chi'^{\tilde{\sigma}}(t) | h^{\tilde{\sigma}}(t) \quad \text{mit} \quad \langle \chi'^{\tilde{\sigma}}(t_f) | = \langle \chi' | \quad . \quad (2.42)$$

Der oben erwähnte semiklassische Charakter der Mean-Field-Näherung spiegelt sich im Ergebnis wieder: Jeder einzelne Übergang $|\chi\rangle \rightarrow \langle \chi' |$ bekommt mit (2.37) sein eigenes Mean-Field zugeordnet, d.h. es wird gleichzeitig der 'Weg' $\sigma(t)$ angegeben, wie dieser Übergang vollzogen wird. Dieser Weg bringt den Hauptbeitrag zur Übergangsamplitude $\langle \chi' | \mathcal{U} | \chi \rangle$ und spielt eine klassisch weitgehend verständliche Rolle. Damit ist der Kontakt zur quantenmechanischen Beschreibung verloren, denn dort werden nach (2.20) alle Wege erlaubt und mit ihren Wahrscheinlichkeiten aufsummiert.

Eine 'Unannehmlichkeit' ergibt sich aus der Zulassung von komplexen σ 's bei der Suche nach Stationaritätspunkten. Es sind also im allgemeinen nichthermitische Felder bei willkürlicher Wahl von χ, χ' zu erwarten, und somit ergeben sich zwar keine mathematische, wohl aber physikalische Interpretationsprobleme. Um reelle Felder zu erzwingen, kann man die Variation von S_{eff} auf reelle Werte einschränken, und man erhält anstatt (2.37):

$$\tilde{\sigma}_{\alpha\gamma}(t) = \text{Re} \frac{\langle \chi' | \mathcal{U}_{\tilde{\sigma}}(t_f, t) \rho_{\alpha\gamma} \mathcal{U}_{\tilde{\sigma}}(t, t_i) | \chi \rangle}{\langle \chi' | \mathcal{U}_{\tilde{\sigma}}(t_f, t_i) | \chi \rangle} \quad . \quad (2.43)$$

Der Unterschied von (2.37) und (2.43) zur Bestimmung der Sattelpunkte liegt darin, daß man bei (2.36) sowohl Oszillationen von Real- und Imaginärteil berücksichtigt, während man bei der Herleitung von (2.43) nur Realteilschwankungen beachtet. Nach erfolgreicher Bestimmung von Lösungen der Gleichung (2.37) bzw. (2.41, 2.42), gewinnt man für den Mean-Field-Wert der Übergangsamplitude in erster Ordnung (vgl.(2.35)):

$$\begin{aligned} \langle \chi' | e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(t_f - t_i)} | \chi \rangle &\cong e^{\frac{i}{\hbar} S_{eff}[\tilde{\sigma}(t)]} \\ &= e^{\frac{i}{2\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \tilde{\sigma}(t) v \tilde{\sigma}(t)} \langle \chi' | \mathcal{U}_{\tilde{\sigma}}(t_f, t_i) | \chi \rangle \quad . \quad (2.44) \end{aligned}$$

Hierbei wurde vorweggenommen, daß in genäherter quadratischer Korrektur die Pfadintegralnorm (2.18) weggekürzt wird; denn bei Vernachlässigung des 2. Summanden in S_{eff} (2.32) (der ja wegen $\hbar \rightarrow 0$ im Vergleich zum ersten äußerst schwach oszilliert, so daß Variationen in höherer Ordnung dieses Terms übergangen werden können) und Entwicklung von S_{eff} mit dieser Näherung um die Mean-Field-Lösung bis zur 2. Ordnung kann mit

$$\left. \frac{\delta^2 S_{eff}}{\delta\sigma_{\alpha\gamma}(t)\delta\sigma_{\beta\delta}(t')} \right|_{\sigma=\tilde{\sigma}} = v_{\alpha\beta\gamma\delta}\delta(t-t') \quad (2.45)$$

die Gauß-Integration zur Bestimmung der quadratischen Korrektur exakt ausgeführt werden – mit dem Ergebnis:

$$\int D\sigma(t) e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt dt' \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sigma_{\alpha\gamma}(t) \left. \frac{\delta^2 S_{eff}}{\delta\sigma_{\alpha\gamma}(t)\delta\sigma_{\beta\delta}(t')} \right|_{\tilde{\sigma}} \sigma_{\beta\delta}(t')} = \mathcal{N} \quad (2.46)$$

Damit erhält man in (2.44) keine Vorfaktoren. Eine ausführlichere Beschreibung für die exakte Berechnung der quadratischen Korrektur für die Pfadintegral-SPA erfolgt in Kapitel 5.

Wenn man für die Darstellung der Übergangsamplitude unter der Annahme, daß die Kanalzustände χ, χ' aus N -Teilchen-Slaterdeterminanten – aufgebaut aus den Orbitalen χ_i, χ'_i – bestehen, eine SPA durchführt und dabei nur nach *statischen* Lösungen² $\tilde{\sigma}$ bei der Stationarität sucht, so erhält man anstatt (2.41, 2.42) die Einteilchen-Schrödingergleichungen mit zeitunabhängigem $h^{\tilde{\sigma}}$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \chi_i(\tilde{\sigma}, t) \rangle = h^{\tilde{\sigma}} | \chi_i(\tilde{\sigma}, t) \rangle \quad \text{mit} \quad | \chi_i(\tilde{\sigma}, t_i) \rangle = | \chi_i \rangle \quad (2.48)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \chi'_i(\tilde{\sigma}, t) | = \langle \chi'_i(\tilde{\sigma}, t) | h^{\tilde{\sigma}} \quad \text{mit} \quad \langle \chi'_i(\tilde{\sigma}, t_f) | = \langle \chi'_i | \quad (2.49)$$

für $i = 1, \dots, N$, wobei das selbstkonsistente h durch (2.23) mit

$$\tilde{\sigma}_{\alpha\gamma}^{statisch} = \sum_{i=1}^N \frac{\langle \chi'_i | \alpha \rangle \langle \gamma | \chi_i \rangle}{\langle \chi'_i | \chi_i \rangle} \quad (2.50)$$

gegeben ist. h enthält also das Mean-Field-Potential

$$U_{\alpha\gamma}^{Hartree} = \sum_{\beta\delta} \tilde{\sigma}_{\beta\delta}^{statisch} v_{\beta\alpha\delta\gamma} = \sum_{i=1}^N \frac{(\chi'_i \alpha | v | \chi_i \gamma)}{\langle \chi'_i | \chi_i \rangle} \quad (2.51)$$

U besitzt dann die Hartree-Form (es tauchen nur direkte Terme – d.h. gleichzeitige Summation über ersten und dritten bzw. zweiten und vierten Index von $v_{\alpha\beta\gamma\delta}$ auf

²Auf statische Lösungen wird man automatisch bei der Wahl von $| \chi \rangle$ als Rechtseigenzustand und $\langle \chi' |$ als Linkseigenzustand des MF-Zeitentwicklungsoperators aus (2.39) geführt; dieses erkennt man sofort aus Gleichung (2.37):

$$\tilde{\sigma}_{\alpha\gamma} = \frac{\langle \chi' | \rho_{\alpha\gamma} | \chi \rangle}{\langle \chi' | \chi \rangle} \quad (2.47)$$

– was ausschließlich auf lokale Wechselwirkungsterme führt). Dieses Ergebnis ist etwas überraschend: Da man mit antisymmetrisierten Zuständen χ, χ' und mit \mathcal{H} in Form der 2. Quantisierung gerechnet hat, hätte man eigentlich das Hartree-Fock-Feld erwartet. Zumindest ist das Mean-Field von symmetrischer Form – d.h. vom Teilchenindex i unabhängig, da in (2.51) über alle $i = 1, \dots, N$ summiert wird. Es läßt sich zeigen, daß der Charakter des Mean-Fields unverändert bleibt, wenn man mit symmetrischen, antisymmetrischen oder einfachen Produktzuständen arbeitet. Die Hartree-Eigenschaft wird schon durch die Darstellung von \mathcal{H} in (2.6) festgelegt. Das Mean-Field kann keine auf Austauschwechselwirkung beruhenden Effekte (Fock-Terme) wiedergeben. Ein weiteres Manko ist, daß die MF-Gleichungen, und damit die genäherte Übergangsamplitude, die unphysikalische Selbstwechselwirkung (2.7) enthalten.

Analoge SPA für die Darstellung (2.27) führt dagegen auf die Fock-Form als Mean-Field (nur indirekte Terme – gleichzeitige Summation vom ersten und vierten bzw. zweiten und dritten Index von $v_{\alpha\beta\gamma\delta}$), welche rein bilokale Wechselwirkung beschreiben:

$$U_{\alpha\gamma}^{Fock} = - \sum_{i=1}^N \sum_{mn} \frac{\langle \chi'_i | m \rangle \langle n | \chi_i \rangle}{\langle \chi'_i | \chi_i \rangle} v_{m\alpha\gamma n} = - \sum_{i=1}^N \frac{(\chi'_i \alpha | v | \gamma \chi_i)}{\langle \chi'_i | \chi_i \rangle} . \quad (2.52)$$

Und das Arbeiten mit den antisymmetrischen Matrixelementen in \mathcal{V} (2.30) ergibt kurioserweise als Mean-Field das halbe Hartree-Fock-Potential:

$$U_{\alpha\gamma}^{HF} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{\langle \chi'_i \alpha | v | \chi_i \gamma \rangle}{\langle \chi'_i | \chi_i \rangle} . \quad (2.53)$$

Also nur die Potentiale (2.51, 2.52, 2.53) können als Entwicklungspunkte für eine weiterführende Störungstheorie angesehen werden.

Einen weiteren Mean-Field-Ansatz gewinnt man, wenn man schon bei der Bestimmung des Mean-Fields (2.36) den schwach oszillierenden Term aus S_{eff} vernachlässigt: daraus folgt nämlich

$$\tilde{\sigma}_{\alpha\gamma} = 0 , \quad (2.54)$$

und somit fällt h mit K' zusammen. Die Mean-Field-Entwicklung beginnt also (bis auf die Selbstwechselwirkung) bei der Physik der freien Teilchen, was natürlich z.B. für die Beschreibung von Bindungszuständen weitgehend unbrauchbar ist.

Die obigen Einschränkungen bei der Mean-Field-Definition werden durch die speziellen mathematischen Umstände der Anwendbarkeit des Gauß-Tricks diktiert; wie diese nach [16] gemildert werden können, wird im Folgenden kurz referiert:

- i) Wie die quadratische Korrektur exakt ausgeführt werden kann, ist in [16] gezeigt. Nach Entwicklung der kollektiven Wirkung bis zur 2. Ordnung um den Sattelpunkt $\sigma = \tilde{\sigma}$ erhält man bei der Berechnung des genäherten Integrals eine Funktionaldeterminante, welche Effekte von kleinen Quantenfluktuationen des Dichtefeldes σ um das Mean-Field beschreibt:

$$\begin{aligned} \int D\sigma e^{\frac{i}{\hbar} S_{eff}[\sigma]} &= \int D\xi e^{\frac{i}{\hbar} S_{eff}[\tilde{\sigma}] + \frac{i}{2\hbar} \int dx dx' dt dt' \xi(x,t) \frac{\delta^2 S_{eff}}{\delta\sigma(x,t) \delta\sigma(x',t')} \Big|_{\sigma=\tilde{\sigma}} \xi(x',t')} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar} S_{eff}[\tilde{\sigma}]} \Delta_{korr} \end{aligned} \quad (2.55)$$

mit der quadratischen Korrektur

$$\Delta_{korr} = \sqrt{\frac{\det v(x-x')\delta(t-t')}{\det \frac{\delta^2 S}{\delta\sigma\delta\sigma'}}} . \quad (2.56)$$

Dabei wurde aus Bequemlichkeitsgründen in die Ortsdarstellung gegangen und die Variablentransformation

$$\xi(x, t) = \sigma(x, t) - \tilde{\sigma}(x, t) \quad (2.57)$$

durchgeführt. Exakte Berechnung von $\left. \frac{\delta^2 S}{\delta\sigma\delta\sigma'} \right|_{\tilde{\sigma}}$ ergibt zusätzlich zu (2.45) Dichtekorrelationsterme und kann unter Ausnutzung von

$$\det(\underline{1} - A) = \exp(\text{tr} \ln(\underline{1} - A)) \quad (2.58)$$

mit der Reihendarstellung des Logarithmus

$$\ln(\underline{1} - A) = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} A^n \quad (2.59)$$

(Konvergenzgebiet ist der komplexe Einheitskreis) zur Bestimmung der Wurzel (2.56) benutzt werden. Hierbei zeigt sich, daß für den Spezialfall des statischen Mean-Fields (es wird zusätzlich gefordert, daß χ'_i, χ_i Eigenzustände zum *gleichen* Eigenwert von $U_{\tilde{\sigma}}$ sind) die Korrektur des stationären Funktionalwerts die Selbstwechselwirkung des Operators K' zu K kompensiert (hierfür ist der $n=1$ -Term der Reihenentwicklung verantwortlich) und die Fock-Energie (2.52) zusätzlich zur schon vorhandenen Hartree-Energie erzeugt wird (ebenfalls $n=1$ -Term). Die restliche Summe ($n \geq 2$) von (2.59) erzeugt Hartree-RPA-Phonon-Energien:

$$\begin{aligned} \langle \chi' | \mathcal{U} | \chi \rangle &\simeq e^{-\frac{i}{\hbar} \left[\sum_{j=1}^N \langle \chi'_j | t | \chi_j \rangle + \frac{1}{2} \sum_{k,j=1}^N \langle \chi'_k \chi'_j | v | \chi_k \chi_j \rangle + \Delta E_{RPA} \right] (t_f - t_i)} \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} (E_{HF} + \Delta E_{RPA})(t_f - t_i)} \end{aligned} \quad (2.60)$$

unter Voraussetzung der Normierung der Orbitale: $\langle \chi'_i | \chi_i \rangle = 1$. Die Mean-Field-Gleichungen bleiben davon natürlich unbeeinflusst und enthalten Hartree-Potential und Selbstwechselwirkung ($h = K' + U^{Hartree}$):

$$h | \chi_i \rangle = \epsilon_i | \chi_i \rangle \quad , \quad \langle \chi'_i | h = \epsilon_i \langle \chi'_i | \quad i = 1, \dots, N \quad . \quad (2.61)$$

- ii) Erwähnt sei eine eingeschränkte Möglichkeit, auch dieses Defizit aus *i*) zu bewältigen, ohne auf den Gauß-Trick zu verzichten. Dabei geht man davon aus, daß die Zweiteilchenwechselwirkung in eine Summe aus direktem und Austausch-Potential zerlegt werden kann:

$$\mathcal{V} = \mathcal{V}^D + \mathcal{V}^E \quad , \quad (2.62)$$

mit

$$v_{\alpha\beta\gamma\delta} = v_{\alpha\beta\gamma\delta}^D + v_{\alpha\beta\gamma\delta}^E = v_{\alpha\beta\gamma\delta}^D - v_{\alpha\beta\delta\gamma}^E \quad , \quad (2.63)$$

wobei gefordert wird, daß der Hartree-Term von \mathcal{V}^E und der Fock-Term von \mathcal{V}^D verschwinden:

$$\sum_k (k\alpha | v^D | \gamma k) = \sum_k (k\alpha | v^E | k\gamma) = 0 \quad \forall \alpha, \gamma \quad . \quad (2.64)$$

Erreicht werden kann dieses durch Spin-Algebra-Methoden (spinabhängige Potentiale[16]); die Anwendbarkeit ist allerdings auf spin-gesättigte Systeme (z.B. magische Kerne und ihre direkten Nachbarn) beschränkt. Aufgrund der Eigenschaften (2.63, 2.64) wird bei der stationären Phasen-Approximation das HF-Potential erzeugt, und der Selbstwechselwirkungsterm taucht wegen der Umordnung (2.6, 2.7) erst gar nicht auf:

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha\gamma} \left(t_{\alpha\gamma} - \frac{1}{2} \sum_{\delta} (v_{\alpha\delta\delta\gamma}^D + v_{\alpha\delta\delta\gamma}^E) \right) a_{\alpha}^{\dagger} a_{\gamma} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} (v_{\alpha\beta\gamma\delta}^D + v_{\alpha\beta\gamma\delta}^E) a_{\alpha}^{\dagger} a_{\gamma} a_{\beta}^{\dagger} a_{\delta} \quad . \quad (2.65)$$

Außerdem verschwindet der 'n=1-Term' der quadratischen Korrektur.

2.3 Entwicklung des Pfadintegrals um ein beliebiges Mean-Field

1982 wurde von Kerman, Levit und Troudet ein eleganterer Zugang zur Darstellung von Matricelementen des Zeitentwicklungsoperators vorgestellt, der es erlaubt, ein beliebiges Feld vorzugeben, um das bei einer Mean-Field Näherung entwickelt wird [17]. Somit fallen die Probleme, die bei der Anwendung des simplen Gauß-Tricks (2.12) entstehen, unter den Tisch. Die Methode schöpft die maximale Flexibilität beim exakten Umgang mit Pfadintegralen aus und ist bei der Herleitung der TIMF-Gleichungen über Funktionalintegrale äußerst hilfreich, da schon vor der SPA durch erlaubte 'Manipulation' an nicht-eindeutigen Parametern des Integrals ein Mean-Field fixiert werden kann, das möglicherweise auch nicht-hermitisch ist.

Um die Notation [17] beizubehalten definieren wir statt (1.7) für den Gesamt-Hamiltonoperator:

$$\mathcal{H} = K\rho + \frac{1}{2}V\Omega \quad (2.66)$$

mit der abkürzenden Matrixschreibweise

$$K\rho = \sum_{\alpha\gamma} K_{\alpha\gamma} \rho_{\alpha\gamma} \quad , \quad \rho_{\alpha\gamma} = a_{\alpha}^{\dagger} a_{\gamma} \quad (2.67)$$

und

$$V\Omega = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} v_{\alpha\beta\delta\gamma} \Omega_{\beta\gamma\alpha\delta} \quad ; \quad \Omega_{\beta\gamma\alpha\delta} = a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\gamma} a_{\delta} \quad . \quad (2.68)$$

Für den Zeitentwicklungsoperator benutzen wir die Produktdarstellung der Exponentialfunktion:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}(t_f-t_i)} = \lim_{\substack{M \rightarrow \infty \\ \epsilon = \frac{t_f-t_i}{M} \rightarrow 0}} \prod_{k=1}^M \left(1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon K\rho - \frac{i}{2\hbar} \epsilon V\Omega \right)_k \quad . \quad (2.69)$$

Wie in (2.9) wurde hier investiert, daß im Limes $\epsilon \rightarrow 0$ die Faktoren des Produkts kommutieren. Genau wie oben wendet man das Gauß-Integral (2.14) als erzeugendes Funktional an, aber in einer anderen Variante: Leitet man die Identität

$$e^{-\frac{i}{2}JVJ} = \frac{\int \prod_{\alpha\gamma} d\sigma'_{\alpha\gamma} e^{\frac{i}{2}\sigma'V\sigma' + iJV\sigma'}}{\int \prod_{\alpha\gamma} d\sigma'_{\alpha\gamma} e^{\frac{i}{2}\sigma'V\sigma'}} \quad (2.70)$$

zweimal nach J ab, multipliziert nach der ersten Ableitung geeignet mit Ω und setzt danach $J = 0$, so kann

$$iV\Omega = \frac{\int \prod_{\alpha\gamma} d\sigma'_{\alpha\gamma} e^{\frac{i}{2}\sigma'V\sigma'} \sigma'V\Omega V\sigma'}{\int \prod_{\alpha\gamma} d\sigma'_{\alpha\gamma} e^{\frac{i}{2}\sigma'V\sigma'}} \quad (2.71)$$

verifiziert werden, mit den Abkürzungen

$$\sigma'V\sigma' = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sigma'_{\alpha\gamma} v_{\alpha\beta\gamma\delta} \sigma'_{\beta\delta} \quad (2.72)$$

und

$$\sigma'V\Omega V\sigma' = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sigma'_{\alpha\gamma} \left(\sum_{\lambda\mu\rho\sigma} v_{\alpha\sigma\gamma\rho} \Omega_{\sigma\rho\lambda\mu} v_{\lambda\beta\mu\delta} \right) \sigma'_{\beta\delta} \quad (2.73)$$

Die 'Stärke' der Identität (2.71) liegt darin, daß der Zweiteilchenwechselwirkungsterm $V\Omega$ auf Kosten der Einführung eines Hilfsintegrals bearbeitet wird; und zwar auf die Art und Weise, daß der Operator Ω , bestehend aus den vier Feldoperatoren, bezüglich σ' nur in quadratischer Ordnung im Integranden auftaucht. Hierin liegt der Schlüssel, bei späterer SPA in *erster* Ordnung keine Beiträge vom Vielteilchenanteil $V\Omega$ zu erhalten. Die Strategie gegenüber der direkten Linearisierung des Operators Ω mittels Gauß-Trick hat sich also geändert. Nachdem man in der Darstellung (2.69) in jedem Faktor die Identität (2.71) einsetzt und dabei den Index k zur Unterscheidung der einzelnen Integrationsvariablen σ_k benutzt, folgt:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}(t_f - t_i)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int \frac{D\sigma_k}{\mathcal{N}(\epsilon)} e^{\frac{i}{2\hbar}\epsilon \sum_k \sum_{\alpha\gamma} \sigma_{\alpha\gamma}^2(k)} \hat{T} \prod_{k=1}^M \left(1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon K\rho - \frac{\epsilon^2}{2\hbar^2} \sigma_k V^{\frac{1}{2}} \Omega V^{\frac{1}{2}} \sigma_k \right) \quad (2.74)$$

mit dem Maß³

$$D\sigma_k = \prod_{k=1}^M \prod_{\alpha\gamma} d\sigma_{\alpha\gamma}(k) \quad , \quad (2.75)$$

der Pfadintegralnormierung

$$\mathcal{N}(\epsilon) = \int D\sigma_k e^{\frac{i}{2\hbar}\epsilon \sum_{k,\alpha\gamma} \sigma_{\alpha\gamma}^2(k)} \quad (2.76)$$

und

$$\sigma_k V^{\frac{1}{2}} \Omega V^{\frac{1}{2}} \sigma_k = \sum_{\substack{\alpha\beta\gamma\delta \\ \lambda\mu\rho\sigma}} \sigma_{\alpha\gamma}(k) v_{\alpha\sigma\gamma\rho} \Omega_{\sigma\rho\lambda\mu} v_{\lambda\beta\mu\delta} \sigma_{\beta\delta}(k) \quad . \quad (2.77)$$

³Der Index k soll daran erinnern, daß über alle zeitabhängigen Pfade integriert wird.

Dabei wurden alle Integrale (2.70) mittels

$$\sigma_{\alpha\gamma}(k) = \sqrt{\frac{\hbar}{\epsilon}} \sum_{\beta\delta} v_{\alpha\beta\gamma\delta}^{\frac{1}{2}} \sigma'_{\beta\delta}(k) \quad (2.78)$$

umskaliert. Dadurch läßt sich der Index k als Zeitvariable ($t_k = k\epsilon$) auffassen und das Integral (2.70) bekommt im Exponent des Intergranden eine diagonale Gestalt. Die Ausführung des Grenzwerts $\epsilon \rightarrow 0$ in der Notation $\sigma_k = \sigma(t_k)$ ergibt das mit der Darstellung (2.17) vergleichbare Ergebnis:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}(t_f-t_i)} = \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ M \rightarrow \infty}} \frac{1}{\mathcal{N}(\epsilon)} \int D\sigma(t) e^{\frac{i}{2\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \sigma^2(t) dt} \mathcal{U}_\sigma^\epsilon(t_f, t_i) \quad (2.79)$$

mit dem Operator

$$\mathcal{U}_\sigma^\epsilon(t_f, t_i) = \hat{T} \prod_{k=1}^M \left(1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon K \rho - \frac{\epsilon^2}{2\hbar^2} \sigma_k V^{\frac{1}{2}} \Omega V^{\frac{1}{2}} \sigma_k \right) \quad (2.80)$$

Im Unterschied zu U_σ aus (2.22) ist dieses a priori kein Zeitentwicklungsoperator, der auf einem Einteilchen-Hamiltonoperator wie (2.23) beruht, da er über Ω Zweiteilchenkorrelationen angesichts (2.78) in der Ordnung $\mathcal{O}(\epsilon)$ enthält. Dieses bestätigt auch (2.74): Der Gauß-Gewichtungsfaktor $e^{\frac{i\epsilon}{2\hbar}\sigma^2}$ erzwingt bei Anwesenheit des Integrals, daß die dominierenden Werte von σ in $\mathcal{O}(\epsilon^{\frac{1}{2}})$ auftreten. Der Operator (2.22) bekommt in der Reihenentwicklung der e-Funktion zwar auch $\rho^2 \triangleq \Omega$ und höhere ρ -Potenzen, kann aber insgesamt als Einteilchenoperator mit faktorisierten Vielteilcheneigenzuständen aufgefaßt werden. Die Version (2.79) des Zeitentwicklungsoperators ist wegen der nur teilweise vollzogenen Grenzwertbildung ($\epsilon \rightarrow 0$) 'optisch' der Darstellung (2.17) unterlegen; aber es existiert ein große Effektivität beim exakten Arbeiten mit (2.79) bei der Untersuchung von Grenzwertszenarios. Der entscheidende Punkt ist, ob man die Grenzwertbildung $\epsilon \rightarrow 0$ *vor* oder *nach* Ausführung des Pfadintegrals durchführt.⁴

Betrachtet man die Grenzwertbildung $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathcal{U}_\sigma^\epsilon$ ohne Anwesenheit des Pfadintegrals, so verschwindet der ϵ^2 -Term in (2.80) für ein fest gegebenes σ_k , denn beim Ausrechnen der Produkte in Ordnungen von ϵ für die einzelnen Summanden aus (2.80) ergibt sich:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_\sigma &= \hat{T} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon \sum_{k=1}^M K \rho - \frac{\epsilon^2}{2\hbar^2} \sum_{\substack{k,k'=1 \\ k \neq k'}}^M (K \rho)(K \rho) + \dots \right) \\ &+ \hat{T} \left(- \frac{\epsilon^2}{2\hbar^2} \sum_{k=1}^M \sigma_k V^{\frac{1}{2}} \Omega V^{\frac{1}{2}} \sigma_k + \dots \right) \quad , \end{aligned} \quad (2.81)$$

wobei bei allen Summanden der ersten Zeile die Anzahl der Summen über den zu ϵ inversen Index k gleich der Potenz von ϵ ist, also wegen $\epsilon k = t$ ein endlicher Beitrag bei Limes $\epsilon \rightarrow 0$ zu erwarten ist. Genau dies ist in der 2. Zeile nicht der Fall: hier

⁴Man beachte, daß das Maß des Integrals $D\sigma$ von ϵ abhängig ist!

liegt die Potenz von ϵ immer um 1 höher als die Anzahl der k -Summationen, und somit verschwindet die 2. Zeile für $\epsilon \rightarrow 0$. Für den gesamten Operator \mathcal{U} (2.79) erhält man das widersprüchliche Resultat:

$$\mathcal{U}(t_f, t_i) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathcal{U}_\sigma^\epsilon(t_f, t_i) = e^{-\frac{i}{\hbar} K \rho(t_f - t_i)} \quad , \quad (2.82)$$

was offensichtlich nur für die Zeitentwicklung freier Teilchen Sinn gibt. Um das richtige Ergebnis $e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} T}$ bei $\epsilon \rightarrow 0$ zu erhalten, muß man erst über die diskreten Felder σ_k für endliche Zeitintervalle integrieren und danach Limes $\epsilon \rightarrow 0$ bestimmen, da der quadratische Term in σ_k zur Erzeugung des Operators $e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} T}$ in (2.79) benötigt wird.

Offensichtlich ist aber auch, daß in den Zeitentwicklungsoperator (2.80) ein willkürlicher Term, der linear zu σ ist, aus rein analytischen Gründen eingeführt werden kann, ohne daß er die exakte Darstellung des Gesamt-Zeitentwicklungsoperators (2.79) verändert. Eine Integration über die volle reelle Achse für σ_k läßt den ungeraden Summanden wieder verschwinden. Hier liegt die entscheidene Freiheit, daß man anstatt $\mathcal{U}_\sigma^\epsilon$ unter dem Integral schreiben kann:

$$\tilde{\mathcal{U}}_\sigma^\epsilon(t_f, t_i) = \hat{T} \prod_{k=1}^M \left(1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon K \rho - \frac{i}{\hbar} \epsilon \sigma_k \Theta \rho - \frac{\epsilon^2}{2\hbar^2} \sigma_k V^{\frac{1}{2}} \Omega V^{\frac{1}{2}} \sigma_k \right) \quad (2.83)$$

mit

$$\sigma_k \Theta \rho = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sigma_{\alpha\gamma}(k) \Theta_{\alpha\beta\gamma\delta} \rho_{\beta\delta} \quad . \quad (2.84)$$

Man führt also künstlich einen in σ linearen Einteilchenterm in $\mathcal{O}(\epsilon)$ ein, gewichtet mit einem willkürlichen erst später zu fixierendem 'Versuchsfeld' Θ . Somit wird die Linearisierung des Gesamthamiltonoperators aus dem vorigen Abschnitt des Kapitels hier durch die Nichteindeutigkeit bei der Pfadintegraldefinition ersetzt. Wenn jetzt analog zu (2.31) die Mean-Field-Näherung durchgeführt wird, so erhält man zur Bestimmung von Stationaritätspunkten nach (2.36) eine MF-Gleichung, die die Grenzwertbildung $\epsilon \rightarrow 0$ ohne Anwesenheit des Pfadintegrals erlaubt. Hierbei hängen die Ergebnisse gerade von der Wahl von Θ ab. Offensichtlich gilt:

$$\bar{\mathcal{U}}_\sigma(t_f, t_i) \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \tilde{\mathcal{U}}_\sigma^\epsilon(t_f, t_i) = \hat{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt (K + \sigma(t)\Theta)\rho} \quad . \quad (2.85)$$

Die quadratischen Terme in σ und damit die Wechselwirkung \mathcal{V} geben zwar keinen Beitrag zur Mean-Field-Wahl, wohl aber wenn Korrekturen hierzu berechnet werden, weil dann höhere Ableitungen in σ_k gebraucht werden.

Das von außen vorgegebene Feld Θ kann, dadurch daß es das Mean-Field eindeutig festlegt, als das Potential angesehen werden, um das eine Mean-Field-Entwicklung vorgenommen wird. Hierbei besteht eine gewisse Analogie zur 'klassischen' Störungstheorie, bei der eine Zerlegung des Hamiltonoperators nach

$$\mathcal{H} = \mathcal{T} + \mathcal{V} = (\mathcal{T} + U) + (\mathcal{V} - U) \quad (2.86)$$

vorgenommen wird, wobei U ein willkürlicher, der physikalischen Situation angepaßter Einteilchenoperator ist, und eine Entwicklung in Ordnungen von $(\mathcal{V} - U)$

berechnet wird. Um zum Beispiel das HF-Potential zu erhalten, hat man Θ in (2.83) so zu wählen, daß der Einteilchen-Hamiltonoperator die Form bekommt:

$$h = (K + \sigma\Theta)\rho \stackrel{!}{=} (K + v^{HF})\rho \quad . \quad (2.87)$$

In [17] wird der Beweis angegeben, daß die HF-Wahl von Θ als optimal angesehen werden kann.

Als vorläufiges Endergebnis erhalten wir für die Matrixelemente des Zeitentwicklungsoperator:

$$\langle \chi' | e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}(t_f-t_i)} | \chi \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\mathcal{N}(\epsilon)} \int D\sigma_k e^{\frac{i}{\hbar}S_{eff}[\sigma_k, \epsilon, \Theta]} \quad (2.88)$$

mit

$$S_{eff}[\sigma_k, \epsilon, \Theta] = \quad (2.89)$$

$$\frac{\epsilon}{2} \sum_k \sigma_k^2 - i\hbar \ln \langle \chi' | \hat{T} \prod_k \left(1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon K \rho - \frac{i}{\hbar} \epsilon \sigma_k \Theta \rho - \frac{\epsilon^2}{2\hbar^2} \sigma_k V^{\frac{1}{2}} \Omega V^{\frac{1}{2}} \sigma_k \right) | \chi \rangle .$$

Kapitel 3

TIMF in Dichtematrizen

In Abschnitt 1.3 wurde gezeigt, wie das Vielteilchen-Inversionsproblem der Stationaritätsgleichung des TIMF-Funktional (1.11, 1.12) in ein nichthermisches Eigenwertproblem (1.38) umgewandelt werden kann. Nun liegt es nahe, die hermitesche HF-Rechnung in der Darstellung mit Dichtematrizen auf dieses Vielteilchenproblem zu erweitern. Dabei werden wir sehen, daß dieses in natürlicher Weise möglich ist, wenn geeignet nichthermitesche Einteilchen-Dichtematrizen eingeführt werden. Das Ritz-Funktional (1.41) kann alternativ als

$$\tilde{E}[\Phi, \Phi'] = \frac{\langle \Phi' | \mathcal{H}' | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} = \frac{\langle \Phi' | \mathcal{H} | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} + \Delta \frac{\langle \Phi' | \chi \rangle \langle \chi' | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} \quad (3.1)$$

umgeschrieben werden.

Ziel ist es nun, die Darstellung (3.1) in den Variationszuständen Φ, Φ' durch eine äquivalente Darstellung in Dichtematrizen (die zu Φ, Φ' assoziiert sind) umzuändern, und dann die Variationsableitung in dem Raum der Dichtematrizen durchzuführen.

3.1 Nichthermitesche Dichtematrizen

Das Matrixelement (3.1) kann nach dem Wick-Theorem für zeitunabhängige Operatoren [3] berechnet werden, wenn man das Biorthogonalsystem $a_\alpha^\dagger, a_\beta$, welches Φ, Φ' als Quasiteilchenvakua besitzt, zur Hilfe nimmt. Die Auswertung ergibt die Summe über alle möglichen Kontraktionskombinationen der Operatoren von \mathcal{H}' gewichtet mit Permutationsfaktoren. Die Kontraktion von zwei zeitunabhängigen Operatoren ab ist definiert als die Differenz der gegebenen Reihenfolge und der normalgeordneten (Erzeuger 'links' von Vernichter):

$$\overline{ab} = ab - : ab : \quad . \quad (3.2)$$

Sei z.B. c_α^\dagger beliebiger Erzeugungsoperator mit $\langle 0 | c_\alpha^\dagger = 0, c_\alpha^\dagger | 0 \rangle = | \alpha \rangle$ und c_β beliebiger Vernichtungsoperator mit $c_\beta | 0 \rangle = 0, \langle 0 | c_\beta = \langle \beta' |$ einer (Biorthogonal)-Basis, in der \mathcal{H}' dargestellt ist, so erhält man alle möglichen Kontraktionen durch Erwartungswertbildung $\langle \Phi' | \dots | \Phi \rangle$ von (3.2) im Hinblick auf (1.40):

i)

$$\overline{c_\alpha^\dagger c_\beta} = \frac{\langle \Phi' | c_\alpha^\dagger c_\beta | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} = \sum_{i=1}^N \frac{\langle \beta' | \varphi_i \rangle \langle \varphi'_i | \alpha \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} \quad (3.3)$$

ii)

$$\overline{c_\alpha^\dagger c_\gamma} = \overline{c_\beta c_\delta} = 0 \quad (3.4)$$

iii)

$$\overline{c_\beta c_\alpha^\dagger} = \langle \beta' | \alpha \rangle - \overline{c_\alpha^\dagger c_\beta} \quad . \quad (3.5)$$

Es liegt nun nahe, einen Operator einzuführen, dessen Matrixelemente mit den Kontraktionen (3.3) zusammenfallen. Also¹:

$$\langle \beta' | \rho | \alpha \rangle = \rho_{\beta\alpha} \stackrel{!}{=} \overline{c_\alpha^\dagger c_\beta} \quad . \quad (3.6)$$

Aus (3.3) folgt dann sofort, daß ρ der Schief-Projektor auf dem Loch-Raum der Slaterdeterminanten ist:

$$\rho = \sum_{i=1}^N \frac{|\varphi_i \rangle \langle \varphi'_i|}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} \quad . \quad (3.7)$$

ρ wird (nichthermitischer) Einteilchen-Dichteoperator genannt. Grund hierfür ist, daß ρ die Biorthogonalbasis von Seite 10 als Rechts- bzw. Linkseigenbasis besitzt und die jeweiligen Eigenwerte angeben, ob das Orbital j aus dem Loch- oder Teilchenraum stammt:

$$\rho | \varphi_j \rangle = n_j | \varphi_j \rangle \quad , \quad \langle \varphi'_j | \rho = n_j \langle \varphi'_j | \quad (3.8)$$

mit den Besetzungszahlen

$$n_j = \begin{cases} 1 & \text{wenn } j \text{ Lochorbital} \\ 0 & \text{wenn } j \text{ Teilchenorbital} \end{cases} \quad . \quad (3.9)$$

Die charakteristischen Eigenschaften des Operators liegen wegen (1.30) auf der Hand:

i) ρ ist Projektionsoperator:

$$\rho^2 = \rho \quad ; \quad (3.10)$$

d.h. alle Eigenwerte sind reell und haben den Wert Eins oder Null,

ii) die Spur des Operators ergibt die Lochteilchenzahl

$$\text{Tr}\rho = N \quad . \quad (3.11)$$

¹Die Notation ρ richtet sich nach [3] und sollte nicht mit der Definition (2.5) verwechselt werden.

Entscheidend für die weitere Rechnung ist, daß die Arbeit mit Slaterdeterminanten äquivalent zur Darstellung mit der korrespondierenden Dichtematrix ρ ist:

Wellenfunktionen Φ, Φ' sind genau dann N -Teilchen-Slaterdeterminanten, wenn der Operator $\rho_{\Phi\Phi'}$ der Projektor auf deren Lochraum ist (d.h. (3.10) und (3.11) erfüllt sind). Die Slaterdeterminanten sind dann bis auf Phasenfaktoren eindeutig festgelegt.

Dabei ist die eine Richtung der obigen Äquivalenz durch (3.7) und (3.10) unter Annahme von (1.30) direkt gegeben. Die entgegengesetzte Folgerung kann wie folgt bewiesen werden:

Sei ρ beliebiger Operator mit $\rho^2 = \rho$ und $\text{Tr}\rho = N$. Nach Bestimmung von Rechts- und Linkseigenzuständen analog zu (3.8) folgt aus (3.10) $n_i \in \{0, 1\}$; mit (3.11) ergibt sich, daß es genau N Eigenwerte mit Wert 1 gibt. Die aus den Rechts- und Linksortitalen zum Eigenwert 1 zusammengesetzten Slaterdeterminanten $|\Phi\rangle$ und $\langle\Phi'|$ sind dann die gesuchten Zustände, die ρ als korrespondierenden Dichteoperator besitzen. Die so erhaltenen Slaterdeterminanten sind nur bis auf jeweils einen Phasenfaktor eindeutig bestimmt, denn lineare unitäre Transformationen unter den Orbitalen – welche solche erzeugen – lassen die Dichtematrix invariant. Fordert man zusätzlich die Bedingung der Bi-Orthonormierung der Lochorbitale, so wird eine Phase festgelegt.

3.2 Homogene Version in Dichtematrizen

Der erste Erwartungswert auf der rechten Seite der Gleichung (3.1) kann jetzt mittels des Wick-Theorems in die oben definierten Dichtematrizen umgeschrieben werden (mit der Bi-Normierung der Basis: $\langle\alpha'|\alpha\rangle = 1$):

$$\begin{aligned}
\frac{\langle\Phi'|\mathcal{H}|\Phi\rangle}{\langle\Phi'|\Phi\rangle} &= \sum_{\alpha\gamma} \langle\alpha'|t|\gamma\rangle \frac{\langle\Phi'|a_{\alpha}^{\dagger}a_{\gamma}|\Phi\rangle}{\langle\Phi'|\Phi\rangle} \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} (\alpha'\beta'|v|\gamma\delta) \frac{\langle\Phi'|a_{\alpha}^{\dagger}a_{\beta}^{\dagger}a_{\delta}a_{\gamma}|\Phi\rangle}{\langle\Phi'|\Phi\rangle} \\
&= \sum_{\alpha\gamma} \langle\alpha'|t|\gamma\rangle \overline{a_{\alpha}^{\dagger}a_{\gamma}} \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} (\alpha'\beta'|v|\gamma\delta) \left(\overline{a_{\alpha}^{\dagger}a_{\gamma}a_{\beta}^{\dagger}a_{\delta}} - \overline{a_{\alpha}^{\dagger}a_{\delta}a_{\beta}^{\dagger}a_{\gamma}} \right) \\
&= \sum_{\alpha\gamma} \langle\alpha'|t|\gamma\rangle \rho_{\gamma\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle\alpha'\beta'|v|\gamma\delta\rangle \rho_{\gamma\alpha}\rho_{\delta\beta}.
\end{aligned} \tag{3.12}$$

Bei dem 2. Erwartungswert von (3.1) tauchen Probleme auf, den separablen Operator $|\chi\rangle\langle\chi'|$ in beliebiger Bi-Orthonormalbasis darzustellen. Statt mit Wick-Theorem kann man aber mit der Orbitalschreibweise (3.7) arbeiten. Weiter gehen wir davon aus, daß die Überlappmatrizen α und α' diagonal sind (1.23), also

$$\frac{\langle\chi'|\Phi\rangle\langle\Phi'|\chi\rangle}{\langle\Phi'|\Phi\rangle} = \prod_{j=1}^N \frac{\langle\chi'_j|\varphi_j\rangle\langle\varphi'_j|\chi_j\rangle}{\langle\varphi'_j|\varphi_j\rangle}. \tag{3.13}$$

Unter der Voraussetzung der Diagonalität von α, α' kann dann $\frac{|\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|}{\langle\varphi_j|\varphi_j\rangle}$ durch den gesamten Projektor (3.7) ersetzt werden. Nach zweimaligem Einschub einer $\underline{1}$ in gleicher Basis, die bei der Darstellung von \mathcal{H} verwendet wurde, folgt:

$$\frac{\langle\chi'|\Phi\rangle\langle\Phi'|\chi\rangle}{\langle\Phi'|\Phi\rangle} = \prod_{j=1}^N \langle\chi'_j|\rho|\chi_j\rangle = \prod_{j=1}^N \sum_{pq} \langle q'|\chi_j\rangle\langle\chi'_j|p\rangle \rho_{pq} . \quad (3.14)$$

Somit ergibt sich für das gesamte Funktional in Dichtematrizen:

$$\begin{aligned} \tilde{E}[\rho] &= \sum_{\alpha\gamma} \langle\alpha'|t|\gamma\rangle \rho_{\gamma\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle\alpha'\beta'|v|\gamma\delta\rangle \rho_{\gamma\alpha}\rho_{\delta\beta} \\ &+ \Delta \prod_{j=1}^N \sum_{pq} \langle q'|\chi_j\rangle\langle\chi'_j|p\rangle \rho_{pq} . \end{aligned} \quad (3.15)$$

Wenn jetzt Stationaritätsstellen von $\tilde{E}[\rho]$ bei Einschränkung auf Slaterdeterminanten gesucht werden, so muß ρ unter der Bedingung $\rho^2 = \rho$ variiert werden. Also führt man Lagrange-Multiplikatoren ein, die gewährleisten sollen, daß die Matrixelemente von $(\rho^2 - \rho)$ verschwinden. Somit lauten die Stationaritätsgleichungen:

$$\frac{\partial\tilde{E}[\rho]}{\partial\rho_{ij}} + \frac{\partial}{\partial\rho_{ij}} \left(\sum_{mn} L_{mn} (\rho^2 - \rho)_{mn} \right) = 0 \quad \forall i, j . \quad (3.16)$$

Definiert man einen 'Hartree-Fock'-Operator h' über die Matrixelemente

$$h'_{ji} = \langle j'|h'|i\rangle \equiv \frac{\partial\tilde{E}[\rho]}{\partial\rho_{ij}} , \quad (3.17)$$

so ist wegen (3.14) eigentlich a priori nicht zu erwarten, daß h' ein Einteilchen-Operator ist. Berechnet man jedoch (3.17), so erhält man den TIMF-Hamiltonoperator der homogenen Version (1.43):

- i) Ableitung der ersten beiden Summanden von (3.15) ergibt den Hamiltonoperator der inhomogenen Version (1.20):

$$\begin{aligned} h_{ji} &= \langle j'|t|i\rangle + \sum_{\beta\delta} \langle j'\beta'|v|i\delta\rangle \rho_{\delta\beta} \\ &= \langle j'|t|i\rangle + \sum_{k=1}^N \frac{\langle j'\varphi'_k|v|i\varphi_k\rangle}{\langle\varphi'_k|\varphi_k\rangle} . \end{aligned} \quad (3.18)$$

- ii) Die Ableitung (3.17) des separablen Terms (3.14) ergibt mit der Produktregel $(\prod_{s=1}^N f_s)' = \sum_{s=1}^N (\prod_{k \neq s} f_k) f'_s$:

$$\sum_{s=1}^N \left(\prod_{k \neq s} \sum_{pq} \langle q'|\chi_k\rangle\langle\chi'_k|p\rangle \rho_{pq} \right) \langle j'|\chi_s\rangle\langle\chi'_s|i\rangle \quad (3.19)$$

und die Erweiterung des Produkts mittels $\prod_{k \neq s} f_k = \left(\prod_{k=1}^N f_k \right) \frac{1}{f_s}$ bringt

$$\sum_{s=1}^N \frac{\det \alpha \det \alpha'}{\det \beta} \frac{\langle j' | \chi_s \rangle \langle \chi'_s | i \rangle}{\sum_{pq} \langle q' | \chi_s \rangle \langle \chi'_s | p \rangle \rho_{pq}} = \quad (3.20)$$

$$\frac{\det \alpha \det \alpha'}{\det \beta} \sum_{s=1}^N \frac{\langle j' | \chi_s \rangle \langle \chi'_s | i \rangle}{\langle \chi'_s | \rho | \chi_s \rangle} .$$

Aus (3.20) ist jetzt ersichtlich, daß h' wirklich ein Einteilchenoperator ist: Das Produkt \prod_s in (3.13) wurde erfolgreich in eine Summe umgewandelt. Somit bilden die Gleichungen (3.17) den Gesamt-Hamiltonoperator \mathcal{H}' auf einen Einteilchen-Hamiltonoperator h' ab. Wenn in (3.20) die Dichtematrix in Orbitalschreibweise eingesetzt und die Diagonalität der Überlappmatrizen α , α' sowie (1.27, 1.44) ausgenutzt wird, kommt man insgesamt zu dem 'versprochenen' Endergebnis für h' :

$$h'_{ji} = \langle j' | t | i \rangle + \sum_{k=1}^N \frac{\langle j' \varphi'_k | v | i \varphi_k \rangle}{\langle \varphi'_k | \varphi_k \rangle} \quad (3.21)$$

$$+ \bar{\eta}(\Delta) \sum_{s=1}^N \frac{\langle \varphi'_s | \varphi_s \rangle}{\langle \chi'_s | \varphi_s \rangle \langle \varphi'_s | \chi_s \rangle} \langle j' | \chi_s \rangle \langle \chi'_s | i \rangle .$$

Die Stationaritätsgleichungen (3.16) bekommen dann nach Ausführung der Ableitung die Gestalt:

$$P_{ji} \equiv h'_{ji} + \sum_n L_{in} \rho_{jn} + \sum_m L_{mj} \rho_{mi} - L_{ij} = 0 \quad \forall i, j . \quad (3.22)$$

Die Lagrange-Multiplikatoren können aus den Gleichungen eliminiert werden, indem man (3.22) von links und rechts geeignet multipliziert und dann subtrahiert:

Wenn man

$$\sum_i P_{ji} \rho_{ik} - \sum_i P_{ik} \rho_{ji} = 0 \quad \forall k, j \quad (3.23)$$

ausrechnet und dabei $\rho^2 = \rho$ ausnutzt, kommt man zu dem Endergebnis

$$(h' \rho - \rho h')_{jk} = 0 \quad \forall j, k . \quad (3.24)$$

Da (3.24) für alle Matrixelemente von $h' \rho - \rho h'$ erfüllt ist, gilt offensichtlich die Operatorgleichung

$$[h'; \rho] = 0 . \quad (3.25)$$

Diese ist nichts anderes als die homogenen TIMF-Gleichungen in etwas anderer Gestalt; sie stellt eine nichthermitische Erweiterung der 'normalen' HF-Gleichung dar. Da h' seinerseits wieder von ρ abhängt, handelt es sich um eine nichtlineare Operator-Gleichung, die selbstkonsistent gelöst werden muß. Im Vergleich zu (1.42) sind die Orbitale, Teilchenenergien und Gesamtteilchenzahl – wenn auch nur 'oberflächlich' – aus der Rechnung verschwunden. Die 'neuen' TIMF-Gleichungen (3.25) gelten für eine fixierte Teilchenzahl N , diese ist in dem Hamiltonoperator h' über den separablen Term bereits vorgegeben. Die komplexen Selbstenergien η_i werden

über das Spektrum von h' geliefert, und die Orbitale über gleichzeitige Rechts- und Linkseigenzustände von ρ und h' bestimmt.

Zu den TIMF-Gleichungen gelangt man also zurück, indem man nach einer Bi-Orthogonalbasis sucht, die ρ und h' gleichzeitig diagonalisiert. Denn offensichtlich sind die aus der TIMF-Bi-Orthogonalbasis zusammengesetzten Operatoren h'_{TIMF} (3.21) und ρ_{TIMF} eine Lösung von (3.25) mit $\text{Tr}\rho_{TIMF} = N$.

Der stationäre Wert des Funktionals ergibt sich, indem ρ_{TIMF} in (3.15) eingesetzt wird. Analog zur Argumentation in Abschnitt 1.3 erhält man wegen $h' = h'(\Delta)$ wieder eine genäherte Gesamtenergie $E_{TIMF} = \tilde{E}[\rho_{TIMF}]$ als Funktion von $\Delta = \frac{1}{D}$.

3.3 Inhomogene Version in Dichtematrizen

Die Formulierung (3.25) in Dichtematrizen läßt sich im Ergebnis auf die inhomogene Variante der TIMF umschreiben. Dafür führen wir 'inhomogene' Dichtematrizen

$$\rho_{\chi'} = \sum_{i=1}^N \frac{|\varphi_i\rangle\langle\chi'_i|}{\langle\chi'_i|\varphi_i\rangle} \quad \text{und} \quad \rho_{\chi} = \sum_{i=1}^N \frac{|\chi_i\rangle\langle\varphi'_i|}{\langle\varphi'_i|\chi_i\rangle} \quad (3.26)$$

ein. Die einzelnen Summanden des Kommutators (3.25) lassen sich unter Benutzung von (3.7, 3.21) und diagonalen Überlappmatrizen auch ausrechnen als:

$$h'\rho = h\rho + \bar{\eta} \sum_{i=1}^N \frac{|\chi_i\rangle\langle\varphi'_i|}{\langle\varphi'_i|\chi_i\rangle} \quad (3.27)$$

$$\rho h' = \rho h + \bar{\eta} \sum_{i=1}^N \frac{|\varphi_i\rangle\langle\chi'_i|}{\langle\chi'_i|\varphi_i\rangle} \quad , \quad (3.28)$$

wobei h der TIMF-Hamiltonoperator (1.20) der inhomogenen Version ist. Aus (3.25) folgt direkt:

$$[h; \rho] = \bar{\eta} (\rho_{\chi'} - \rho_{\chi}) \quad . \quad (3.29)$$

Somit erhält man insgesamt eine inhomogene Kommutatorgleichung, wobei die Inhomogenität durch die Kanaldichtematrizen $\rho_{\chi'}$, ρ_{χ} und die Gesamtenergie (repräsentiert durch $\bar{\eta} = \bar{\eta}(E)$) bestimmt wird. In dem Kommutator sind dafür keine Kanalorbitale enthalten. Um zu bestätigen, daß die inhomogenen TIMF-Gleichungen (1.19) Lösungen von (3.29) sind, berechnet man

$$\begin{aligned} \bar{\eta} (\rho_{\chi'} - \rho_{\chi}) &= \sum_{i=1}^N \bar{\eta} \left(\frac{|\varphi_i\rangle\langle\chi'_i|}{\langle\chi'_i|\varphi_i\rangle} - \frac{|\chi_i\rangle\langle\varphi'_i|}{\langle\varphi'_i|\chi_i\rangle} \right) \\ &\stackrel{(1.19)}{=} \sum_{i=1}^N \bar{\eta} \left(\frac{|\varphi_i\rangle\langle\varphi'_i| (\eta_i - h)}{\langle\chi'_i|\varphi_i\rangle \lambda'_i} - \frac{(\eta_i - h) |\varphi_i\rangle\langle\varphi'_i|}{\lambda_i \langle\varphi'_i|\chi_i\rangle} \right) \quad . \end{aligned} \quad (3.30)$$

Nach Einsetzen von $\bar{\eta}$ durch

$$\bar{\eta} = \frac{\langle\varphi'_i|\eta_i - h|\varphi_i\rangle}{\langle\varphi'_i|\varphi_i\rangle} = \lambda'_i \frac{\langle\chi'_i|\varphi_i\rangle}{\langle\varphi'_i|\varphi_i\rangle} = \lambda_i \frac{\langle\varphi'_i|\chi_i\rangle}{\langle\varphi'_i|\varphi_i\rangle} \quad (3.31)$$

können die η_i eliminiert werden, und man kommt zu dem gewünschten Resultat: $[h; \rho]$.

Gleichung (3.29) entspricht in der zeitabhängigen Theorie der Bewegungsgleichung

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [h; \rho] \quad (3.32)$$

mit zeitabhängigem Operator h . Wie das Übersichtsschema auf Seite 3 zeigt, ist (3.29) nicht (3.32) äquivalent – (3.29) ist eine schlechtere Approximation des exakten Problems als (3.32). Dafür ist (3.29) erheblich leichter zu lösen als (3.32): Anfangs- und Endzustand sind in (3.29) schon in der Inhomogenität 'eingebaut', die selbstkonsistente Lösung von (3.29) zu fester Energie E entspricht dem Aufwand einer gewöhnlichen Hartree-Fock-Rechnung. Demgegenüber ist (3.32) als zeitliches Randwertproblem (nicht Anfangswertproblem!) zu lösen so, daß

$$\rho \rightarrow \begin{cases} \rho_\chi & \text{für } t \rightarrow t_i \\ \rho_{\chi'} & \text{für } t \rightarrow t_f \end{cases} . \quad (3.33)$$

Selbstkonsistenz ist hier über das gesamte Zeitintervall $t_i \leq t \leq t_f$ zu fordern (vgl. Abschnitt 2.2).

Abschließend sei noch erwähnt, daß Probleme auftreten, die Kommutatorgleichung (3.29) direkt mit Hilfe des Funktionals (1.9) abzuleiten. Dieses müßte wegen der verschiedenen Vakua in die drei Dichtematrizen ρ , ρ_χ und $\rho_{\chi'}$ umgeschrieben werden. Da die Variationen dieser Matrizen nicht unabhängig sind, müßten bei der Stationarität bezüglich ρ 'unangenehme' Terme wie $\frac{\partial \rho_\chi}{\partial \rho}$ und $\frac{\partial \rho_{\chi'}}{\partial \rho}$ berechnet werden.

Kapitel 4

1. Herleitung der TIMF aus Pfadintegraldarstellung: homogene Version

In diesem Kapitel wird eine alternative Ableitung der TIMF-Theorie vorgestellt: Die exakte Resolvente wird mittels Fourier-Integral über den Zeitentwicklungsoperator dargestellt und dieser nach (2.79, 2.80) durch ein Pfadintegral repräsentiert. Im Rahmen der Mean-Field-Näherung können dann TIMF und TDMF miteinander 'verglichen' werden.

Wenn man die TIMF-Gleichungen (1.19) gewinnen will, muß man künstlich die Variationszustände Φ, Φ' als Slaterdeterminanten in das Pfadintegral einführen, um dann – durch SPA zum Funktionalintegral – zu selbstkonsistenten Einteilchengleichungen in deren Orbitalen zu gelangen. Dabei gibt es mehrere Möglichkeiten, wie die Φ - und Φ' -Zustände 'ins Spiel' gebracht werden können. Hier werden jetzt die beiden Zustände über Eigenwertgleichungen bezüglich des bei der Sattelpunktsnäherung zu erwartenden MF-Hamiltonoperators definiert (deshalb homogene Version). Die in Abschnitt 2.3 beschriebene Flexibilität bei der Definition der Pfadintegrale erlaubt es uns, das Mean-Field auf den homogenen TIMF-Hamiltonoperator h' (1.42) zu fixieren. Dieses ist das Konzept, die TIMF-Gleichungen zu erzeugen und *gleichzeitig* die TIMF-Amplitude (1.27, 1.44) als Mean-Field-Entwicklung des Funktionals um h' zu gewinnen. Wir werden sehen, daß für Letzteres quadratische Korrekturen zum Pfadintegral berechnet werden müssen.

4.1 Darstellung der Resolvente

Bereits in Kapitel 1.1 wurde der Zusammenhang (1.5) zwischen Zeitentwicklungsoperator und Green-Operator mittels Fouriertransformation gegeben. Die dazu inverse Transformation lautet:

$$\frac{1}{E - \mathcal{H} + i\kappa} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dT e^{\frac{i}{\hbar}(E - \mathcal{H} + i\kappa)T} \theta(T) \quad (4.1)$$

mit positiv infinitesimalem κ und der Stufenfunktion $\theta(T)$. Dabei ist die Einführung von κ erforderlich, damit die Resolvente wohldefiniert ist und im Integral 'saubere'

Konvergenz erzeugt wird, denn bei der T -Integration über das Intervall $[0; \infty[$ verschwindet der obere Wert der Stammfunktion wegen $\left| e^{-\frac{\kappa T}{\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}(E-\mathcal{H})T} \right| \xrightarrow{T \rightarrow \infty} 0$.

Wenn man Matrixelemente von (4.1) zwischen N -Teilchen-Slaterdeterminanten χ, χ' betrachtet, so kann die Pfadintegraldarstellung für den Zeitentwicklungsoperator (2.88, 2.89) inklusive einer willkürlichen Matrix Θ eingeführt werden:

$$\begin{aligned} & \langle \chi' | \frac{1}{E - \mathcal{H} + i\kappa} | \chi \rangle = \\ & \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dT e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\kappa)T} \int \frac{D\sigma_k}{\mathcal{N}(\epsilon)} e^{\frac{i\epsilon}{2\hbar} \sum_k \sigma_k^2} \langle \chi' | \tilde{\mathcal{U}}_\sigma^{\epsilon, \Theta}(T) | \chi \rangle \right] \quad (4.2) \end{aligned}$$

mit der Norm (2.76), dem Maß (2.75) und dem Operator $\tilde{\mathcal{U}}_\sigma$ aus (2.83). Im nächsten Schritt folgt die Einführung der Φ, Φ' -Zustände und zwar über Rechts- und Linkseigenzustände des Operators $\tilde{\mathcal{U}}_\sigma$ im Limes $\epsilon \rightarrow 0$, der nach (2.85) durch den Entwicklungsoperator $\bar{\mathcal{U}}_\sigma^\Theta(T)$ mit dem i.a. nichthermitischen Einteilchenhamiltonoperator $(K + \sigma\Theta)\rho$ gegeben ist.

Antisymmetrisierte N -Teilchen-Eigenzustände sind daher Slaterdeterminanten aus Eigenorbitalen von $\bar{\mathcal{U}}_\sigma^1$. Der $\underline{1}$ -Operator im N -Teilchen-Hilbert-Raum ist dann gegeben durch:

$$\underline{1} = \sum_{\{k_1, \dots, k_N\}} \frac{|\Phi_{k_1 \dots k_N}(\sigma)\rangle \langle \Phi'_{k_1 \dots k_N}(\sigma)|}{\langle \Phi'_{k_1 \dots k_N}(\sigma) | \Phi_{k_1 \dots k_N}(\sigma) \rangle} \quad (4.3)$$

($\{k_i\}$ entspricht allen möglichen verschiedenen, das Pauli-Prinzip nicht verletzenden Besetzungsmöglichkeiten der N identischen Teilchen) mit den Slaterdeterminanten

$$|\Phi_{k_1 \dots k_N}\rangle = |\varphi_{k_1} \dots \varphi_{k_N}\rangle \quad ; \quad \langle \Phi'_{k_1 \dots k_N}| = \langle \varphi'_{k_1} \dots \varphi'_{k_N}| \quad (4.4)$$

(k_i Quantenzahl des i -ten Teilchens). Die geforderten Eigenwertbeziehungen für die Zustände lauten:

$$\bar{\mathcal{U}}_\sigma(T) |\Phi_{k_1 \dots k_N}(\sigma)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^N \alpha_{k_i}(T, \sigma)} |\Phi_{k_1 \dots k_N}(\sigma)\rangle \quad (4.5)$$

$$\langle \Phi'_{k_1 \dots k_N}(\sigma) | \bar{\mathcal{U}}_\sigma(T) = e^{-\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^N \alpha_{k_i}(T, \sigma)} \langle \Phi'_{k_1 \dots k_N}(\sigma) | \quad (4.6)$$

unter Annahme von

$$\bar{\mathcal{U}}_\sigma(T) |\varphi_{k_i}\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha_{k_i}(T, \sigma)} |\varphi_{k_i}\rangle \quad ; \quad \langle \varphi'_{k_i} | \bar{\mathcal{U}}_\sigma(T) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha_{k_i}(T, \sigma)} \langle \varphi'_{k_i} | \quad . \quad (4.7)$$

Die Eigenwertgleichungen können somit in (4.2) erst nach Durchführung des Grenzwertes $\epsilon \rightarrow 0$ – z.B. bei Mean-Field-Gleichungen – ausgenutzt werden. Wenn der $\underline{1}$ -Operator (4.3) in (4.2) sowohl zwischen $\tilde{\mathcal{U}}$ und χ , als auch zwischen $\tilde{\mathcal{U}}$ und χ' eingeschoben wird, erhält man:

$$\sum_{\substack{\{k_1 \dots k_N\} \\ \{k'_1 \dots k'_N\}}} \frac{\langle \chi' | \Phi'_{k'_1 \dots k'_N} \rangle \langle \Phi'_{k'_1 \dots k'_N} | \tilde{\mathcal{U}} | \Phi_{k_1 \dots k_N} \rangle \langle \Phi'_{k_1 \dots k_N} | \chi \rangle}{\langle \Phi'_{k'_1 \dots k'_N} | \Phi'_{k'_1 \dots k'_N} \rangle \langle \Phi'_{k_1 \dots k_N} | \Phi_{k_1 \dots k_N} \rangle} \quad . \quad (4.8)$$

¹Eigenzustände von $\tilde{\mathcal{U}}_\sigma$ sind i.a. keine einfachen Slaterdeterminanten, denn der Zweiteilchen-Term Ω erzwingt Korrelationen der Einteilchenorbitale!

Bis zu diesem Punkt ist die Resolvente exakt wiedergegeben. Für die weitere Rechnung ist es jedoch erforderlich, sich auf N Lochorbitale $\varphi_{k_i}, \varphi'_{k_i}$ mit $k_i = \{1, \dots, N\}$ zu beschränken². Dieses liegt an dem gesteckten Ziel, in den TIMF-Gleichungen eine eindeutige Zuordnung $\chi_i \leftrightarrow \varphi_i$ bzw. $\chi'_i \leftrightarrow \varphi'_i$ $i=1, \dots, N$ zu erhalten. Somit müssen die 'überflüssigen' Teilchenorbitale $k_i = \{N+1, \dots\}$ aus der Rechnung extrahiert werden.

Die mathematische Argumentation hierfür ist, daß im so definierten Lochraum analog zur TIMF eine Diagonalisierung der zu $\langle \varphi'_1 \dots \varphi'_N | \chi_1 \dots \chi_N \rangle$ bzw. $\langle \chi'_1 \dots \chi'_N | \varphi_1 \dots \varphi_N \rangle$ und $\langle \varphi'_1 \dots \varphi'_N | \varphi_1 \dots \varphi_N \rangle$ gehörenden Überlappmatrizen durch unitäre Transformation jeweils innerhalb der Orbitalmengen $\varphi_i, \varphi'_i, \chi_i, \chi'_i$, ohne (4.5, 4.6) zu verletzen, möglich ist³, d.h. man kann zu einer eindeutigen Zuordnung $\chi'_i \leftrightarrow \varphi_i \leftrightarrow \varphi'_i \leftrightarrow \chi_i$, $i=1, \dots, N$ gelangen.

Sobald man ein oder mehrere Lochorbitale $\varphi_i, \varphi_j \dots$ bzw. $\varphi'_i, \varphi'_j \dots$ durch Teilchenorbitale $\varphi_m, \varphi_n \dots$ bzw. $\varphi'_m, \varphi'_n \dots$ ersetzt – wobei im Weiteren mit i, j Loch- und mit m, n Teilchenorbitale indiziert werden – und man fordert, daß die Teilchen-Loch-Überlappmatrizen

$$\langle \varphi'_m | \chi_i \rangle \approx 0 \quad ; \quad \langle \chi'_i | \varphi_m \rangle \approx 0 \quad \forall m, i \quad (4.9)$$

weitgehend verschwinden, können auch die Gesamtüberlapp von Φ und χ' bzw. Φ' und χ vernachlässigt werden, wenn mindestens ein Orbital φ_{k_i} bzw. φ'_{k_i} aus dem Teilchenraum stammt:

$$\langle \Phi'_{k_1 \dots k_N} | \chi \rangle \approx 0 \quad ; \quad \langle \chi' | \Phi_{k_1 \dots k_N} \rangle \approx 0 \quad \text{sobald ein } k_i \in \{N+1, \dots\} \quad , \quad (4.10)$$

weil ganze Zeilen bzw. Spalten der korrespondierenden Überlappmatrizen verschwinden. Insgesamt hat diese Näherung zur Folge, daß die Darstellung der Eins (4.3) – über Vollständigkeit der Eigenfunktionen (4.5, 4.6) eingeführt – bis auf den Projektor auf den oben definierten Lochraum zusammenfällt:

$$\sum_{\substack{\{k_i\} \\ \{k'_i\}}} \frac{\langle \chi' | \Phi_{k'_i} \rangle \langle \Phi'_{k'_i} | \tilde{\mathcal{U}} | \Phi_{k_i} \rangle \langle \Phi'_{k_i} | \chi \rangle}{\langle \Phi'_{k'_i} | \Phi_{k'_i} \rangle \langle \Phi'_{k_i} | \Phi_{k_i} \rangle} \approx \sum_{k_i, k'_i=1}^N (\dots) \quad (4.11)$$

$$= \frac{\langle \chi' | \Phi \rangle \langle \Phi' | \tilde{\mathcal{U}} | \Phi \rangle \langle \Phi' | \chi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle \langle \Phi' | \Phi \rangle}$$

mit den durch (4.5, 4.6) gegebenen $|\Phi\rangle = |\varphi_1 \dots \varphi_N\rangle$; $\langle \Phi' | = \langle \varphi'_1 \dots \varphi'_N |$. Hierbei wurde ausgenutzt, daß es jeweils nur eine Realisierungsmöglichkeit der $\sum_{k_i=1}^N \sum_{k'_i=1}^N$ gibt, da keine Quantenzahlen in den Slaterdeterminanten doppelt auftreten dürfen. Die Annahme (4.9) ist die entscheidende Approximation, die für die Herleitung der TIMF-Theorie notwendig ist. Die Veröffentlichungen [17, 18], die die Herleitung der gewöhnlichen statischen Hartree-Fock-Gleichungen zum Ziel haben, beschränken

²Hier wird also eine 'Sortierung' der Quantenzahlen $k_i \leq N$ und $k_i > N$ vorgenommen; φ_i beschreibt jetzt den Quantenzustand des i -ten Teilchens!

³Wegen der Nichthermitizität von $\tilde{\mathcal{U}}_\sigma$ sind die Orbitale $\varphi_{k_i}, \varphi'_{k_i}$ i.a. nicht orthogonal. Es ist aber eine Orthogonalisierung im Lochraum möglich.

sich auf die Spurbildung (Zustandssumme) des Zeitentwicklungsoperators – statt Berechnung von Matrixelementen zwischen beliebigen Zuständen χ, χ' . Dabei ist die Spurbildung bekanntlich basisunabhängig, so kann man je nach Rechenlage sich der bequemsten Basis bedienen und ist auf keinerlei weitere Approximationen angewiesen.

Nach Einführung der Φ, Φ' -Zustände erhält man für die Resolvente

$$\langle \chi' | \frac{1}{E - \mathcal{H} + i\kappa} | \chi \rangle = -\frac{i}{\hbar} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty dT e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\kappa)T} \int \frac{D\sigma_k}{\mathcal{N}(\epsilon)} e^{\frac{i}{\hbar} S_{eff}[\sigma_k, \Theta, \epsilon]} \quad (4.12)$$

mit der effektiven Wirkung

$$S_{eff} = \frac{\epsilon}{2} \sum_k \sigma_k^2 - i\hbar \ln \frac{\langle \Phi'(\sigma) | \tilde{\mathcal{U}}_\sigma^\epsilon | \Phi(\sigma) \rangle}{\langle \Phi'(\sigma) | \Phi(\sigma) \rangle} - i\hbar \ln \frac{\langle \Phi'(\sigma) | \chi \rangle \langle \chi' | \Phi(\sigma) \rangle}{\langle \Phi'(\sigma) | \Phi(\sigma) \rangle}. \quad (4.13)$$

Insgesamt wurde also erreicht, daß der Zeitentwicklungsoperator jetzt zwischen dessen Eigenfunktionen (für $\epsilon \rightarrow 0$) steht. Die Kanalzustände χ, χ' wurden rein optisch vom Operator $\tilde{\mathcal{U}}$ getrennt und sind jetzt unabhängig von der Grenzwertbildung $\epsilon \rightarrow 0$. (Φ, Φ' sind von ϵ unabhängig definiert!)

4.2 Stationäre Phasen-Approximation (SPA) im statischen Grenzfall

Als Nächstes wird nach Stationaritätsstellen des Pfadintegrals gesucht. Dabei sind wir nur an statischen Sattelpunkten

$$\sigma_{st}(k) \equiv \sigma_{st} \quad \forall k \quad (4.14)$$

interessiert, um das zeitunabhängige TIMF-Feld zu gewinnen. Die Sattelpunktgleichungen von (4.12) lauten:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\delta S_{eff}[\sigma, \Theta, \epsilon]}{\delta \sigma_{st}} = 0 \quad \forall s, t. \quad (4.15)$$

Der Zeitentwicklungsoperator von (4.13) bekommt wegen (2.83) und (4.14) die bezüglich t zeitunabhängige Gestalt:

$$\tilde{\mathcal{U}}_\sigma^\epsilon = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon K \rho - \frac{i}{\hbar} \epsilon \sigma \Theta \rho - \frac{\epsilon^2}{2\hbar^2} \sigma V^{\frac{1}{2}} \Omega V^{\frac{1}{2}} \sigma \right)^M. \quad (4.16)$$

Nach Vertauschung von Grenzwertbildung und Variationsableitung für den 2. Summanden in (4.13) können die Eigenwertgleichungen ausgenutzt werden:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \ln \frac{\langle \Phi' | \tilde{\mathcal{U}} | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} = \ln \frac{\langle \Phi' | \bar{\mathcal{U}} | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} = \ln e^{-\frac{i}{\hbar} T \sum_{i=1}^N \eta_i^\sigma} = -\frac{i}{\hbar} T \sum_{i=1}^N \eta_i^\sigma, \quad (4.17)$$

wobei investiert wurde, daß für $\epsilon \rightarrow 0$ im Exponenten des Zeitentwicklungsoperators der zeitunabhängige Einteilchen-Hamiltonoperator $h' = (K + \sigma\Theta)\rho$ steht, und somit die Zeitabhängigkeit der Eigenwerte in (4.5, 4.6) die Form

$$\alpha_i(\sigma, T) =: T \eta_i(\sigma) \quad (4.18)$$

annimmt.

Für den mißtrauischen Leser sei hier angemerkt: In Kapitel 2.3 war die Vertauschung von Limes $\epsilon \rightarrow 0$ und Pfadintegration offensichtlich nicht möglich, hier aber gilt für die Ableitung nach den statischen Feldern σ :

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\delta}{\delta \sigma} \tilde{\mathcal{U}}_\sigma &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} M \left(1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon K \rho - \frac{i}{\hbar} \epsilon \sigma \Theta \rho - \frac{\epsilon^2}{2\hbar^2} \sigma V^{\frac{1}{2}} \Omega V^{\frac{1}{2}} \sigma \right)^{M-1} \left(-\frac{i}{\hbar} \epsilon \Theta \rho - \frac{\epsilon^2}{\hbar^2} \sigma V^{\frac{1}{2}} \Omega V^{\frac{1}{2}} \right) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \Theta \rho T \bar{\mathcal{U}} = \frac{\delta}{\delta \sigma} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \tilde{\mathcal{U}}_\sigma \quad , \end{aligned} \quad (4.19)$$

d.h. Vertauschung für den Operator $\tilde{\mathcal{U}}$ ist möglich. Auf dem absolut sicheren Weg ist man, wenn die Zustände Φ, Φ' als Funktionen des endlichen Grenzparameters $\epsilon \geq 0$ eingeführt werden:

$$\tilde{\mathcal{U}}_\sigma | \Phi(\sigma_k, \epsilon) \rangle = \Gamma(\sigma_k, \epsilon) | \Phi(\sigma_k, \epsilon) \rangle \quad (4.20)$$

$$\langle \Phi'(\sigma_k, \epsilon) | \tilde{\mathcal{U}}_\sigma = \Gamma(\sigma_k, \epsilon) \langle \Phi'(\sigma_k, \epsilon) | \quad (4.21)$$

(dann können also die Zustände Φ, Φ' im allgemeinen nicht als Slaterdeterminanten angenommen werden). Schiebt man die Projektoren $| \Phi(\sigma, \epsilon) \rangle \langle \Phi'(\sigma, \epsilon) |$ anstatt (4.11) in die Gleichung (4.2) ein, so wird die physikalische Bedeutung des Projektors erst im Grenzwert $\epsilon \rightarrow 0$ klar: Denn dann gehen die in (4.20, 4.21) definierten Zustände in die obigen Slaterdeterminanten über

$$| \Phi(\sigma, \epsilon = 0) \rangle = | \Phi \rangle \quad ; \quad \langle \Phi'(\sigma, \epsilon = 0) | = \langle \Phi' | \quad (4.22)$$

und

$$\Gamma(\sigma, \epsilon = 0) = e^{-\frac{i}{\hbar} T \sum_{i=1}^N \eta_i^\sigma} \quad , \quad (4.23)$$

und die Interpretation $\mathbb{1} \rightarrow$ Projektor kann übernommen werden. Die Gleichungen (4.22) haben den entscheidenden Vorteil, daß die Eigenwertgleichungen für *jedes* ϵ angewandt werden können, und man nicht erst auf Limes $\epsilon \rightarrow 0$ angewiesen ist. Ansonsten ergibt sich eine völlig analoge Rechnung mit (4.20, 4.21) wie mit (4.5, 4.6).

Die Gleichungen (4.7) können unter statischen Verhältnissen als Einteilchen-Schrödingergleichungen für die Orbitale ausgedrückt werden:

$$(\eta_i^\sigma - h'_\sigma) | \varphi_i(\sigma) \rangle = 0 \quad , \quad \langle \varphi'_i(\sigma) | (\eta_i^\sigma - h'_\sigma) = 0 \quad , \quad i = 1, \dots, N. \quad (4.24)$$

Die effektive Wirkung für die statische Betrachtung läßt sich nach Ersetzung von ϵM durch T ausdrücken als:

$$S_{eff}[\sigma, \Theta, T] = \frac{T}{2} \sum_{\alpha\gamma} \sigma_{\alpha\gamma}^2 - T \sum_{i=1}^N \eta_i^\sigma - i\hbar \ln \frac{\langle \chi' | \Phi \rangle \langle \Phi' | \chi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} \quad . \quad (4.25)$$

Bei der Variationsableitung (4.15) vernachlässigt man den wegen $\hbar \rightarrow 0$ schwach oszillierenden 3. Summanden aus (4.25) (vgl. Argumente aus Abschnitt 2.2). Man hätte bei der Variation auch gravierende Probleme bekommen:

- i) Die Eigenwertgleichungen (4.5, 4.6) stellen keine Gleichungen für die Größen $\langle \chi' | \frac{\delta}{\delta \sigma} | \Phi \rangle$, $\langle \frac{\delta}{\delta \sigma} \Phi' | \Phi \rangle$ bzw. $\frac{\delta}{\delta \sigma} \langle \Phi' | \Phi \rangle$ bereit sondern nur die Eigenwertvariationen $\frac{\delta \eta_i}{\delta \sigma}$.
- ii) Da alle anderen Summanden in (4.25) linear in T sind, würde ein T -abhängiges Mean-Field zu erwarten sein, d.h. man würde für die Matrixelemente *jedes* Zeitentwicklungsoperators $e^{-i\mathcal{H}T}$ ein unterschiedliches Mean-Field erhalten, und damit würde die T -Integration (4.1, 4.2) über alle Matrixelemente ohne Näherung undurchführbar.

iii) Auch wenn die Überlapp-Terme nicht variiert werden, wird der zu berechnende stationäre Wert des Funktionals $D = \frac{1}{\bar{\eta}} \frac{\langle \Phi' | \chi \rangle \langle \chi' | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle}$ bei Variation in σ natürlich auch verändert.

Mit dieser Annahme bekommt die Gleichung (4.15) die Gestalt:

$$0 = T\sigma_{st} - T \sum_{i=1}^N \frac{\delta \eta_i^\sigma}{\delta \sigma_{st}} \quad . \quad (4.26)$$

Die Variationsableitungen der Eigenwerte η_i können aus (4.24) gewonnen werden:

$$\left(\frac{\delta \eta_i}{\delta \sigma_{st}} - \frac{\delta h'}{\delta \sigma_{st}} \right) | \varphi_i \rangle + (\eta_i - h') \frac{\delta}{\delta \sigma_{st}} | \varphi_i \rangle = 0 \quad , \quad (4.27)$$

und nach Multiplikation mit $\langle \varphi'_i |$ aus (4.24) folgt:

$$\begin{aligned} \frac{\delta \eta_i}{\delta \sigma_{st}} &= \frac{\langle \varphi'_i | \frac{\delta h'}{\delta \sigma_{st}} | \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} \\ &= \sum_{\beta\delta} \Theta_{s\beta t\delta} \frac{\langle \varphi'_i | a_\beta^\dagger a_\delta | \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} = \sum_{\beta\delta} \Theta_{s\beta t\delta} \frac{\langle \varphi'_i | \beta \rangle \langle \delta | \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} , \end{aligned} \quad (4.28)$$

wobei auffällt, daß für die Bestimmung des Sattelpunktes die Orbitalableitungen von φ_i, φ'_i nicht beitragen.

Insgesamt erhält man die selbstkonsistenten, statischen Stationaritätsgleichungen

$$\tilde{\sigma}_{st} = \sum_{i=1}^N \sum_{\beta\delta} \frac{\langle \varphi'_i(\tilde{\sigma}) | \beta \rangle \langle \delta | \varphi_i(\tilde{\sigma}) \rangle}{\langle \varphi'_i(\tilde{\sigma}) | \varphi_i(\tilde{\sigma}) \rangle} \Theta_{s\beta t\delta} \quad (4.29)$$

mit der willkürlichen Matrix Θ . Das Mean-Field kann also völlig unabhängig von der eigentlichen Wechselwirkung v gewählt werden. Setzt man das stationäre Feld wieder in den Hamiltonoperator h' ein, bekommt man den Mean-Field-Operator:

$$\begin{aligned} h'_{\tilde{\sigma}} &= \sum_{\alpha\gamma} a_\alpha^\dagger a_\gamma \left(K_{\alpha\gamma} + \sum_{i,pq\beta\delta} \frac{\langle \varphi'_i | p \rangle \langle q | \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} \Theta_{\beta p \delta q} \Theta_{\beta \alpha \delta \gamma} \right) \\ &= \sum_{\alpha\gamma} a_\alpha^\dagger a_\gamma \left(K_{\alpha\gamma} + \sum_{i,pq} \frac{\langle \varphi'_i | p \rangle \langle q | \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} (\Theta^T \Theta)_{\alpha p \gamma q} \right) , \end{aligned} \quad (4.30)$$

mit $(\Theta^T \Theta)_{\alpha p \gamma q} = \sum_{\beta\delta} \Theta_{\alpha \beta \gamma \delta}^T \Theta_{\beta p \delta q}$.

Die Idee ist nun, die Matrix Θ so zu fixieren, daß $(\Theta^T \Theta)$ in (4.30) den TIMF-Hamiltonoperator h'_{TIMF} generiert, inklusive separablem Anteil. Somit kann man die MF-Gleichungen aus (4.24) mit den homogenen TIMF-Gleichungen identifizieren. Dabei besteht eine gewisse Willkür über die Festlegung der Matrix Θ . Die entscheidene physikalische Größe ist das Produkt $\Theta^T \Theta$. Dieses besitzt die Dimension einer Observablen (Potential). Also stellen wir die Forderung an das 'Versuchsfeld' Θ :

$$h'_{\alpha\gamma} \stackrel{!}{=} h'_{\alpha\gamma}(TIMF) \quad . \quad (4.31)$$

Ohne Θ explizit anzugeben, kann dieses erreicht werden, indem z.B.

$$\begin{aligned} W_{\alpha\beta\gamma\delta} &:= (\Theta^T \Theta)_{\alpha\beta\gamma\delta} = \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} + f_{\alpha\beta\gamma\delta} \\ &= \langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle + \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N C_j \langle \alpha | \chi_j \rangle \langle \chi'_j | \gamma \rangle \langle \beta | \delta \rangle \end{aligned} \quad (4.32)$$

mit

$$C_j = \bar{\eta} \frac{n_j}{m_j m'_j} \quad (4.33)$$

gewählt wird, wobei $\bar{\eta}$, n_j , m_j , m'_j mit den TIMF-Größen $\bar{\eta}_{TIMF}$, $\langle \varphi'_j | \varphi_j \rangle$, $\langle \chi'_j | \varphi_j \rangle$ und $\langle \varphi'_j | \chi_j \rangle$ identifiziert werden. Zur Bestätigung, daß (4.32) eine geeignete Lösung von (4.31) ist, sei hier angegeben:

$$i) \quad \sum_{i=1}^N \sum_{pq} \frac{\langle \varphi'_i | p \rangle \langle q | \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} \bar{v}_{\alpha p \gamma q} = \sum_{i=1}^N \frac{\langle \alpha \varphi'_i | v | \gamma \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} \quad (4.34)$$

ii)

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1}^N \sum_{pq} \frac{\langle \varphi'_i | p \rangle \langle q | \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} f_{\alpha p \gamma q} = \\ &\sum_{i,j=1}^N \sum_{pq} \frac{1}{N} C_j \frac{\langle \varphi'_i | p \rangle \langle p | q \rangle \langle q | \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} \langle \alpha | \chi_j \rangle \langle \chi'_j | \gamma \rangle = \\ &\sum_{j=1}^N C_j \langle \alpha | \chi_j \rangle \langle \chi'_j | \gamma \rangle \end{aligned} \quad (4.35)$$

Die Mehrdeutigkeit bei der Wahl von Θ wird schon alleine dadurch bestätigt, daß die Wahl

$$\tilde{f}_{\alpha\beta\gamma\delta} \equiv \sum_{j,l=1}^N \bar{C}_j \langle \alpha | \chi_j \rangle \langle \chi'_j | \gamma \rangle \langle \varphi'_l | \delta \rangle \langle \beta | \varphi_j \rangle \quad (4.36)$$

zum gleichen Mean-Field führt, wenn man $\bar{C}_j = \frac{C_j}{n_j}$ setzt.

An der Stationaritätsstelle $\tilde{\sigma}$ kann nach der Festlegung von Θ nun der Wert der effektiven Wirkung (4.13, 4.25) berechnet werden:

i) Der erste Summand aus (4.25) ergibt

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha\gamma} \tilde{\sigma}_{\alpha\gamma}^2 &\stackrel{(4.29)}{=} \sum_{\substack{i,\beta\delta \\ k,st}} \frac{\langle \varphi'_i | \beta \rangle \langle \delta | \varphi_i \rangle \langle \varphi'_k | s \rangle \langle t | \varphi_k \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle \langle \varphi'_k | \varphi_k \rangle} (\Theta^T \Theta)_{s\beta t\delta} \\ &\stackrel{(4.32)}{=} \sum_{i,k=1}^N \frac{\langle \varphi'_k \varphi'_i | v | \varphi_k \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_k | \varphi_k \rangle \langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} \\ &\quad + \sum_{i,k,j=1}^N \frac{\langle \varphi'_i | \chi_j \rangle \langle \chi'_j | \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} \frac{\bar{\eta}}{N} \frac{n_j}{m_j m'_j} . \end{aligned} \quad (4.37)$$

Im Fall diagonaler Überlappmatrizen verschwindet im 2. Summanden eine der drei Summen, und sämtliche Orbitalüberlappung und Indexträger kürzen sich bei Identifizierung der m_j, m'_j, n_j mit (1.23, 1.24) weg. Somit bleibt nur die triviale Summation $\sum_{ij} 1 = N^2$ übrig, und man erhält:

$$\sum_{\alpha\gamma} \tilde{\sigma}_{\alpha\gamma}^2 = \sum_{i,k=1}^N \frac{\langle \varphi'_k \varphi'_i | v | \varphi_k \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_k | \varphi_k \rangle \langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} + N\bar{\eta} \quad . \quad (4.38)$$

ii) Der zweite Summand von (4.25) kann wegen $\eta_i = \eta_i^{TIMF}$ (1.21) unter einfachen Umformungen ermittelt werden:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \eta_i &= NE - (N-1) \sum_{k=1}^N \frac{\langle \varphi'_k | t | \varphi_k \rangle}{\langle \varphi'_k | \varphi_k \rangle} \\ &+ \left(1 - \frac{N}{2}\right) \sum_{k,l=1}^N \frac{\langle \varphi'_k \varphi'_l | v | \varphi_k \varphi_l \rangle}{\langle \varphi'_k | \varphi_k \rangle \langle \varphi'_l | \varphi_l \rangle} \quad . \quad (4.39) \end{aligned}$$

iii) Die Zusammenfassung von Termen aus (4.25) unter Benutzung von (4.38) und (4.39) sowie der Gesamtenergie (siehe(4.2)) ergibt nach einiger Rechnung:

$$\begin{aligned} E + \frac{1}{2} \sum_{i,k=1}^N \frac{\langle \varphi'_k \varphi'_i | v | \varphi_k \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_k | \varphi_k \rangle \langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} - \sum_{i=1}^N \eta_i + \frac{1}{2} N\bar{\eta} &= \\ (1-N)E + (N-1) \sum_{i=1}^N \frac{\langle \varphi'_i | t | \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} &+ \\ + \frac{N-1}{2} \sum_{k,l=1}^N \frac{\langle \varphi'_k \varphi'_l | v | \varphi_k \varphi_l \rangle}{\langle \varphi'_k | \varphi_k \rangle \langle \varphi'_l | \varphi_l \rangle} + \frac{1}{2} N\bar{\eta} &= \\ = (1-N) \left(E - \sum_{k=1}^N \frac{\langle \varphi'_k | t + \frac{v}{2} | \varphi_k \rangle}{\langle \varphi'_k | \varphi_k \rangle} \right) + \frac{1}{2} N\bar{\eta} &= \\ = (1-N) \left(E - \frac{\langle \Phi' | \mathcal{H} | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} \right) + \frac{1}{2} N\bar{\eta} = \left(1 - \frac{N}{2}\right) \bar{\eta} \quad . \quad (4.40) \end{aligned}$$

Insgesamt kann jetzt der stationäre Wert des Pfadintegrals (4.2) angegeben werden. Der Ausdruck für die Mean-Field-Entwicklung um $\tilde{\sigma}$ bis zur 2. Ordnung lautet:

$$\begin{aligned} \langle \chi' | \frac{1}{E - \mathcal{H} + i\kappa} | \chi \rangle &= \\ -\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dT e^{\frac{i}{\hbar}(\bar{\eta} - \frac{N}{2}\bar{\eta} + i\kappa)T} \frac{\langle \Phi'(\tilde{\sigma}) | \chi \rangle \langle \chi' | \Phi(\tilde{\sigma}) \rangle}{\langle \Phi'(\tilde{\sigma}) | \Phi(\tilde{\sigma}) \rangle} \Delta_{korr} \quad , \quad (4.41) \end{aligned}$$

wobei die quadratischen Korrekturen im nächsten Abschnitt berechnet werden. Bei Annahme $\Delta_{korr} \approx 1$ (also der Argumentation um (2.45, 2.46) folgend) hätte man das Ziel noch nicht erreicht, die gesamte TIMF-Theorie zu erzeugen. Die Orbitale der Slaterdeterminanten $\Phi; \Phi'$ erfüllen zwar die TIMF-Orbitalgleichungen, aber der Wert des Funktionals nach T -Integration stimmt nicht mit (1.27, 1.44) überein. Es wird gezeigt, daß Δ_{korr} den erforderlichen Term $\bar{\eta} \frac{N}{2}$ im Exponenten von (4.41) liefert.

4.3 Gaußsche Näherung (1. Teil)

Für die Festlegung des Mean-Fields war allein der in ϵ lineare künstlich eingeführte Term verantwortlich. Im Falle der quadratischen Korrektur werden 2. Ableitungen der effektiven Wirkung S_{eff} bezüglich σ mitgenommen. Somit ist zu erwarten, daß der Ω -Term aus (2.83) jetzt eine entscheidene Rolle spielt.

Hier ist man jetzt auf die Integration *vor* Grenzwertbildung $\epsilon \rightarrow 0$ angewiesen. Der quadratische Korrekturterm von (4.41) ergibt analog zu (2.35, 2.55) ein Gauß-Integral über die zeitlichen Fluktuationen ξ_k um das statische Mean-Field $\tilde{\sigma}$

$$\xi_k := \sigma_k - \tilde{\sigma} \quad (4.42)$$

also:

$$\Delta_{corr} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\mathcal{N}(\epsilon)} \int D\xi_k e^{\frac{i}{2\hbar} \sum_{k,k'} \xi_k \frac{\delta^2 \bar{S}_{eff}[\xi_k, \tilde{\sigma}, \epsilon]}{\delta \xi_k \delta \xi_{k'}} \Big|_{\xi_k=0}} \xi_{k'} \quad (4.43)$$

mit der in die neuen Koordinaten transformierten Wirkung

$$\begin{aligned} \bar{S}_{eff}[\xi_k, \tilde{\sigma}, \epsilon] &= \frac{\epsilon}{2} \sum_k (\tilde{\sigma} + \xi_k)^2 - \\ i\hbar \ln \frac{\langle \Phi' | \hat{T} \prod_k (1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon K \rho - \frac{i}{\hbar} \epsilon (\tilde{\sigma} + \xi_k) \Theta \rho - \frac{\epsilon^2}{2\hbar^2} \xi_k V^{\frac{1}{2}} \Omega V^{\frac{1}{2}} \xi_k) | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} \end{aligned} \quad (4.44)$$

Dabei wurden nur die Zeitindizes k, k' angegeben. In dem Ω -Term von (4.44) wurden die durch Einsetzen von (4.42) und binomischer Formel entstehenden Terme $\tilde{\sigma}^2$ bzw. $\tilde{\sigma} \xi_k$ vernachlässigt, weil $\tilde{\sigma}$ unabhängig von ϵ ist und ξ_k offensichtlich wie σ_k von $\mathcal{O}(\epsilon^{-\frac{1}{2}})$ ist. Somit können sie im Vergleich zu ξ_k^2 -Termen ignoriert werden. Das Integral (4.43) ist eines der wenigen Pfadintegrale, die exakt ausgeführt werden können. Die formale Berechnung kann mittels der Gauß-Identität (2.10) ($b = 0$) vollzogen werden:

Die Pfadintegralnorm (2.76) ergibt deshalb

$$\frac{1}{\mathcal{N}} = \frac{1}{\int D\sigma e^{\frac{i\epsilon}{2\hbar} \sum_{\alpha\gamma,k} \sigma_{\alpha\gamma}^2(k)}} = \left(\frac{\det(\delta_{kk'} \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta})}{\prod_{\alpha\gamma,k} \frac{2\pi i\hbar}{\epsilon}} \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\prod_{\alpha\gamma,k} \frac{2\pi i\hbar}{\epsilon} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (4.45)$$

Das Integral (4.43) erhält mit der Abkürzung

$$A(k, k') = \frac{\delta^2 \bar{S}}{\delta \xi_k \delta \xi_{k'}} \Big|_{\xi_k=0} \quad (4.46)$$

die Form

$$\int D\xi_k e^{\frac{i}{2\hbar} \sum_{k,k'} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \xi_{\alpha\gamma}(k) A_{\alpha\beta\gamma\delta}(k, k') \xi_{\beta\delta}(k')} = \left(\frac{\prod_{\alpha\gamma,k} 2\pi i\hbar}{\det A(k, k')} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (4.47)$$

wobei die Determinanten in (4.45, 4.47) über alle Orts- (inkl. Spin, Isospin) *und* Zeitkoordinaten zu verstehen sind.

Insgesamt ist dann die Korrektur (4.43) gegeben durch:

$$\Delta_{corr} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\det \left(\frac{1}{\epsilon} \frac{\delta^2 \bar{S}}{\delta \xi_k \delta \xi_{k'}} \Big|_{\xi_k=0} \right) \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (4.48)$$

Das nächste Ziel ist es also, die 2-fache Ableitung von (4.44) zu berechnen; damit wäre das Pfadintegral (4.43) exakt gelöst.

Bei den 2. Ableitungen $\frac{\delta^2 \bar{S}}{\delta \xi \delta \xi'}$ an der Stelle des Mean-Fields $\tilde{\sigma}$ machen wir die Annahme, daß die Zustände Φ, Φ' auf ihren MF-Werten $\Phi_{\tilde{\sigma}}, \Phi'_{\tilde{\sigma}}$ fixiert bleiben und mit ξ_k nicht mitvariiert werden. Eigentlich müßte mit $|\Phi(\tilde{\sigma} + \xi_k)\rangle, \langle \Phi'(\tilde{\sigma} + \xi_k)|$ gerechnet werden, aber da kleine Fluktuationen um das Mean-Field (wegen Gauß-Gewichtung in (4.44)) die größten Beiträge zur quadratischen Korrektur geben, ist es eine akzeptable Näherung, nur die Variationen des Operators zwischen diesen Zuständen in 2. Ordnung mitzunehmen. Mathematischer Hintergrund hierfür ist, daß so die Eigenwert-Gleichungen (4.5, 4.6) anwendbar bleiben.

Insgesamt kann man sagen, daß die Ableitungen durch die notwendige Produktdarstellung in (4.44) optisch und rechnerisch äußerst 'unschön' werden. Die erste Ableitung von \bar{S}_{eff} lautet:

$$\frac{\delta \bar{S}_{eff}}{\delta \xi_{mn}(j)} = \epsilon(\tilde{\sigma}_{mn} + \xi_{mn}(j)) \quad (4.49)$$

$$-i\hbar \frac{\langle \Phi' | \hat{T}[(\prod_{k=j+1}^M P_k)(-\frac{i}{\hbar}\epsilon \sum_{\beta\delta} \Theta_{m\beta n\delta} \rho_{\beta\delta} - \frac{\epsilon^2}{\hbar^2} \sum_{\beta\delta} I_{m\beta n\delta} \xi_{\beta\delta}(j))(\prod_{k=1}^{j-1} P_k)] | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \hat{T} \prod_k P_k | \Phi \rangle}$$

mit der Abkürzung

$$P_k = 1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon K\rho - \frac{i\epsilon}{\hbar}(\tilde{\sigma} + \xi_k)\Theta\rho - \frac{\epsilon^2}{2\hbar^2}\xi_k V^{\frac{1}{2}}\Omega V^{\frac{1}{2}}\xi_k \quad , \quad (4.50)$$

also

$$\hat{T} \prod_k P_k = \tilde{U}_{\tilde{\sigma}+\xi_k}^\epsilon \equiv U \quad (4.51)$$

und

$$I_{\alpha\beta\gamma\delta} \equiv (V^{\frac{1}{2}}\Omega V^{\frac{1}{2}})_{\alpha\beta\gamma\delta} = \sum_{\lambda\mu\rho\sigma} v_{\alpha\sigma\gamma\rho}^{\frac{1}{2}} \Omega_{\sigma\rho\lambda\mu} v_{\lambda\beta\mu\delta}^{\frac{1}{2}} \quad . \quad (4.52)$$

Die längliche 2. Ableitung ergibt:

$$\frac{\delta^2 \bar{S}_{eff}}{\delta \xi_{mn}(j) \delta \xi_{pq}(s)} = \epsilon \delta_{js} \delta_{mp} \delta_{nq} \quad (4.53)$$

$$- \frac{i\hbar(1 - \delta_{js})}{\langle \Phi' | U | \Phi \rangle} \times$$

$$\left\{ \langle \Phi' | \hat{T} \left[\left(\prod_{k=s+1}^M P_k \right) \left(-\frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{ab} \Theta_{paqb} \rho_{ab} - \frac{\epsilon^2}{\hbar^2} \sum_{ab} I_{paqb} \xi_{ab}(s) \right) \left(\prod_{k=j+1}^{s-1} P_k \right) \right. \right.$$

$$\left. \left(-\frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{\beta\delta} \Theta_{m\beta n\delta} \rho_{\beta\delta} - \frac{\epsilon^2}{\hbar^2} \sum_{\beta\delta} I_{m\beta n\delta} \xi_{\beta\delta}(j) \right) \left(\prod_{k=1}^{j-1} P_k \right) \right] | \Phi \rangle \right\}$$

$$+ \frac{i\epsilon^2}{\hbar} \delta_{js} \frac{\langle \Phi' | \hat{T}[(\prod_{k=j+1}^M P_k) I_{mpnq} (\prod_{k=1}^{j-1} P_k)] | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | U | \Phi \rangle}$$

$$+ i\hbar[(1 - \delta_{js}) + \delta_{js}] \times$$

$$\left\{ \frac{\langle \Phi' | \hat{T}[(\prod_{k=j+1}^M P_k)(-\frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{\beta\delta} \Theta_{m\beta n\delta} \rho_{\beta\delta} - \frac{\epsilon^2}{\hbar^2} \sum_{\beta\delta} I_{m\beta n\delta} \xi_{\beta\delta}(j))(\prod_{k=1}^{j-1} P_k)] | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | U | \Phi \rangle} \times \right. \\ \left. \frac{\langle \Phi' | \hat{T}[(\prod_{k=s+1}^M P_k)(-\frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{ab} \Theta_{paqb} \rho_{ab} - \frac{\epsilon^2}{\hbar^2} \sum_{ab} I_{paqb} \xi_{ab}(s))(\prod_{k=1}^{s-1} P_k)] | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | U | \Phi \rangle} \right\}$$

Sehr viel kürzer und kompakter wird Gleichung (4.53), wenn die Stationaritätsstellen $\xi_k = 0$ eingesetzt werden. Nach Sortierung in Faktoren δ_{ij} und $(1 - \delta_{ij})$ bekommt man:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \frac{\delta^2 \bar{S}}{\delta \xi \delta \xi'} \Big|_{\xi=0} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\delta_{js} \delta_{mp} \delta_{nq} \right. \quad (4.54) \\ + \frac{i}{\hbar} \delta_{js} \epsilon \left\{ \sum_{\lambda\mu\rho\sigma} v_{m\sigma n\rho}^{\frac{1}{2}} v_{\lambda p \mu q}^{\frac{1}{2}} \frac{\langle \Phi' | (\prod_{k=j+1}^M P) \Omega_{\sigma\rho\lambda\mu} (\prod_{k=1}^{j-1} P) | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | U | \Phi \rangle} \right. \\ - \sum_{\beta\delta ab} \Theta_{m\beta n\delta} \Theta_{paqb} \times \\ \left. \frac{\langle \Phi' | (\prod_{k=j+1}^M P) \rho_{\beta\delta} (\prod_{k=1}^{j-1} P) | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | U | \Phi \rangle} \frac{\langle \Phi' | (\prod_{k=s+1}^M P) \rho_{ab} (\prod_{k=1}^{s-1} P) | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | U | \Phi \rangle} \right\} \\ + \frac{i}{\hbar} \epsilon (1 - \delta_{js}) \sum_{ab\beta\delta} \Theta_{paqb} \Theta_{m\beta n\delta} \left\{ \frac{\langle \Phi' | \hat{T}[(\prod_{k=s+1}^M P) \rho_{ab} (\prod_{k=j+1}^{s-1} P) \rho_{\beta\delta} (\prod_{k=1}^{j-1} P)] | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | U | \Phi \rangle} \right. \\ \left. - \frac{\langle \Phi' | (\prod_{k=j+1}^M P) \rho_{\beta\delta} (\prod_{k=1}^{j-1} P) | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | U | \Phi \rangle} \frac{\langle \Phi' | (\prod_{k=s+1}^M P) \rho_{ab} (\prod_{k=1}^{s-1} P) | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | U | \Phi \rangle} \right\} \Big]$$

wobei hier

$$P_k|_{\xi_k=0} \equiv P = 1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} K\rho - \frac{i\epsilon}{\hbar} \tilde{\sigma}\Theta\rho \quad (4.55)$$

definiert wurde. Somit ist der Zeit-Ordnungsoperator nur noch im 4. Summanden von (4.54) erforderlich, da nicht bekannt ist, ob $j < s$ bzw. $s < j$. Erweitert man die jeweils 'links' von den Feldoperatoren stehenden Seiten bzw. zwischen den Operatoren nach

$$\prod_{k=j+1}^M P = \left(\prod_{k=1}^M P \right) \left(\prod_{k=1}^j P^{-1} \right) \quad , \quad \prod_{k=j+1}^{s-1} P = \left(\prod_{k=1}^{s-1} P \right) \left(\prod_{k=1}^j P^{-1} \right) \quad , \quad (4.56)$$

so können bei Durchführung des ϵ -Grenzwerts ($j \rightarrow t'$, $s \rightarrow t$) die Operatoren aus (4.54) folgendermaßen interpretiert werden:

$$\left(\prod_{k=j+1}^M P \right) \rho \left(\prod_{k=1}^{j-1} P \right) \longrightarrow U\rho(t') \quad (4.57)$$

$$\hat{T} \left[\left(\prod_{K=s+1}^M P \right) \rho \left(\prod_{k=j+1}^{s-1} P \right) \rho \left(\prod_{k=1}^{j-1} P \right) \right] \longrightarrow U \hat{T} [\rho(t) \rho(t')] \quad (4.58)$$

mit den Feldoperatoren in Heisenberg-Darstellung im Mean-Field-Fall:

$$\rho_{\alpha\gamma}(t)|_{\sigma=\bar{\sigma}} = U_{\bar{\sigma}}^+(t) \rho_{\alpha\gamma} U_{\bar{\sigma}}(t) \quad \text{bzw.} \quad \Omega_{\alpha\beta\gamma\delta}(t)|_{\sigma=\bar{\sigma}} = U_{\bar{\sigma}}^+(t) \Omega_{\alpha\beta\gamma\delta} U_{\bar{\sigma}}(t) \quad (4.59)$$

mit⁴

$$U_{\bar{\sigma}}^+(t) = e^{+\frac{i}{\hbar} h'_{\bar{\sigma}} t} \quad , \quad U_{\bar{\sigma}}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} h'_{\bar{\sigma}} t} \quad , \quad U = e^{-\frac{i}{\hbar} h'_{\bar{\sigma}} T} \quad . \quad (4.60)$$

Somit können in allen Nennern und Zählern die Eigenwertgleichungen (4.5, 4.6) ausgenutzt werden und die Eigenwerte kürzen sich weg. Gleichzeitig wird im δ_{ij} -Term die Zeitordnung überflüssig und mit (4.59) gilt im Mean-Field-Fall:

$$\langle \Phi' | \rho(t) | \Phi \rangle = \langle \Phi' | U_{\bar{\sigma}}^+(t) \rho U_{\bar{\sigma}}(t) | \Phi \rangle = \langle \Phi' | \rho | \Phi \rangle \quad . \quad (4.61)$$

Geht man wieder in diskrete Darstellung zurück, so erhält man für Gleichung (4.54):

$$\begin{aligned} & \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\delta_{js} \delta_{mp} \delta_{nq} + \delta_{js} \epsilon \frac{i}{\hbar} \left\{ \sum_{\sigma\lambda\rho\mu} v_{m\sigma n\rho}^{\frac{1}{2}} v_{\lambda\rho\mu q}^{\frac{1}{2}} \frac{\langle \Phi' | \Omega_{\sigma\rho\lambda\mu} | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} \right. \right. \\ & \quad \left. \left. - \sum_{\beta\delta ab} \Theta_{m\beta n\delta} \Theta_{paqb} \frac{\langle \Phi' | \rho_{\beta\delta} | \Phi \rangle \langle \Phi' | \rho_{ab} | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} \right\} \right. \\ & \quad \left. + \frac{i}{\hbar} \epsilon (1 - \delta_{js}) \sum_{ab\beta\delta} \Theta_{paqb} \Theta_{m\beta n\delta} \left\{ \frac{\langle \Phi' | \hat{T}[\rho_{ab}(s) \rho_{\beta\delta}(j)] | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} \right. \right. \\ & \quad \left. \left. - \frac{\langle \Phi' | \rho_{\beta\delta}(j) | \Phi \rangle \langle \Phi' | \rho_{ab}(s) | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} \right\} \right] \\ & \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\delta_{js} + \delta_{js} \frac{\epsilon i}{\hbar} S + (1 - \delta_{js}) \epsilon \frac{i}{\hbar} \Theta D \Theta^T \right] \quad (4.62) \end{aligned}$$

mit den Abkürzungen

$$S \equiv V^{\frac{1}{2}} \langle \Omega \rangle V^{\frac{1}{2}} - \Theta \langle \rho \rangle \langle \rho' \rangle \Theta^T \quad (4.63)$$

$$D \equiv \langle \rho \rho' \rangle - \langle \rho \rangle \langle \rho' \rangle \quad (4.64)$$

und

$$\rho(l) = \left(\prod_{k=1}^l P^{-1} \right) \rho \left(\prod_{k=1}^{l-1} P \right) \quad , \quad l = s, j \quad . \quad (4.65)$$

Dabei wurden im Hinblick auf eine übersichtliche Notation in (4.62) die Eigenwertgleichungen (4.5, 4.6) für den Operator U schon vorweggenommen.

Zur Interpretation der drei Summanden von (4.62) kann Folgendes gesagt werden: Das Kronecker-Delta des 1. Summanden sorgt bei Vernachlässigung der anderen beiden Terme für den in (2.46) beschriebenen Fall: In erster Näherung wird die Pfadintegralnorm \mathcal{N} genau durch die Gauß-Integration weggekürzt; d.h. $\Delta_{korr} \approx 1$. Im 2. Summanden taucht der angekündigte Ω -Term auf. Er ist eine direkte Folge

⁴ U^+ bedeutet also nicht hermitisch adjungierter Operator zu U , da h' nicht hermitisch ist!

aus der 'künstlichen' Konstruktion des Pfadintegrals (2.83) unter Einführung von Θ . In ihm wird zum ersten Mal durch die Anwesenheit von v Einfluß durch die eigentliche Wechselwirkung genommen. Dieser Term kann weiter unten in natürlicher Weise zum stationären Wert des Funktionals (4.41) zugeschlagen werden. Der 3. Summand beschreibt Dichtekorrelationen, die mit dem Versuchsfeld Θ gewichtet sind, und wird auf RPA-Korrekturen zum Mean-Field führen.

Die Weiterverarbeitung der Ergebnisse von (4.62) in (4.48) ergibt unter Einbeziehung der Matrixidentität (2.58) und Reihenentwicklung des Logarithmus⁵ um die Einheitsmatrix (2.59) die Form:

$$\begin{aligned} \Delta_{korr} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} e^{-\frac{1}{2} \text{Tr} \ln(1 + \frac{i}{\hbar} \epsilon \delta S + \epsilon(1-\delta) \frac{i}{\hbar} \Theta D \Theta^T)} \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} e^{\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \text{Tr}(-\epsilon \frac{i}{\hbar} \delta S - \epsilon(1-\delta) \frac{i}{\hbar} \Theta D \Theta^T)^n} . \end{aligned} \quad (4.66)$$

Analog zur Argumentation um die Gleichung (2.81) werden die Potenzen von $\epsilon \delta S$ im Limes $\epsilon \rightarrow 0$ nur für $n = 1$ 'überleben', da die zeitlichen Delta-Funktionen δ_{j_s} die Zeit-Summationen in Matrixprodukten von $(\epsilon \delta S)$ unterdrücken, sodaß nur die zeitliche Spurbildung in (4.66) bleibt. Somit ist die ϵ -Potenz für $n \geq 2$ größer als die Anzahl der Zeit-Summationen, und damit verschwinden die betroffenen Terme im Grenzwert $\epsilon \rightarrow 0$. Die gleiche Überlegung gilt für den $\epsilon \delta \Theta D \Theta^T$ -Term.

Insgesamt kann der Exponent von (4.66) also umgeschrieben werden als:

$$-\frac{i}{2\hbar} \text{Tr}(\epsilon \delta S) + \frac{i}{2\hbar} \text{Tr}(\epsilon \delta \Theta D \Theta^T) + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \text{Tr} \left(-\epsilon \frac{i}{\hbar} \Theta D \Theta^T \right)^n . \quad (4.67)$$

Wir konzentrieren uns im Folgenden nur auf den Beitrag des ersten Summanden von (4.67); die restlichen Terme werden im nächsten Abschnitt behandelt. Die Spurbildung beinhaltet Orts- und Zeitkoordinaten.

Der Zeitanteil kann für den $\epsilon \delta S$ -Term unter Grenzwertbildung sofort ausgeführt werden: Da S nach (4.62) von allen Zeitindizes unabhängig ist, ergibt die Zeitsummation mit $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon \sum_k 1 = T$:

$$\Delta_{korr}^{S-Term} = e^{-\frac{iT}{2\hbar} \text{tr} S} , \quad (4.68)$$

wobei tr jetzt nur noch die Spur im Hilbert-Raum beinhaltet. Aus (4.62) können mittels Wick-Theorem für zeitonabhängige Operatoren die Erwartungswertbildungen analog zu (3.12) vorgenommen werden:

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda\mu\rho\sigma} \langle \Omega \rangle_{\sigma\rho\lambda\mu} v_{\overline{m}\sigma n\rho}^{\frac{1}{2}} v_{\lambda\rho\mu q}^{\frac{1}{2}} - \sum_{\beta\delta ab} \Theta_{m\beta n\delta} \Theta_{paqb} \langle \rho \rangle_{\beta\delta} \langle \rho \rangle_{ab} = \\ \sum_{\lambda\mu\rho\sigma} (\overline{a_{\lambda}^{\dagger} a_{\mu}} \overline{a_{\sigma}^{\dagger} a_{\rho}} - \overline{a_{\lambda}^{\dagger} a_{\rho}} \overline{a_{\sigma}^{\dagger} a_{\mu}}) v_{\overline{m}\sigma n\rho}^{\frac{1}{2}} v_{\lambda\rho\mu q}^{\frac{1}{2}} - \sum_{\beta\delta ab} \Theta_{m\beta n\delta} \Theta_{paqb} \overline{a_{\beta}^{\dagger} a_{\delta}} \overline{a_a^{\dagger} a_b} \equiv F_{pmqn} , \end{aligned} \quad (4.69)$$

so daß für die Spur gilt:

$$\begin{aligned} \text{tr} F_{pmqn} &= \sum_{pq} F_{ppqq} = \\ &= \sum_{\lambda\mu\rho\sigma} \langle \lambda\sigma \mid v \mid \mu\rho \rangle \overline{a_{\lambda}^{\dagger} a_{\mu}} \overline{a_{\sigma}^{\dagger} a_{\rho}} - \sum_{\beta\delta ab} (\Theta^T \Theta)_{a\beta b\delta} \overline{a_{\beta}^{\dagger} a_{\delta}} \overline{a_a^{\dagger} a_b} . \end{aligned} \quad (4.70)$$

⁵Mit der Annahme, daß die letzten beiden Summanden klein im Vergleich zum ersten sind, gibt die Reihenentwicklung mit Konvergenzradius 1 Sinn.

Für die Wahl (4.32) für das Versuchsfeld $\Theta^T \Theta$ gilt dann weiter:

$$\begin{aligned} \text{tr} F_{pmqn} &= & (4.71) \\ \sum_{\lambda\mu\rho\sigma} \left[\langle \lambda\sigma | v | \mu\rho \rangle - \langle \lambda\sigma | v | \mu\rho \rangle - f_{\lambda\sigma\mu\rho} \right] \overline{a_\lambda^\dagger a_\mu} \overline{a_\sigma^\dagger a_\rho} &= -N \bar{\eta} , \end{aligned}$$

und damit wird der Beitrag (4.68) der quadratischen Korrektur⁶ zu:

$$\Delta_{korr}^{S-Term} = e^{\frac{i}{2\hbar} N \bar{\eta} T} . \quad (4.72)$$

Insgesamt sind wir dadurch jetzt in der Lage, die TIMF-Amplitude als stationären Wert des Funktionals anzugeben, denn (4.41) wird mit Δ_{korr}^{S-Term} :

$$\begin{aligned} \langle \chi' | \frac{1}{E - \mathcal{H} + i\kappa} | \chi \rangle &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dT e^{\frac{i}{\hbar} (\bar{\eta} + i\kappa) T} \frac{\langle \Phi' | \chi \rangle \langle \chi' | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} \\ &= \frac{\langle \Phi' | \chi \rangle \langle \chi' | \Phi \rangle}{\bar{\eta} \langle \Phi' | \Phi \rangle} , \end{aligned} \quad (4.73)$$

was offensichtlich (1.27, 1.44) entspricht; und die Orbitale von Φ, Φ' erfüllen nach (4.24) und (4.31) die erforderlichen TIMF-Gleichungen. Der S -Term in der quadratischen Korrektur bringt den benötigten Phasen-Faktor; die MF-Entwicklung bis zur 2. Ordnung um $\tilde{\sigma}$ erzeugt den gewünschten Funktionalwert.

4.4 Gaußsche Näherung (2. Teil)

In diesem Abschnitt werden die ab Gleichung (4.67) vernachlässigten Terme bearbeitet. Das Problem der weiteren Rechnung liegt in der Auswertung der Spur über das n -fache Matrixprodukt. Die Lösung hierfür ist die Diagonalisierung der betroffenen Matrizen (Eigenwertproblem) und die Bestimmung der Zeit-Spur im Frequenzraum. Zunächst wird für den 3. Summanden aus (4.67) die Invarianz der Spur unter zyklischer Vertauschung der Operatoren ausgenutzt. Mit

$$\sum_{ab\beta\delta} \Theta_{m\beta n\delta} D_{\beta a \delta b}(j, s) \Theta_{p a q b} = (\Theta D \Theta^T)_{mpnq} \quad (4.74)$$

folgt für dessen n -te Potenz unter einmaliger zyklischer Vertauschung der Matrizen

$$\begin{aligned} (\Theta D \Theta^T)^n &= \underbrace{\Theta D \Theta^T \Theta D \Theta^T \dots \Theta D \Theta^T}_{n\text{-mal}} \\ &= \underbrace{D \Theta^T \Theta D \Theta^T \Theta \dots D \Theta^T \Theta}_n = (D \Theta^T \Theta)^n = (DW)^n . \end{aligned} \quad (4.75)$$

In einem zweiten Schritt kann mit dem Wick-Theorem für zeitabhängige Operatoren der Dichtekorrelationsterm (4.64) umgeschrieben werden:

$$D_{\beta a \delta b}(j, s) = \frac{\langle \Phi' | \hat{T}[a_\beta^\dagger(j) a_\delta(j) a_a^\dagger(s) a_b(s)] | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} -$$

⁶Die Wahl von $\Theta^T \Theta = \bar{v} + \tilde{f}$ bringt das gleiche Ergebnis.

$$\begin{aligned}
& \frac{\langle \Phi' | a_{\beta}^{\dagger}(j)a_{\delta}(j) | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} \frac{\langle \Phi' | a_a^{\dagger}(s)a_b(s) | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} \\
&= \frac{\langle \Phi' | \hat{T}[a_{\beta}^{\dagger}(j)a_b(s)] | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} \frac{\langle \Phi' | \hat{T}[a_{\delta}(j)a_a^{\dagger}(s)] | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} . \quad (4.76)
\end{aligned}$$

Im Gegensatz zu (3.2) werden Kontraktionen von zwei Operatoren jetzt über die Differenz von ihrem T-Produkt und dem Normal-Produkt definiert. Für beliebige Erzeuger oder Vernichter $c_1(t_1)$; $c_2(t_2)$ heißt das also:

$$\overline{c_1(t_1)c_2(t_2)} \equiv \hat{T}[c_1(t_1)c_2(t_2)] - : c_1(t_1)c_2(t_2) : \quad (4.77)$$

Eine direkte Folgerung hieraus ist, daß Kontraktionen von Erzeugern (bzw. Vernichtern) untereinander verschwinden und Kontraktionen, in denen jeweils ein Erzeuger und Vernichter auftauchen, ausgedrückt werden können als:

$$\overline{a_{\alpha}(t_1)a_{\beta}^{\dagger}(t_2)} = \theta(t_1 - t_2) \langle \alpha(t_1) | \beta(t_2) \rangle = -\overline{a_{\beta}^{\dagger}(t_2)a_{\alpha}(t_1)} \quad t_1 \neq t_2 \quad (4.78)$$

Somit hängen die Kontraktionen von der jeweiligen Zeitentwicklung der Operatoren (bzw. der assoziierten Zustände) ab. Für den Fall zeitgleicher Operatoren $t_1 = t_2$ wird das \hat{T} -Produkt durch die gegebene Reihenfolge bestimmt.

Dabei wurde in (4.76) investiert, daß mittels kanonischer Transformation erreicht werden kann, daß die Erwartungswerte der Normalprodukte zwischen ihren neuen Vakua Φ, Φ' verschwinden und somit für die Kontraktionen keinen Beitrag geben:

$$\frac{\langle \Phi' | \hat{T}[a_{\beta}^{\dagger}(j)a_b(s)] | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} = \overline{a_{\beta}^{\dagger}(j)a_b(s)} \quad (4.79)$$

$$\frac{\langle \Phi' | \hat{T}[a_{\delta}(j)a_a^{\dagger}(s)] | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} = \overline{a_{\delta}(j)a_a^{\dagger}(s)} \quad (4.80)$$

und

$$\begin{aligned}
& \frac{\langle \Phi' | \hat{T}[a_{\beta}^{\dagger}(j)a_{\delta}(j)a_a^{\dagger}(s)a_b(s)] | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} = \\
& \overline{a_{\beta}^{\dagger}(j)a_b(s)} \overline{a_{\delta}(j)a_a^{\dagger}(s)} + \overline{a_{\beta}^{\dagger}(j)a_{\delta}(j)} \overline{a_a^{\dagger}(s)a_b(s)} , \quad (4.81)
\end{aligned}$$

was genau (4.76) beweist.

Insgesamt kann dann der Term $\Theta D \Theta^T$ unter der Spur umgeschrieben werden als:

$$\sum_{ab} W_{ambn} \overline{a_{\beta}^{\dagger}(j)a_b(s)} \overline{a_{\delta}(j)a_a^{\dagger}(s)} \quad (4.82)$$

Zur Auswertung der Kontraktionen [19] geht man jetzt in die Biorthogonalbasis Seite 10, d.h. die schon bestimmten N Lochorbitale (4.24) ergänzt man durch den Teilchenraum über weitere Eigenfunktionen von h'_{σ} . Durch Gebrauch von (4.78) und der Zeitabhängigkeit der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren (4.59) unter Mean-Field-Bedingungen erhält man explizit:

	$\overline{a_\beta^\dagger(t_1)a_b(t_2)}$	$\overline{a_\delta(t_1)a_a^\dagger(t_2)}$	beide Orb. aus
$t_1 > t_2$	0 $\langle \varphi'_b \varphi_\beta \rangle \delta_{\beta b} e^{-\frac{i}{\hbar}(t_2-t_1)\eta_\beta}$	$\langle \varphi'_\delta \varphi_\alpha \rangle \delta_{\delta\alpha} e^{-\frac{i}{\hbar}(t_1-t_2)\eta_\delta}$ 0	Teilchenraum Lochraum
$t_2 > t_1$	$-\langle \varphi'_b \varphi_\beta \rangle \delta_{\beta b} e^{-\frac{i}{\hbar}(t_2-t_1)\eta_\beta}$ 0	0 $-\langle \varphi'_\delta \varphi_\alpha \rangle \delta_{\delta\alpha} e^{-\frac{i}{\hbar}(t_1-t_2)\eta_\delta}$	Teilchenraum Lochraum

Das Produkt der beiden Kontraktionen aus (4.82) kann deshalb kompakt ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned} \overline{a_\beta^\dagger(t_1)a_b(t_2)} \overline{a_\delta(t_1)a_a^\dagger(t_2)} &= \delta_{\beta b} \delta_{\delta\alpha} e^{-\frac{i}{\hbar}(\eta_a - \eta_b)(t_1 - t_2)} \\ &\times \left[\theta(t_1 - t_2) n_{\beta b} (1 - n_{\delta\alpha}) + \theta(t_2 - t_1) n_{\delta\alpha} (1 - n_{\beta b}) \right] \end{aligned} \quad (4.83)$$

mit der Stufenfunktion θ und den Matrixelementen des Projektors auf den Lochraum \hat{n} und den Teilchenraum $(\mathbb{1} - \hat{n})$:

$$n_{\beta b} \equiv \sum_{i=1}^N \frac{\langle \varphi'_i | \varphi_\beta \rangle \langle \varphi'_b | \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} \quad (4.84)$$

Wenn⁷ man versucht, den 3. Term von (4.67)

$$-\frac{1}{2} \text{Tr} \left(\ln \left(1 + \frac{\epsilon}{\hbar} i DW \right) \right) \quad (4.86)$$

auszurechnen, so stellt man fest, daß die Zeitspur nicht direkt ausgewertet werden kann, weil das Argument des Logarithmus nicht diagonal in der Zeit ist. Nach (4.83) ist der gesamte Ausdruck unter der Spur aber nur von der Differenz $\tau = t_1 - t_2$ abhängig. Deshalb bietet es sich an, die Spurbildung im Fourierraum durchzuführen. Fouriertransformation von (4.83) bezüglich der Variablen τ führt auf:

$$\begin{aligned} D_{\beta a \delta b}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} D_{\beta a \delta b}(\tau) = \\ i\delta_{\beta b} \delta_{\delta\alpha} &\left[\frac{n_{\beta b} (1 - n_{a\delta})}{\omega - (\eta_a - \eta_b) \frac{1}{\hbar}} - \frac{n_{a\delta} (1 - n_{\beta b})}{\omega - (\eta_a - \eta_b) \frac{1}{\hbar}} \right] = i \frac{\delta_{\beta b} \delta_{\delta\alpha} (n_{a\delta} - n_{\beta b})}{\frac{1}{\hbar} (\eta_a - \eta_b) - \omega} \end{aligned} \quad (4.87)$$

Aus Bequemlichkeit kann man nun

$$Q(\omega) := \frac{D(\omega)}{\hbar i} \quad (4.88)$$

definieren, so daß in (4.86) für die zeitliche Spur-Summe geschrieben werden kann ([4] S. 146-150):

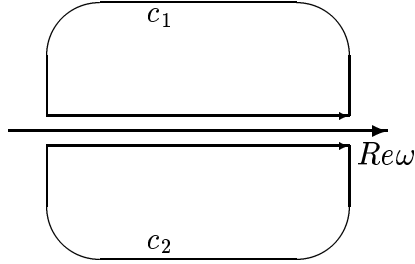
$$-\frac{1}{2} \frac{T}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{tr} \ln(1 - Q(\omega)W) \quad (4.89)$$

⁷In der weiteren Rechnung wird o.B.d.A. davon ausgegangen, daß unsere Biorthogonalbasis normiert ist:

$$\langle \varphi'_\alpha | \varphi_\alpha \rangle \stackrel{!}{=} 1 \quad \forall \alpha \quad (4.85)$$

Hierbei wurde der lineare Charakter der Fouriertransformation bezüglich Spur und Logarithmusreihe ausgenutzt. Als Ergebnis wurde also die Zeitspurbildung auf das vorerst reell definierte Frequenz-Integral abgewälzt.

Zur Berechnung des Integrals bedienen wir uns der Funktionentheorie: Wir fassen nun ω als eine in die komplexe Ebene fortgesetzte Variable auf; der Integrand von (4.89) wird dann eine analytisch fortgesetzte Funktion. Da für $Q(\omega)$ das Konvergenzverhalten für $|\omega| \rightarrow \infty$ mit $\frac{1}{\omega}$ feststeht, fällt der Logarithmus schneller als $\frac{1}{\omega}$. Damit ist es möglich, den reellen Integrationsweg in der oberen (oder unteren) Hemisphäre im 'Unendlichen' zu schließen. Das dadurch entstehende Integral besitzt den gleichen Wert wie (4.89), kann aber mittels Residuensatz berechnet werden.



Wegen des geschlossenen Integrationsweges kann mit Hilfe einer partiellen Integration im Komplexen der Logarithmus-Term eliminiert werden ([3] S. 540):

$$\oint_{(c_1)} d\omega \, 1 \operatorname{tr}(\ln(1 - QW)) = \omega \operatorname{tr} \ln(1 - QW) \Big| - \oint_{(c_1)} d\omega \, \omega \left(\operatorname{tr} \frac{d}{d\omega} \ln(1 - QW) \right) \quad , \quad (4.90)$$

wobei der ausintegrierte Term offensichtlich verschwindet. Wenn man analog zu [3] eine Matrix L mit der Eigenschaft

$$1 - Q(\omega)W \equiv -Q(\omega)L^{-1}(\omega) \quad (4.91)$$

einführt, dann ergibt elementare Matrizenrechnung:

$$L^{-1}(\omega) = -Q^{-1}(\omega) + W \quad \text{bzw.} \quad L(\omega) = -Q(\omega) + Q(\omega)WL(\omega) \quad . \quad (4.92)$$

Hiermit kann die Logarithmus-Ableitung aus (4.90) ausgedrückt werden:

$$\frac{d}{d\omega} \ln(1 - QW) = Q^{-1} \frac{dQ}{d\omega} + L \frac{dL^{-1}}{d\omega} \quad (4.93)$$

und die Spurbildung der einzelnen Terme kann vorgenommen werden.

Durch Ableiten von (4.88) erhält man:

$$\left(\frac{d}{d\omega} Q \right)_{\beta a \delta b} = \frac{1}{\hbar} \delta_{\beta b} \delta_{\delta a} \frac{n_{a\delta} - n_{\beta b}}{\left(\frac{1}{\hbar} (\eta_a - \eta_b) - \omega \right)^2} \quad . \quad (4.94)$$

Da die diagonalen Matrixelemente von D bzw. Q verschwinden, wenn (a, b) bzw. (δ, β) keine Teilchen-Loch-Konfigurationen beschreiben, reicht es, sich bei der Spurbildung auf Teilchen-Loch-Elemente zu beschränken, d.h. mit

$$\delta_{a\delta} \delta_{\beta b} (n_{a\delta} - n_{\beta b}) \in \{1; -1\} \quad (4.95)$$

wird die Matrix Q invertierbar:

$$Q_{manb}^{-1} = \hbar \delta_{mb} \delta_{na} \frac{\frac{1}{\hbar}(\eta_a - \eta_b) - \omega}{n_{na} - n_{mb}} . \quad (4.96)$$

Der erste Summand von (4.93) kann jetzt berechnet und die in (4.90) geforderte Spurbildung durchgeführt werden⁸:

$$\text{tr} \left(Q^{-1} \frac{d}{d\omega} Q \right) = \sum_{ph} \left(\frac{1}{\frac{1}{\hbar}(\eta_p - \eta_h) - \omega} - \frac{1}{\frac{1}{\hbar}(\eta_p - \eta_h) + \omega} \right) \quad (4.97)$$

Unter Ausnutzung von (4.92) bzw. (4.96) gilt mit (4.95):

$$\frac{dL^{-1}(\omega)}{d\omega} = -\frac{dQ^{-1}(\omega)}{d\omega} \quad \text{und} \quad \left(\frac{dQ^{-1}}{d\omega} \right)_{manb} = \hbar \delta_{mb} \delta_{na} (n_{mb} - n_{na}) . \quad (4.98)$$

Die diagonale Matrix $\frac{dQ^{-1}}{d\omega}$ hat die Blockgestalt $\begin{pmatrix} \hbar & 0 \\ 0 & -\hbar \end{pmatrix}$, da $n_{mb} - n_{na} = 1$ für $m, b \in \text{Lochraum}$ und $n, a \in \text{Teilchenraum}$, bzw. -1 für die vertauschten Rollen. Aufgrund von (4.92) hat L die Gestalt:

$$\begin{aligned} L_{\beta a \delta b} &= -\frac{1}{\hbar} \delta_{\beta b} \delta_{\delta a} \frac{n_{a\delta} - n_{\beta b}}{\frac{1}{\hbar}(\eta_a - \eta_b) - \omega} + \frac{1}{\hbar} \sum_{mnkj} \delta_{\beta n} \delta_{\delta m} \frac{n_{m\delta} - n_{\beta n}}{\frac{1}{\hbar}(\eta_\delta - \eta_\beta) - \omega} W_{mknj} L_{kajb} \\ &= \frac{1}{\hbar} \frac{n_\beta - n_\delta}{\frac{1}{\hbar}(\eta_\delta - \eta_\beta) - \omega} \left(\delta_{\beta b} \delta_{\delta a} - \sum_{kj} W_{\delta k \beta j} L_{kajb} \right) \end{aligned} \quad (4.99)$$

mit $n_i = n_{ii}$. Wegen des Auftretens des Teilchen-Loch-Projektors können die beiden zu betrachtenden Fälle ($\beta = h$ und $\delta = p$ bzw. $\delta = h$ und $\beta = p$) separat angegeben werden. Zusätzlich wird die Summe (k, j) in Summen über (p', h') und (h', p') aufgespalten:

$$\hbar L_{hapb} = \frac{1}{\frac{1}{\hbar}(\eta_p - \eta_h) - \omega} \left(\delta_{hb} \delta_{pa} - \sum_{h'p'} W_{ph'h'p'} L_{h'ap'b} - \sum_{p'h'} W_{pp'h'h'} L_{p'ah'b} \right) \quad (4.100)$$

bzw.

$$\hbar L_{pahb} = -\frac{1}{\frac{1}{\hbar}(\eta_h - \eta_p) - \omega} \left(\delta_{pb} \delta_{ha} - \sum_{h'p'} W_{hh'pp'} L_{h'ap'b} - \sum_{p'h'} W_{hp'ph'} L_{p'ah'b} \right) . \quad (4.101)$$

Die Pole von $L(\omega)$ liegen nach [20] genau bei den Frequenzen ω_n , die Eigenwerte der Matrix-Gleichung sind, die durch Streichen der inhomogenen Anteile von (4.100, 4.101) entsteht. Umbenennung von L_{hapb} in X_{ph}^n bzw. L_{pahb} in Y_{ph}^n ergibt dann die Eigenwertgleichung für die Bestimmung der Singularitäten von L :

$$(\eta_p - \eta_h) X_{ph}^n + \sum_{h'p'} W_{ph'h'p'} X_{p'h'}^n + \sum_{p'h'} W_{pp'h'h'} Y_{p'h'}^n = \hbar \omega_n X_{ph}^n \quad (4.102)$$

⁸Im Folgenden werden mit p Teilchen- und mit h Lochorbitale bezeichnet!

und

$$(\eta_p - \eta_h)Y_{ph}^n + \sum_{h'p'} W_{hh'pp'} X_{p'h'}^n + \sum_{p'h'} W_{hp'ph'} Y_{p'h'}^n = -\hbar\omega_n Y_{ph}^n \quad , \quad (4.103)$$

wobei der Index n die Eigenwerte inkl. Eigenfunktionen durchnumeriert. Eine Umschreibung auf eine Matrixgestalt bringt dann:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^n \\ Y^n \end{pmatrix} = \hbar\omega_n \begin{pmatrix} X^n \\ -Y^n \end{pmatrix} \quad (4.104)$$

mit den Blockmatrizen⁹

$$A_{pp'hh'} = \delta_{pp'}\delta_{hh'}(\eta_p - \eta_h) + W_{ph'hp'} = \delta_{pp'}\delta_{hh'}(\eta_p - \eta_h) + \langle \varphi'_p \varphi'_{h'} | v | \varphi_h \varphi_{p'} \rangle \quad (4.105)$$

$$B_{pp'hh'} = W_{pp'hh'} = \langle \varphi'_p \varphi'_{p'} | v | \varphi_h \varphi_{h'} \rangle \quad (4.106)$$

$$C_{pp'hh'} = W_{hh'pp'} = \langle \varphi'_h \varphi'_{h'} | v | \varphi_p \varphi_{p'} \rangle \quad (4.107)$$

$$D_{pp'hh'} = \delta_{pp'}\delta_{hh'}(\eta_p - \eta_h) + W_{hp'ph'} = \delta_{pp'}\delta_{hh'}(\eta_p - \eta_h) + \langle \varphi'_h \varphi'_{p'} | v | \varphi_p \varphi_{h'} \rangle \quad . \quad (4.108)$$

Dabei wurde beim Einsetzen von W (4.32) ausgenutzt, daß der separable Anteil wegen $\langle \varphi'_p | \varphi_h \rangle = \langle \varphi'_h | \varphi_p \rangle = 0$ in der ausgewählten Biorthonormalbasis verschwindet:

$$f_{pp'hh'} = f_{hp'ph'} = f_{ph'hp'} = f_{hh'pp'} = 0 \quad . \quad (4.109)$$

Wie bei [8] erfüllen die Blockmatrizen die Relationen

$$A_{pp'hh'} = D_{p'ph'h} \quad , \quad B_{pp'hh'} = B_{p'ph'h} \quad , \quad C_{pp'hh'} = C_{p'ph'h} \quad . \quad (4.110)$$

Aufgrund dieser Symmetrie läßt sich zeigen [8], daß die Eigenwerte paarweise mit $(\omega_n, -\omega_n)$ auftreten, d.h. es gibt Vektoren mit:

$$(Y^n; X^n) \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \hbar(-\omega_n) (Y^n; -X^n) \quad . \quad (4.111)$$

Trotz der Nichthermitizität von $\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$ existiert zu jedem $\begin{pmatrix} X^n \\ Y^n \end{pmatrix}$ ein Vektor $\begin{pmatrix} U^n \\ V^n \end{pmatrix}$, der genau die adjungierten Eigenschaften besitzt:

$$(U^n; V^n) \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \hbar\omega_n (U^n; -V^n) \quad (4.112)$$

bzw.

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V^n \\ U^n \end{pmatrix} = \hbar(-\omega_n) \begin{pmatrix} V^n \\ -U^n \end{pmatrix} \quad . \quad (4.113)$$

Die Rechts- und Links-Eigenvektoren sind hier schon biorthogonalisiert, denn aus

$$\begin{aligned} (U^m; V^m) \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X^n \\ Y^n \end{pmatrix} &= \hbar\omega_m (U^m X^n - V^m Y^n) \\ &= \hbar\omega_n (U^m X^n - V^m Y^n) \quad , \quad (4.114) \end{aligned}$$

⁹Die Indexfolge ist im Vergleich zu (1.55-1.58) verändert, da dort die Matrix-Index-Reihenfolge aus [8] übernommen wurde.

folgt bei Nichtentartung der Eigenwerte:

$$(U^m; -V^m) \begin{pmatrix} X^n \\ Y^n \end{pmatrix} = \sum_{ph} (U_{ph}^m X_{ph}^n - V_{ph}^m Y_{ph}^n) = 0 \quad \text{für } m \neq n \quad . \quad (4.115)$$

Für die Normen legt man fest [20]:

$$(U^m; -V^m) \begin{pmatrix} X^m \\ Y^m \end{pmatrix} = \begin{cases} +1 & \text{für Eigenwerte } \text{Im}\omega_m > 0 \\ -1 & \text{für Eigenwerte } \text{Im}\omega_m < 0 \end{cases} \quad . \quad (4.116)$$

Setzt man die Vollständigkeit der Biorthonormalbasis $(U^n; V^n), \begin{pmatrix} X^n \\ Y^n \end{pmatrix}$ für den betrachteten Teilchen-Loch-Raum voraus, so läßt sich die Matrix L (4.99) in ihrer Entwicklung nach diesen Eigenfunktionen angeben¹⁰:

$$L_{\beta a \delta b}(\omega) = \quad (4.117)$$

$$\frac{1}{\hbar} \sum_{\omega_\nu \in \mathbb{H}^+} \frac{1}{\omega_\nu - \omega} \begin{pmatrix} X^\nu \\ Y^\nu \end{pmatrix} (U^\nu; V^\nu) - \frac{1}{\hbar} \sum_{\omega_\nu \in \mathbb{H}^-} \frac{1}{\omega_\nu - \omega} \begin{pmatrix} X^\nu \\ Y^\nu \end{pmatrix} (U^\nu; V^\nu) ,$$

wobei die Indizes a, b in X^ν, Y^ν und β, δ in U^ν, V^ν versteckt sind.

Der gesamte 2. Summand aus (4.93) ergibt unter Zusammenfassung der Ergebnisse (4.98, 4.117):

$$L \frac{dL^{-1}}{d\omega} = -\hbar L \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.118)$$

$$= - \sum_{\omega_\nu \in \mathbb{H}^+} \frac{1}{\omega_\nu - \omega} \begin{pmatrix} X^\nu \\ Y^\nu \end{pmatrix} (U^\nu; -V^\nu) + \sum_{\omega_\nu \in \mathbb{H}^-} \frac{1}{\omega_\nu - \omega} \begin{pmatrix} X^\nu \\ Y^\nu \end{pmatrix} (U^\nu; -V^\nu)$$

und damit unter Gebrauch von (4.116):

$$\text{tr} L \frac{dL^{-1}}{d\omega} = - \sum_{\omega_\nu \in \mathbb{H}^+} \frac{1}{\omega_\nu - \omega} - \sum_{\omega_\nu \in \mathbb{H}^-} \frac{1}{\omega_\nu - \omega} \quad . \quad (4.119)$$

Für das gewünschte Integral (4.89) ergibt sich dann mit (4.97, 4.119) mittels Residuensatz das vorläufige Endergebnis:

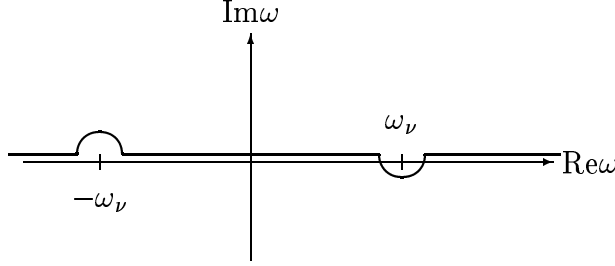
$$-\frac{T}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{tr} \ln(1 - QW) =$$

$$\frac{T}{4\pi} 2\pi i \left(\sum_{\substack{p,h \\ \text{Im}(\eta_p - \eta_h) > 0}} \frac{1}{\hbar} (\eta_p - \eta_h) - \sum_{\substack{p,h \\ \text{Im}(\eta_p - \eta_h) < 0}} \frac{1}{\hbar} (\eta_h - \eta_p) - \sum_{\omega_\nu \in \mathbb{H}^+} \omega_\nu \right) =$$

$$\frac{i T}{\hbar 2} \left(\sum_{p,h} (\eta_p - \eta_h) - \hbar \sum_{\omega_\nu \in \mathbb{H}^+} \omega_\nu \right) \quad . \quad (4.120)$$

¹⁰Das Problem des Auftretens von Nullmoden ($\omega_\nu = 0$) wird mit Hinweis auf [3] (S. 313-317) ignoriert.

Die Eigenfrequenzen ω_ν werden nun wegen der geschwächten Symmetrie im Vergleich zur 'normalen' RPA-Matrix i.a. nicht reell sein. Um auch Pole auf der reellen Achse zu berücksichtigen, wird bei der obigen Anwendung des Residuensatzes vereinbart, daß für $\omega > 0$ Pole eingeschlossen und für $\omega < 0$ ausgeschlossen werden. Der Integrationsweg wird also folgendermaßen für assoziierte reelle Pole 'deformiert':



Wegen der Symmetrie der Eigenwerte ω_ν und von (4.97) unter Austausch von $\omega \rightarrow -\omega$ erkennt man, daß dem Integral der gleiche Wert zugeschrieben worden wäre, wenn der Integrationsweg in der unteren Halbebene geschlossen worden wäre. Denn hier hätte der Residuensatz $-2\pi i$ geliefert, aber die Residuen hätten genau die entgegengesetzten Vorzeichen.

Die Anwendung des Residuensatzes erzwingt hier die Aufteilung der Frequenzen in $\text{Im}\omega_\nu < 0$ bzw. $\text{Im}\omega_\nu > 0$ für die Berechnung von $\text{Tr}\omega = \sum_{\text{Im}\omega_\nu > 0} \omega_\nu$ (vgl. [8]). Nach [3] ist durch 'Fouriertransformation über die imaginäre Achse' auch eine Aufteilung in $\text{Re}\omega < 0$, $\text{Re}\omega > 0$ möglich.

Anschließend wird nun die Berechnung des 2. Summanden aus (4.67) angegeben. Analog zur Auswertung von $\text{Tr}(\epsilon\delta S)$ kommt man wegen δ auf zeitunabhängige Operatoren, was die Zeitspur trivial macht:

$$\frac{1}{2\hbar} \text{Tr}(\epsilon\delta DW) = \frac{1}{2\hbar} T \text{tr} \left(\sum_{\beta\delta} \frac{\langle \Phi' | a_\beta^\dagger a_b | \Phi \rangle \langle \Phi' | a_\delta a_a^\dagger | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle \langle \Phi' | \Phi \rangle} W_{m\beta n\delta} \right). \quad (4.121)$$

Durch Ausnutzung der Projekteigenschaften der Φ' , Φ -Erwartungswerte auf Loch- und Teilchenraum der Biorthonormalbasis erhält man:

$$\frac{1}{2\hbar} \text{Tr}(\epsilon\delta DW) = \frac{i}{2\hbar} T \sum_{ph} W_{phhp} = \frac{i}{2\hbar} T \sum_{ph} \langle \varphi'_p \varphi'_h | v | \varphi_h \varphi_p \rangle, \quad (4.122)$$

wobei auch hier der separable Anteil von W verschwindet.

Unter Zusammenfassung von (4.122) mit dem Ergebnis (4.120) kann die RPA-Energiekorrektur angegeben werden¹¹:

$$\Delta E^{RPA} = \frac{\hbar}{2} \sum_{\omega_\nu \in H^+} \omega_\nu - \frac{1}{2} \sum_{ph} (\eta_p - \eta_h + \langle \varphi'_p \varphi'_h | v | \varphi_h \varphi_p \rangle) = \frac{\hbar}{2} \text{tr}\omega - \frac{1}{2} \text{tr}A. \quad (4.123)$$

Dabei steht A für die Blockmatrix oben links in den RPA-Gleichungen (4.104).

Der auf harmonischen Oszillationen um das Mean-Field beruhende Energieshift besitzt somit die typischen Strukturen der hermiteschen RPA; weiter unten wird das

¹¹tr wird hier nur als Summe über Teilchen-Loch-Konfigurationen aufgefaßt!

Ergebnis mit [8] verglichen.

Berücksichtigung aller gewonnen Korrekturterme (4.67) ergibt statt (4.73) für die Resolvente:

$$\langle \chi' | \frac{1}{E - \mathcal{H} + i\kappa} | \chi \rangle = \frac{\langle \Phi' | \chi \rangle \langle \chi' | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle (\bar{\eta}(E) - \Delta E^{RPA})} . \quad (4.124)$$

Im Unterschied zu [8] beschreibt (4.124) eine Korrektur der Greenschen-Funktion D als Funktion einer veränderten Energie $E' = E - \Delta E^{RPA}$ bei insgesamt *unveränderten* Mean-Field-Gleichungen für die Bestimmung von $\Phi; \Phi'$ bezüglich E . Hierbei wurde vorausgesetzt, daß $\bar{\eta} = \bar{\eta}(E) = E - \langle \mathcal{H} \rangle$ bei der Definition von h' (1.43) eingeführt wurde.

Die Pole der Greenschen-Funktion nach (4.124) liegen dann bei den Energien:

$$\begin{aligned} E^{Pol} &= \langle \mathcal{H} \rangle + \Delta E^{RPA} = \\ &= \sum_{i=1}^N \langle \varphi'_i | t | \varphi_i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \langle \varphi'_i \varphi'_j | v | \varphi_i \varphi_j \rangle + \Delta E^{RPA} = \\ &= E^{HF} + \Delta E^{RPA} . \end{aligned} \quad (4.125)$$

Das Vorgehen bei Anwendung der Theorie ist durch folgende Schritte gekennzeichnet:

- i) Der Lochraum wird durch die Vorgabe der diagonalisierten Überlappmatrizen m_i, m'_i, n_i in h' festgelegt. Die Lochorbitale φ_i, φ'_i , $i = 1, \dots, N$ können durch Diagonalisierung von h' mit der Selbstenergie $\eta_i = E - \langle \mathcal{H} \rangle + \epsilon_i$ selbstkonsistent berechnet werden.
- ii) Der Einteilchen-Hamiltonoperator h' wird nur durch die Lochorbitale bestimmt. Man ergänzt den Lochraum durch Teilchenorbitale φ_m, φ'_m , $m = N+1, \dots$ aus Eigenzuständen von h' , die aber i.a. nicht mehr die Beziehung $\eta_m - \epsilon_m = E - \langle \mathcal{H} \rangle$ erfüllen, zu einer vollständigen Biorthonormalbasis. Aufgrund der Annahme (4.9): $\langle \varphi'_m | \chi_i \rangle \approx 0$, $\langle \chi'_i | \varphi_m \rangle \approx 0$, müßte eigentlich konsistenterweise wegen des Verschwindens des separablen Terms aus h' für die Teilchenorbitale gelten, daß sie nahe den HF-Eigenzustände liegen:

$$(\eta_m - h) | \varphi_m \rangle \approx 0 \quad , \quad \langle \varphi'_m | (\eta_m - h) \approx 0 \quad (4.126)$$

und mit der Definition (1.21) also: $\eta_m \approx \epsilon_m$.

- iii) Mit den so bestimmten Loch- und Teilchenorbitalen kann die RPA-Gleichung (4.104) gelöst werden und somit können die Matrixelemente der Resolvente mittels (4.124) ausgerechnet werden.

Vergleich der IRPA-Gleichungen (1.53, 1.54) [8] mit den in (4.104-4.108) gefundenen Beziehungen zeigt, daß sämtliche vom separablen Anteil von \mathcal{H}' hervorgerufenen Terme hier nicht auftreten. Grund hierfür ist, daß die IRPA auf dem Vielteilchenoperator \mathcal{H}' aufbaut, während die in diesem Abschnitt durchgeführte Rechnung auf dem

Hamiltonoperator h' basiert, welcher a priori ein Einteilchenoperator ist. 2-Teilchen-2-Loch-Elemente des 'separablen Anteils' der RPA verschwinden also automatisch unabhängig von der mit Willkür belegten 'separablen' Matrix aufgrund der erforderlichen direkten Teilchenüberlappung der Biorthonormalbasis in f bzw. \tilde{f} .

Es lohnt sich aber herauszustellen, daß die Lemm-RPA-Matrix unter der Annahme (4.9) in die Matrix (4.104) übergeht. Somit ist die in (4.9) eingeführte Bedingung zumindest konsistent mit dem Endergebnis im Vergleich zu Lemm.

Bei [8] wird eine Energie-Korrektur ΔE zu fester Amplitude D erhalten. Aufgrund der durchzuführenden Inversion der $E = E(D)$ -Beziehung muß somit D solange verschoben werden (und damit auch die MF-Gleichungen wegen $h'(D)$), bis die RPA-korrigierte Energie $E_{RPA} = E + \Delta E^{RPA}$ erhalten wird. Der Übergang zu einer solchen inversen Beziehung für den in diesem Kapitel vorgestellten Zugang kann geschaffen werden, wenn in (4.30, 4.32) nicht $h' = h'(E)$, sondern $h' = h'(D)$ mit der exakten Amplitude D fixiert wird. Mit

$$h' = h + \frac{1}{D} \frac{\det \alpha \det \alpha'}{\det \beta} \sum_{i=1}^N \frac{n_i}{m_i m'_i} |\chi_i\rangle \langle \chi'_i| \quad , \quad (4.127)$$

also

$$\bar{\eta} = \bar{\eta}(D) = \frac{1}{D} \frac{\det \alpha \det \alpha'}{\det \beta} \quad , \quad (4.128)$$

werden die Mean-Field-Gleichungen jetzt in D parametrisiert ($\Phi'(D), \Phi(D)$). Statt der Gleichung (4.124) erhält man mit (4.38, 4.71) dann eine in D implizite Gleichung, in der die Energie E so gewählt werden muß, daß die Bedingung:

$$D = \frac{\det \alpha(D) \det \alpha'(D)}{\det \beta(D) [E + N\bar{\eta}(D) + \frac{1}{2} \sum_k \langle \varphi'_k | U | \varphi_k \rangle - \sum_i \eta_i(D) - \Delta E^{RPA}(D)]} \quad (4.129)$$

erfüllt ist. Wegen (4.127, 4.128) gilt $\eta_i(D) = \epsilon_i(D) + \bar{\eta}(D)$ und hiermit folgt, daß Teile des Nenners zusammengefaßt werden können:

$$N\bar{\eta}(D) - \sum_i \eta_i(D) + \frac{1}{2} \sum_k \langle \varphi'_k | U | \varphi_k \rangle = - \frac{\langle \Phi' | \mathcal{H} | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} \Big|_D \quad , \quad (4.130)$$

und damit ist die Lösung von (4.129) offensichtlich (ohne RPA-Anteil):

$$E = E_{TIMF} = \eta_i(D) - \epsilon_i(D) + \frac{\langle \Phi' | \mathcal{H} | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} \Big|_D = \bar{\eta}(D) + \frac{\langle \Phi' | \mathcal{H} | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} \Big|_D \quad (4.131)$$

bzw. unter Berücksichtigung von $\Delta E^{RPA}(D)$ in (4.129)

$$E = E_{RPA} = E_{TIMF} + \Delta E^{RPA} \quad , \quad (4.132)$$

was bis auf die unterschiedlichen RPA-Energien dem Ergebnis von Lemm entspricht.

Kapitel 5

2. Herleitung der TIMF aus Pfadintegraldarstellung: inhomogene Version

Nachdem im 4. Kapitel vorgestellt wurde, wie die TIMF-Theorie mittels Eigenwertbeziehungen und maximaler Ausnutzung der Flexibilität der Pfadintegraldarstellung hergeleitet werden kann, wird hier eine 'bodenständigere' Methode mit gleichem Ziel angegeben. An das Pfadintegral wird jetzt 'nur' die Forderung gestellt, daß es eine antisymmetrische Theorie generiert – also Hartree-Fock - statt Hartree-Potential erzeugt.

Die Strategie bei der Herleitung ist die Abbildung der Vielteilchenresolvente auf Einteilchenpropagatoren unter Einführung von Hilfsintegralen. Auf diesem Niveau werden über Einteilchen-Inversionsgleichungen die Variationszustände Φ, Φ' eingeführt und danach sämtliche Hilfs-, Zeit- und Pfadintegrale durch SPA genähert.

5.1 Abbildung der Vielteilchenresolvente auf ein Produkt von Einteilchenoperatoren

Wir beginnen wieder mit der Darstellung der Resolvente über die Gleichung (4.1). Für die Pfadintegraldefinition nehmen wir aus 'optischen' Gründen die Version (2.12) mittels Gauß-Trick. Hierbei ignorieren wir allerdings die in Abschnitt 2.2 erläuterten Probleme mit der Selbstwechselwirkung und dem Hartree-Potential mit der Begründung, daß die Potentialzerlegung (2.63) – falls anwendbar – Abhilfe schaffen wird. Falls nicht, bringt die Darstellung (2.83) mit der *optimalen* Wahl von $\Theta^T \Theta \hat{=} \nu^{HF}$ das gewünschte Ergebnis. Sie ist völlig problemlos auf die unten angegebene Rechnung übertragbar, bringt aber lästige Schreibearbeit mit sich.

Da wir sowieso nur an statischen Mean-Field-Potentialen interessiert sind, schränken wir die Summe über alle möglichen Pfade auf die statischen Wege $\sigma^\circ \neq \sigma^\circ(t)$ ein. Aus (2.12, 2.20) erhält man dann

$$\langle \chi' | \frac{1}{E - \mathcal{H} + i\kappa} | \chi \rangle \cong \quad (5.1)$$

$$-\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dT e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\kappa)T} \int \frac{D\sigma^\circ}{\bar{N}(T)} e^{\frac{i}{2\hbar}T \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sigma_{\alpha\gamma}^\circ v_{\alpha\beta\gamma\delta}^{-1} \sigma_{\beta\delta}^\circ} \langle \chi' | e^{-\frac{i}{\hbar}h\sigma^\circ T} | \chi \rangle$$

mit dem zeitunabhängigen Hamiltonoperator

$$h = h^{\sigma^\circ} = \sum_{\alpha\gamma} (K_{\alpha\gamma} + \sigma_{\alpha\gamma}^\circ) a_\alpha^\dagger a_\gamma \quad (5.2)$$

(σ° hat also Potentialdimension) und der erforderlichen neuen Normierung des Integrals

$$\bar{N}(T) = \int D\sigma^\circ e^{\frac{i}{2\hbar}T \sigma^\circ v^{-1} \sigma^\circ} = \sqrt{\frac{\prod_{\alpha\gamma} 2\pi i}{\det(\frac{T}{\hbar} v^{-1})}} \quad (5.3)$$

Wie gewohnt gehen wir wieder von χ, χ' als N -Teilchen-Slaterdeterminanten aus. Da h ein (symmetrischer) Einteilchenoperator in 2. Quantisierung ist, kann zwischen diesen Zuständen in die Orbitalanschreibweise h_i gewechselt werden; dabei deutet der Index i jetzt an, daß h nur auf das i -te Teilchen wirkt. Im N -Teilchenraum kann somit formuliert werden:

$$h \rightarrow \sum_{i=1}^N h_i \quad \text{mit} \quad h_i = \mathbf{1} \otimes \dots \otimes \underbrace{h}_{i\text{-te Stelle}} \otimes \dots \otimes \mathbf{1} \quad \text{und} \quad h = t + \sigma^\circ \quad (5.4)$$

also

$$e^{-\frac{i}{\hbar}hT} \rightarrow e^{-\frac{iT}{\hbar} \sum_i h_i} = \prod_{i=1}^N e^{-\frac{i}{\hbar}h_i T} \quad \text{wegen} \quad [h_i; h_j] = 0 \quad (5.5)$$

Unter Einführung der schon in (1.1) erwähnten Operatoridentität¹

$$\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\omega T}}{\omega - h + i\kappa} = e^{-\frac{i}{\hbar}(h-i\kappa)T} \theta(T) \quad (5.6)$$

für jeden der Faktoren von (5.5) und der Benutzung von $\theta(T)^N = \theta(T)$ erhält man für die Vielteilchenresolvente

$$\begin{aligned} \langle \chi' | \frac{1}{E - \mathcal{H} + i\kappa} | \chi \rangle = & \left(\frac{i}{2\pi}\right)^N \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \int_0^\infty dT \int \frac{D\sigma^\circ}{\bar{N}(T)} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_i d\omega_i\right) e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\kappa' + \frac{1}{2}\sigma^\circ v^{-1} \sigma^\circ - \sum_i \omega_i)T} \\ & \times \langle \chi' | \prod_{i=1}^N \frac{1}{\omega_i - h_i + i\kappa_i} | \chi \rangle \end{aligned} \quad (5.7)$$

¹Der Beweis hierfür gelingt mit dem Residuensatz: h wird dabei wegen der vorerst definitionsgemäß reellen Felder σ° als hermitisch angenommen und hat somit reelle Eigenwerte. Erst in der Selbstkonsistenzbedingung der Mean-Field-Näherung wird ein möglicherweise nichthermisches h erhalten und der ω -Integrationsweg ins Komplexe gezogen. Nach (5.6) liegen die 'Pole' unterhalb der reellen Achse, für $T < 0$ gilt $|e^{-\frac{i}{\hbar}\omega T}| \xrightarrow{\omega \rightarrow \infty} 0$. Wird der Integrationsweg in der oberen komplexen Halbebene geschlossen, so liegen keine Pole innerhalb des Weges; also gibt das Integral keinen Beitrag. Für $T > 0$ muß das Integral in der unteren Hemisphäre geschlossen werden ($|e^{-\frac{i}{\hbar}\omega T}| \xrightarrow{\omega \rightarrow -\infty} 0$). Jetzt wird der 'Operatorpol' im Uhrzeigersinn umlaufen; der Residuensatz liefert $-2\pi i$ mit dem Residuum $e^{-\frac{i}{\hbar}(h-i\kappa)T}$, was (5.6) beweist. Den klassischen Sinn bekommt die Gleichung (5.6), wenn mit Eigenzuständen von h gearbeitet wird, und so der Operator durch seine Eigenwerte als Zahlen ersetzt werden kann.

mit der zusammengefaßten infinitesimalen Größe

$$\kappa' = \kappa - \sum_{i=1}^N \kappa_i > 0 \quad , \quad (5.8)$$

welche o.B.d.A. immer noch positives Vorzeichen besitzen soll, um die Konvergenz der T -Integration von (5.7) zu gewährleisten.

Auf Kosten der N Energie-Integrale ist es gelungen, die N -Teilchenresolvente exakt mit Einteilchenresolventen zu identifizieren. (5.7) kann als Summe über alle Einteilchenpropagatoren mit allen möglichen Energien und Hamiltonoperator h (Gauß-Gewichtung für σ° und lineare Gewichtung für ω_i) angesehen werden. Erst in der MF-Näherung wird ein h^{σ° und ein $\tilde{\omega}_i$ ausgewählt, welche die HF-Pole der Vielteilchenresolvente approximativ festlegen.

Wenn man das Produkt der Einteilchenoperatoren aus (5.7) auf Slaterdeterminanten wirken läßt, erhält man eine neue Slaterdeterminante, nämlich:

$$\prod_{i=1}^N g_i | \chi_1, \dots, \chi_N \rangle = | g_1 \chi_1, \dots, g_N \chi_N \rangle \quad , \quad g_i \equiv \frac{1}{\omega_i - h_i} \quad , \quad (5.9)$$

weil der Antisymmetrisierer mit $\prod_i g_i$ vertauscht. Es liegt nun auf der Hand im Hinblick auf die TIMF-Gleichungen neue Zustände φ_i, φ'_i zu definieren, welche die Inversionsgleichungen $\varphi_i = g_i \chi_i$ bzw. $\varphi'_i = g_i \chi'_i$ erfüllen, also:

$$(\omega_i - h^{\sigma^\circ}) | \varphi_i(\sigma^\circ, \omega_i) \rangle = | \chi_i \rangle \quad \text{bzw.} \quad \langle \varphi'_i(\sigma^\circ, \omega_i) | (\omega_i - h^{\sigma^\circ}) = \langle \chi'_i | \quad , \quad (5.10)$$

$i = 1, \dots, N$. Dabei haben wir uns wieder daran erinnert, daß alle h_i von dem symmetrischen h aus (5.2) abstammen und der Index i jetzt auf dem Einteilchen-Niveau wieder überflüssig wird.

Im Gegensatz zur homogenen Version wird jedem Kanalorbital genau ein neues Orbital zugeordnet. Man beachte, daß die Energien ω_i keinen Potentialindex σ° tragen – im Gegensatz zu $\eta_i^{\sigma^\circ}$ aus der Eigenwertdefinition.

Wie gewohnt werden die Überlappmatrizen (1.23) wieder als diagonal angenommen; somit läßt sich mit obiger Definition die Gleichung (5.7) umschreiben:

$$D(E + i\kappa) = \left(\frac{i}{2\pi}\right)^N \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \int_0^\infty dT \int D\sigma^\circ \int_{-\infty}^\infty \left(\prod_i d\omega_i\right) \frac{1}{\mathcal{N}(T)} e^{\frac{i}{\hbar} S_{eff}[\sigma^\circ, \omega_i, T]} \quad (5.11)$$

mit der effektiven Wirkung

$$S_{eff}[\sigma^\circ, \omega_i, T] = \left(E + i\kappa' + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sigma_{\alpha\gamma}^\circ v_{\alpha\beta\gamma\delta}^{-1} \sigma_{\beta\delta}^\circ - \sum_i \omega_i\right) T - i\hbar \sum_i \ln \langle \chi'_i | \varphi_i \rangle \quad . \quad (5.12)$$

Im Gegensatz zu (4.12, 4.25) wird hier noch über die Energien ω_i integriert; wir werden also zusätzlich auf eine SPA bezüglich dieser Integrale angewiesen sein, in der Hoffnung, daß die stationären Werte auf die η_i führen.

Im Anhang A wird die TIMF hergeleitet, indem die Versuchsfunktionen über Integralentwicklungen angesetzt werden. Hierbei wird nach [11] die gleiche Einführung von Energie-Integralen benötigt, um faktorisierte Zustände benutzen zu können.

5.2 SPA zu Pfad- und Energie-Integralen

Als Naherungsstrategie fur das 'Dreifach'-Integral aus (5.11) wird nun vorerst eine *gleichzeitige* SPA von ω - und Pfadintegral und *danach* erst die Sattelpunktsnaherung fur das T -Integral angegangen. Anhand von (5.10) sind wir jetzt in der Lage, Ableitungen $\langle \chi' | \frac{\delta}{\delta\sigma} \Phi \rangle$ bzw. $\langle \frac{\delta}{\delta\sigma} \Phi' | \chi \rangle$ auszudrucken, was mit (4.24) nicht moglich war. Deshalb konnen wir jetzt bei der Variation von (5.12) auch den schwach oszillierenden Term $\hbar \ln \langle \chi' | \Phi \rangle$ mitnehmen. Dieses hat zur Folge, da nach der ersten SPA von T abhangige mittlere Potentiale zu erwarten sind, was die exakte T -Integration – wie bei der homogenen Version – verhindert. Entscheidend ist nun, da vor der SPA die beiden Variablen ω und σ als absolut unabhangig angesehen werden konnen ($\frac{\delta\omega_i}{\delta\sigma} = \frac{\partial\sigma^\circ}{\partial\omega_i} = 0$). Erst mit Durchfuhrung der Sattelpunktsnaherung werden komplexe $\tilde{\omega}_i, \tilde{\sigma}^\circ$ erhalten, die durch selbstkonsistente MF-Gleichungen miteinander gekoppelt werden. Die beiden Stationaritatsgleichungen lauten:

$$0 = \frac{\delta S_{eff}}{\delta\sigma_{mn}^\circ} = T \sum_{\alpha\gamma} \sigma_{\alpha\gamma}^\circ v_{\alpha m \gamma n}^{-1} - i\hbar \sum_{i=1}^N \frac{\langle \chi'_i | \frac{\delta}{\delta\sigma_{mn}^\circ} | \varphi_i \rangle}{\langle \chi'_i | \varphi_i \rangle} \quad (5.13)$$

und

$$0 = \frac{\partial S_{eff}}{\partial\omega_j} = -T - i\hbar \sum_{i=1}^N \frac{\langle \chi'_i | \frac{\partial}{\partial\omega_j} | \varphi_i \rangle}{\langle \chi'_i | \varphi_i \rangle} \quad , \quad (5.14)$$

wobei aufgrund des linearen Auftretens von ω im Exponenten von (5.11) eine direkte Auflosung nach $\tilde{\omega}$ nicht zu erwarten ist. Die Ableitungen von φ_i konnen direkt aus (5.10) entnommen werden:

i) Variationsableitung der ket-Gleichung bezuglich σ° ergibt

$$-\frac{\delta h}{\delta\sigma_{mn}^\circ} | \varphi_i \rangle + (\omega_i - h) \frac{\delta}{\delta\sigma_{mn}^\circ} | \varphi_i \rangle = 0 \quad , \quad (5.15)$$

und durch Multiplikation mit einem bra-Zustand aus (5.10) folgt mit (5.2):

$$\langle \chi'_i | \frac{\delta}{\delta\sigma_{mn}^\circ} | \varphi_i \rangle = \langle \varphi'_i | a_m^\dagger a_n | \varphi_i \rangle = \langle \varphi'_i | m \rangle \langle n | \varphi_i \rangle \quad . \quad (5.16)$$

ii) Die analoge Rechnung fur die ω_i -Ableitung fuhrt unter Berucksichtigung, da φ_i nur von ω_i bei gleichem Index i abhangt, auf:

$$\delta_{ij} \left(| \varphi_i \rangle + (\omega_i - h^{\sigma^\circ}) \frac{\partial}{\partial\omega_j} | \varphi_i \rangle \right) = 0 \quad (5.17)$$

und damit

$$\langle \chi'_i | \frac{\partial}{\partial\omega_j} | \varphi_i \rangle = - \langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle \delta_{ij} \quad . \quad (5.18)$$

Die mit i) und ii) aufgelosten Mean-Field-Gleichungen nehmen dann folgende Gestalt an:

$$\tilde{\sigma}_{st}^\circ = \frac{i\hbar}{T} \sum_{i,mn} \frac{\langle \varphi'_i | m \rangle \langle n | \varphi_i \rangle}{\langle \chi'_i | \varphi_i \rangle} v_{msnt} \quad \forall s, t \quad (5.19)$$

und

$$\frac{\hbar i}{T} = \frac{\langle \chi'_i | \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} \quad i = 1, \dots, N \quad , \quad (5.20)$$

wobei die Notation ' \sim ' für die Zustände φ'_i , φ_i aus Bequemlichkeit weggelassen wurde. Durch Einsetzen von (5.20) in (5.19) kann die Zeit T zumindest in einer der beiden MF-Gleichungen eliminiert werden, und man erhält (mit $v = v^{HF}$)

$$\tilde{\sigma}_{st}^\circ = \sum_{i,mn} \frac{\langle \varphi'_i | m \rangle \langle n | \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} v_{msnt} = \sum_{i=1}^N \frac{\langle \varphi'_i s | v | \varphi_i t \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} \quad , \quad (5.21)$$

wobei allerdings weiterhin $\varphi'_i = \varphi'_i(T)$ und $\varphi_i = \varphi_i(T)$.

Analog zur TIMF kann der Erwartungswert von h zwischen φ_i , φ'_i definiert werden:

$$\epsilon_i^{\sigma\omega} \equiv \frac{\langle \varphi'_i | h^\sigma | \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} \quad , \quad (5.22)$$

und damit läßt sich (5.20) mit (5.10) auch ohne Orbitale ausdrücken:

$$\frac{\hbar i}{T} = \tilde{\omega}_i - \tilde{\epsilon}_i \quad . \quad (5.23)$$

Ziel der weiteren Rechnung ist es, die Gleichungen (5.10) mit den Mean-Field-Bedingungen (5.21, 5.23) in die inhomogenen TIMF-Gleichungen (1.19) zu überführen und gleichzeitig die TIMF-Amplitude (1.25) als stationären Wert des Funktionals (5.11) zu erhalten.

Dabei muß insgesamt berücksichtigt werden, daß die Gleichungen (5.10) ohne die Faktoren λ_i , λ'_i eingeführt wurden, diese aber essentiell für die Darstellung von D_{TIMF} im *additiven* Funktional (1.9) sind, wo alle drei Summanden in Stationarität den gleichen Wert annehmen. Äußerst mühsam wird es in der folgenden Rechnung sein, die Integralnormierungsfaktoren $\frac{-i}{\hbar}$, $\left(\frac{i}{2\pi}\right)^N$ und $\tilde{\mathcal{N}}(T)$, die durch die künstliche Einführung von T -, ω - und σ -Integralen auftreten, wieder aus der Rechnung zu verbannen; offensichtlich sind wir auf quadratische Korrekturen angewiesen:

Entsprechend den Überlegungen um Gleichung (2.45) kürzt sich die Pfadintegralnorm $\tilde{\mathcal{N}}$ bei Gauß-Korrektur unter Vernachlässigung der letzten Summanden aus (5.12) wegen

$$\frac{\delta^2 S_{eff}}{\delta \sigma_{st}^\circ \delta \sigma_{mn}^\circ} = T v_{smtn}^{-1} \quad (5.24)$$

und (5.3) gerade weg.

Dadurch, daß die effektive Wirkung diagonal im Teilchenindex i ist, kann der Integrand faktorisiert werden:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_i d\omega_i \right) e^{-\frac{i}{\hbar} T \sum_i \omega_i + \sum_i \ln \langle \chi'_i | \varphi_i \rangle} = \prod_{i=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\omega_i e^{\frac{i}{\hbar} (-T\omega_i - i\hbar \ln \langle \chi'_i | \varphi_i \rangle)} \right] \quad (5.25)$$

$$\stackrel{SPA}{=} \prod_{i=1}^N e^{\frac{i}{\hbar} (-T\tilde{\omega}_i - i\hbar \ln \langle \chi'_i | \tilde{\varphi}_i \rangle)} \sqrt{\frac{2\pi i \hbar}{S''_{eff}(\omega_i)|_{\tilde{\omega}_i}}} \quad ,$$

wobei im letzten Schritt jedes Integral mittels (2.35) approximiert wurde. Bei der Gauß-Korrektur reicht es also die diagonale Hesse-Matrix $\frac{\partial^2 S}{\partial \omega_i^2}$ statt $\frac{\partial^2 S}{\partial \omega_i \partial \omega_j}$ zu betrachten. Für die 2. Ableitung erhält man mit (5.10, 5.14, 5.18):

$$\frac{\partial^2 S_{eff}}{\partial \omega_i^2} = \frac{\partial}{\partial \omega_i} \left(\frac{i\hbar}{\omega_i - \epsilon_i} \right) = -i\hbar \left(\frac{1}{\omega_i - \epsilon_i} \right)^2 \left(1 - \frac{\partial \epsilon_i}{\partial \omega_i} \right) \quad (5.26)$$

Wir machen hier die Annahme, daß die partielle Ableitung $\frac{\partial \epsilon_i}{\partial \omega_i}$ im Vergleich zu 1 vernachlässigt werden kann. Diese Vernachlässigung hat unter anderem den praktischen Grund, daß die Ableitung $\frac{\partial \epsilon_i}{\partial \omega_i}$ mit den gegebenen Zuständen φ_i , φ'_i nicht exakt ausgedrückt werden kann, da Terme mit $\langle \chi'_i | g_i^3 | \chi_i \rangle$ auftreten, die sich im Gegensatz zu $\langle \chi'_i | g_i | \chi_i \rangle = \langle \chi'_i | \varphi_i \rangle$ und $\langle \chi'_i | g_i^2 | \chi_i \rangle = \langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle$ nicht auf die Matrizen α , α' reduzieren lassen. Hier besteht die Möglichkeit durch Einführung von Zuständen ξ_i, ξ'_i mit $g_i | \varphi_i \rangle = | \xi_i \rangle$ bzw. $\langle \xi'_i | = \langle \varphi'_i | g_i$ die folgende Rechnung zu verbessern.

Mit dieser Approximation von (5.26) folgt an der Stationaritätstelle (5.23):

$$\left. \frac{\partial^2 S}{\partial \omega_i^2} \right|_{\tilde{\omega}_i} = \frac{iT^2}{\hbar} \quad , \quad (5.27)$$

und somit erhält man für die Gauß-Näherung von (5.25)

$$\sqrt{\prod_i \frac{2\pi i\hbar}{S''_{eff}(\omega_i)} \Big|_{\tilde{\omega}_i}} = \left(\frac{\sqrt{2\pi}}{i} \right)^N \left(\frac{i\hbar}{T} \right)^N \quad (5.28)$$

Für den stationären Funktionalwert nach ω - und σ -SPA und den errechneten Korrekturen bekommt man unter Benutzung von (5.21, 5.23):

$$D(E + i\kappa) = \left(\frac{-i}{\hbar} \right) \left(\frac{e}{\sqrt{2\pi}} \right)^N \int_0^\infty dT e^{\frac{i}{\hbar} (E + \frac{1}{2}\sigma^\circ v^{-1}\sigma^\circ - \sum_i \tilde{\epsilon}_i + i\kappa') T} \left(\frac{\hbar i}{T} \right)^N \langle \chi' | \tilde{\Phi} \rangle \quad (5.29)$$

Es fällt auf, daß mit $\frac{e}{\sqrt{2\pi}}$ die durch Einführung der Energie-Integrale auftretenden Faktoren $\frac{i}{2\pi}$ (Residuensatz!) nach der SPA nicht verschwunden sind. Beim Pfadintegral war dieses genau der Fall, weil die Norm durch den Gaußtrick in die Rechnung gebracht wurde; und die SPA (2.35) ist nichts anderes als die inverse Anwendung des Gaußtricks (2.12). Die ω -Integrale werden allerdings über den Residuensatz involviert, so daß die SPA der ω -Integrale es in *quadratischer* Ordnung nicht schafft, die Norm zu eliminieren, was für eine weitere Rechnung äußerst wünschenswert ist. Hierin liegt die Begründung, daß in (5.29)

$$\frac{e}{\sqrt{2\pi}} = 1.084 \dots \approx 1 \quad (5.30)$$

gesetzt wird; was dem mathematisch orientierten Leser wahrscheinlich die Haare sträubt, zumal sich der 'Fehler' mit der Teilchenzahl N potenziert. Trost bietet die Tatsache, daß bei Festhalten an den $\frac{e}{\sqrt{2\pi}}$ -Faktoren sich die unten berechnete

Resolventenamplitude nur um einen *reellen* Faktor von der TIMF-Amplitude unterscheidet. Somit vermischen sich Real- und Imaginärteildfunktionen nicht, und Informationen wie Pole (Bindungszustände) lassen sich weiter ablesen.

Da das T -Integral wegen der selbstkonsistenten Größen $\tilde{\sigma}^\circ$, $\tilde{\epsilon}_i$, $\tilde{\varphi}_i$ offensichtlich nicht mehr exakt ausführbar ist, ist das weitere Vorgehen durch SPA bezüglich der Zeitvariablen bestimmt.

5.3 SPA zu Zeitintegralen

Da für das Zeitintegral (5.29) die Grenzen 0 und $+\infty$ festliegen, macht es im Hinblick auf die SPA Sinn, es durch die Einführung der Stufenfunktion $\theta(T)$ in ein Integral $T \in]-\infty; \infty[$ umzuwandeln². Die Integraldarstellung der Stufenfunktion ist

$$\theta(T) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} ds \frac{e^{\frac{i}{\hbar}sT}}{s - i\kappa''} \quad , \quad (5.31)$$

was ähnlich (5.6) mittels Residuensatz bewiesen werden kann.

(5.29) wird mit (5.31) zu:

$$\begin{aligned} D(E + i\kappa) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dT ds \frac{e^{\frac{i}{\hbar}T(s+E+\frac{1}{2}\tilde{\sigma}^\circ v^{-1}\tilde{\sigma}^\circ - \sum_i \tilde{\epsilon}_i + i\kappa')}}{-s + i\kappa''} \left(\frac{i\hbar}{T}\right)^N \prod_i \langle \chi'_i | \tilde{\varphi}_i \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dT \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{\frac{i}{\hbar}S_{eff}[s,T]} \end{aligned} \quad (5.32)$$

mit

$$\begin{aligned} S_{eff}[s, T] &= T \left(s + E + \frac{1}{2}\tilde{\sigma}^\circ(T)v^{-1}\tilde{\sigma}^\circ(T) - \sum_i \tilde{\epsilon}_i(T) + i\kappa' \right) \\ &\quad - i\hbar \sum_i \ln \langle \chi'_i | \tilde{\varphi}_i(T) \rangle - i\hbar N \ln \frac{i\hbar}{T} + i\hbar \ln(-s + i\kappa'') . \end{aligned} \quad (5.33)$$

Wir führen jetzt eine *gleichzeitige* Sattelpunktsnäherung für die beiden Integrale durch, wobei auf die Zeitabhängigkeit der Variablen $\tilde{\sigma}$, $\tilde{\epsilon}_i$, $\tilde{\varphi}_i$ in (5.33) geachtet wird.

i) Die einfache Stationaritätsgleichung des s -Integrals lautet:

$$0 = \frac{\partial S_{eff}}{\partial s} = T + i\hbar \frac{1}{s - i\kappa''} \quad (5.34)$$

und damit

$$-\tilde{s} = i \left(\frac{\hbar}{\tilde{T}} - \kappa'' \right) \quad (5.35)$$

²Eigentlich ist eine direkte SPA des T -Integrals möglich, liefert aber ein anderes Ergebnis. Hierin zeigt sich erneut, daß die Mean-Field-Approximation angewandt für verschiedene *exakte* Darstellungen zu unterschiedlichen Resultaten führen kann.

ii) Die T -Stationaritätsbedingung liefert unter Mitnahme aller Terme:

$$0 = \frac{\partial S_{eff}}{\partial T} = s + E + \frac{1}{2} \tilde{\sigma}^\circ v^{-1} \tilde{\sigma}^\circ + T \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{1}{2} \tilde{\sigma}^\circ v^{-1} \tilde{\sigma}^\circ \right) - \sum_i \tilde{\epsilon}_i - T \sum_i \frac{\partial \tilde{\epsilon}_i}{\partial T} - i\hbar \sum_i \frac{\langle \chi'_i | \frac{\partial}{\partial T} | \tilde{\varphi}_i \rangle}{\langle \chi'_i | \tilde{\varphi}_i \rangle} + i\hbar \frac{N}{T}, \quad (5.36)$$

Die Zeitableitungen der selbstkonsistenten Größen können mittels der Gleichung (5.10) unter Mean-Field-Bedingungen (5.21, 5.23) errechnet werden. Analog zur Rechnung aus Abschnitt 5.2 bringt die Zeitableitung von

$$\left(\frac{i\hbar}{T} + \tilde{\epsilon}_i - h^{\tilde{\sigma}^\circ} \right) | \tilde{\varphi}_i \rangle = | \chi_i \rangle \quad (5.37)$$

mit $h = t + \sigma^\circ$:

$$\left(-\frac{i\hbar}{T^2} + \frac{\partial \tilde{\epsilon}_i}{\partial T} - \frac{\partial \tilde{\sigma}^\circ}{\partial T} \right) | \tilde{\varphi}_i \rangle + \left(\frac{i\hbar}{T} + \tilde{\epsilon}_i - h^{\tilde{\sigma}^\circ} \right) \frac{\partial}{\partial T} | \tilde{\varphi}_i \rangle = 0 \quad (5.38)$$

Multiplikation mit $\langle \tilde{\varphi}'_i |$ liefert die Beziehung:

$$\langle \chi'_i | \frac{\partial}{\partial T} | \tilde{\varphi}_i \rangle = \left(\frac{i\hbar}{T^2} - \frac{\partial \tilde{\epsilon}_i}{\partial T} \right) \langle \tilde{\varphi}'_i | \tilde{\varphi}_i \rangle + \langle \tilde{\varphi}'_i | \frac{\partial \tilde{\sigma}^\circ}{\partial T} | \tilde{\varphi}_i \rangle \quad (5.39)$$

Der 4. Summand von (5.36) kann ebenfalls mit Ausnutzung von (5.21) und der Symmetrie $v_{\alpha m \gamma n} = v_{m \alpha n \gamma}$ vereinfacht werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{1}{2} \sum_{\alpha \beta \gamma \delta} \tilde{\sigma}_{\alpha \gamma}^\circ v_{\alpha \beta \gamma \delta}^{-1} \tilde{\sigma}_{\beta \delta}^\circ \right] &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha \beta \gamma \delta} \left(\tilde{\sigma}_{\alpha \gamma}^\circ v_{\alpha \beta \gamma \delta}^{-1} \frac{\partial \tilde{\sigma}_{\beta \delta}^\circ}{\partial T} + \frac{\partial \tilde{\sigma}_{\alpha \gamma}^\circ}{\partial T} v_{\alpha \beta \gamma \delta}^{-1} \tilde{\sigma}_{\beta \delta}^\circ \right) \\ &= \sum_{i, mn} \frac{\langle \tilde{\varphi}'_i | m \rangle \langle n | \tilde{\varphi}_i \rangle \partial \tilde{\sigma}_{mn}^\circ}{\langle \tilde{\varphi}'_i | \tilde{\varphi}_i \rangle \partial T} \\ &= \sum_{i=1}^N \frac{\langle \tilde{\varphi}'_i | \frac{\partial \tilde{\sigma}^\circ}{\partial T} | \tilde{\varphi}_i \rangle}{\langle \tilde{\varphi}'_i | \tilde{\varphi}_i \rangle}, \end{aligned} \quad (5.40)$$

so daß die Gleichung (5.36) weiter bearbeitet werden kann:

$$\begin{aligned} 0 &= s + E + \frac{1}{2} \tilde{\sigma}^\circ v^{-1} \tilde{\sigma}^\circ + T \sum_i \frac{\langle \varphi_i | \frac{\partial \tilde{\sigma}^\circ}{\partial T} | \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} - \sum_i \tilde{\epsilon}_i - T \sum_i \frac{\partial \tilde{\epsilon}_i}{\partial T} \\ &\quad + \frac{\hbar^2}{T^2} \sum_i \frac{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle}{\langle \chi'_i | \varphi_i \rangle} + i\hbar \sum_i \frac{\partial \tilde{\epsilon}_i}{\partial T} \frac{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle}{\langle \chi'_i | \varphi_i \rangle} \\ &\quad - i\hbar \sum_i \frac{\langle \varphi'_i | \frac{\partial \tilde{\sigma}^\circ}{\partial T} | \varphi_i \rangle}{\langle \chi'_i | \varphi_i \rangle} + \hbar N \frac{i}{T} \end{aligned} \quad (5.41)$$

Unter Ausnutzung der Gleichung (5.20) fallen alle durch die Ableitungen $\frac{\partial \tilde{\epsilon}_i}{\partial T}$, $\frac{\partial | \varphi_i \rangle}{\partial T}$, $\frac{\partial \tilde{\sigma}^\circ}{\partial T}$ hervorgerufenen Terme heraus:

$$-\tilde{s} = E + \frac{1}{2} \tilde{\sigma}^\circ v^{-1} \tilde{\sigma}^\circ - \sum_i \tilde{\epsilon}_i \quad (5.42)$$

Dieses ist genau das Ergebnis, welches man unter der Vernachlässigung der Ableitungen von $\tilde{\epsilon}_i$, φ_i , $\tilde{\sigma}^\circ$ und des schwach oszillierenden Terms $\ln \frac{\hbar^i}{T}$ aus (5.33) direkt erhalten hätte. Die vier Mean-Field-Gleichungen (5.23, 5.21, 5.35, 5.42) der ω -, σ° -, s - und T -SPA für die Festlegung von (5.10) können nun gleichzeitig selbstkonsistent gelöst werden. Mit Hilfe von (5.21) gilt:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \tilde{\sigma}_{\alpha\gamma}^\circ v_{\alpha\beta\gamma\delta}^{-1} \tilde{\sigma}_{\beta\delta}^\circ &= \frac{1}{2} \sum_{i,k=1}^N \frac{\langle \varphi'_i \varphi'_k | v | \varphi_i \varphi_k \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle \langle \varphi'_k | \varphi_k \rangle} \\ &= \sum_{i=1}^N \frac{\langle \varphi'_i | \frac{\tilde{\sigma}^\circ}{2} | \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} \end{aligned} \quad (5.43)$$

und

$$\sum_{i=1}^N \tilde{\epsilon}_i = \sum_i \frac{\langle \varphi'_i | t | \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} + \sum_i \frac{\langle \varphi'_i | \tilde{\sigma}^\circ | \varphi_i \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle}, \quad (5.44)$$

wobei in (5.43) die oben diskutierte Antisymmetrie von v benötigt wird. Durch Einsetzen von (5.20) und (5.35) in (5.42) kann das Stationaritätsproblem kompakt geschrieben werden:

$$\tilde{\omega}_i = E - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \frac{\langle \varphi'_k | t + \frac{\tilde{\sigma}^\circ}{2} | \varphi_k \rangle}{\langle \varphi'_k | \varphi_k \rangle} + \tilde{\epsilon}_i \quad (5.45)$$

mit

$$\tilde{\sigma}^\circ = \sum_{k=1}^N \frac{\langle \cdot \varphi'_k | v | \cdot \varphi_k \rangle}{\langle \varphi'_k | \varphi_k \rangle}. \quad (5.46)$$

Identifiziert man $\tilde{\omega}_i$ mit η_i^{TIMF} (1.21), $\tilde{\sigma}^\circ$ mit U^{TIMF} (1.20) und $-\tilde{s}$ mit $\bar{\eta}^{TIMF}$ (1.28), so stellen (5.10) genau die TIMF-Gleichungen ohne die norm- und phasenerzeugenden Faktoren λ_i, λ'_i dar.

Es muß noch eine Begründung dafür geliefert werden, daß der Vorfaktor $\frac{1}{2\pi\hbar}$ aus (5.32) nach der SPA nicht mehr auftritt. Nach Gleichung (5.42) ist gezeigt, daß bei Vernachlässigung der Terme proportional zu \hbar und $\frac{\partial \tilde{\epsilon}_i}{\partial T}$; $\frac{\partial \tilde{\sigma}^\circ}{\partial T}$ nur unter Mitnahme des stark oszillierenden Terms *linear* in T der Sattelpunkt $0 = s + E + \frac{1}{2} \tilde{\sigma}^\circ v^{-1} \tilde{\sigma}^\circ - \sum \tilde{\epsilon}_i$ festgelegt wird. Da dann die 2. Ableitung verschwindet, wird die Gauß-Näherung nicht anwendbar. Dieses entspricht einem Übergang in die δ -Distribution.

Für die Näherung der T -Integration bedeutet das mathematisch³:

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dT e^{\frac{i}{\hbar} T (s + E + \frac{1}{2} \tilde{\sigma}^\circ v^{-1} \tilde{\sigma}^\circ - \sum_i \tilde{\epsilon}_i + i\kappa')} = \delta \left(s + E + \frac{1}{2} \tilde{\sigma}^\circ v^{-1} \tilde{\sigma}^\circ - \sum_i \tilde{\epsilon}_i + i\kappa' \right). \quad (5.47)$$

Bei gleichzeitiger Durchführung der s -Integralnäherung unter Annahme von (5.47) wird der 'übrigbleibende' Term $\frac{i\hbar}{T}$ aus (5.32) auf den Sattelpunkt der eigentlichen s -SPA (5.35) gesetzt. Also:

$$\begin{aligned} \int ds \frac{\delta(s + E + \frac{1}{2} \tilde{\sigma}^\circ v^{-1} \tilde{\sigma}^\circ - \sum \tilde{\epsilon}_i + i\kappa')}{-s} (-s)^N \prod_i \langle \chi'_i | \tilde{\varphi}_i \rangle \\ = (-\tilde{s})^{N-1} \prod_i \langle \chi'_i | \tilde{\varphi}_i \rangle. \end{aligned} \quad (5.48)$$

³Die weitere Benutzung der infinitesimalen Größe κ' wird nach Anwendung der SPA wegen $\lim_{\kappa \rightarrow 0^+} e^{i(i\kappa')} = 1$ überflüssig.

Dabei macht es Sinn, die quadratische Korrektur der T - und s -SPA 'stiefmütterlich' zu behandeln, da durch die vorangegangene ω - und σ° -SPA schon Terme vernachlässigt wurden. Im Rahmen der gesamten Näherungsstrategie ist es wichtiger, bei 'frühen' Approximationen genauer zu rechnen, damit sich die Fehler in weiteren Rechenschritten nicht potenzieren, als umgekehrt mit 'schlechten' Zwischenergebnissen hinterher zu versuchen, genauer zu rechnen.

Als Endergebnis der Sattelpunktnäherungen erhält man den stationären Wert

$$\langle \chi' | \frac{1}{E - \mathcal{H} + i\kappa} | \chi \rangle = \bar{\eta}^{N-1} \langle \chi' | \tilde{\Phi} \rangle \quad , \quad (5.49)$$

wobei die Orbitale $\tilde{\varphi}_i, \tilde{\varphi}'_i$ die TIMF-Gleichungen ohne λ_i, λ'_i erfüllen.

Daß Gleichung (5.49) trotzdem die gewöhnliche TIMF-Amplitude ist, kann bewiesen werden, indem D_{TIMF} (1.25) auf Orbitale ohne λ_i, λ'_i umgeschrieben wird. Offensichtlich stimmen $\eta_i, \bar{\eta}$ und $\tilde{\sigma}^\circ$ (bzw. U) in beiden Formulierungen wegen der Invarianz unter Umnormierung der Orbitale überein. (λ_i, λ'_i sind nach (1.22) nicht von einer Umnormierung unabhängig, da sie die Normierung ja gerade erzeugen!). Deshalb gilt der Zusammenhang

$$| \tilde{\varphi}_i \rangle = \left| \frac{\varphi_i(TIMF)}{\lambda_i(TIMF)} \right\rangle \quad \text{bzw.} \quad \langle \tilde{\varphi}'_i | = \left\langle \frac{\varphi'_i(TIMF)}{\lambda'_i(TIMF)} \right| \quad , \quad (5.50)$$

und aus (5.50) folgt unmittelbar für die Amplitude:

$$D_{TIMF} = \prod_i \langle \chi'_i | \varphi_i(TIMF) \rangle = \left(\prod_i \lambda_i^{TIMF} \right) \left(\prod_i \langle \chi'_i | \tilde{\varphi}_i \rangle \right) \quad . \quad (5.51)$$

Berechnung des 1. Faktors gibt mit (1.19, 1.22, 1.28) und diagonaler Überlappmatrix $\langle \chi'_i | \varphi_j(TIMF) \rangle = \alpha'_{ij}$:

$$\begin{aligned} \prod_i \lambda_i^{TIMF} &= \prod_i \prod_{k \neq i} \frac{\langle \varphi'_k(TIMF) | \chi_k \rangle}{\langle \varphi'_k(TIMF) | \varphi_k(TIMF) \rangle} \\ &= \prod_i \left(\frac{\langle \varphi'_i(TIMF) | \chi_i \rangle}{\langle \varphi'_i(TIMF) | \varphi_i(TIMF) \rangle} \right)^{N-1} \\ &= \bar{\eta}^{N(N-1)} \left(\prod_i \frac{1}{\lambda_i^{TIMF}} \right)^{N-1} \quad . \end{aligned} \quad (5.52)$$

Die Gleichung (5.52) kann nach $\prod_i \lambda_i$ aufgelöst werden – mit dem Ergebnis:

$$\prod_{i=1}^N \lambda_i^{TIMF} = \bar{\eta}^{N-1} \quad , \quad (5.53)$$

womit für (5.49) genau das gewünschte Ergebnis

$$\langle \chi' | \frac{1}{E - \mathcal{H} + i\kappa} | \chi \rangle = D_{TIMF} \quad (5.54)$$

bewiesen ist.

Schlußbemerkung

In dieser Arbeit wurde ein Bogen von der exakten zeitabhängigen Formulierung der Greenschen Funktion zur approximativen zeitunabhängigen Darstellung der TIMF gespannt und dabei aufgezeigt, wie die TIMF in der TDMF eingebettet ist.

Während in der TIMF für jeweils *eine* fest vorgegebene Energie E nach Mean-Field-Lösungen gesucht wird, hat man es bei der TDMF mit einem in der Zeit bilokalen Mean-Field zu tun, d.h. sämtliche Zeiten t zwischen zwei vorgegebenen Zeiten t_i, t_f tragen gleichzeitig zur Mean-Field-Lösung bei. Die Mean-Field-Gleichungen sind also selbstkonsistent als zeitliches Randwertproblem zu lösen, was eine weitere analytische sowie numerischer Bearbeitung weitgehend unterbindet. Es ist somit nicht verwunderlich, daß bei 'krasser' Unterdrückung dieser Zeitabhängigkeit durch Forderung von statischen Feldern die TIMF-Theorie erhalten wurde. Gleichzeitig wurde ein Weg angedeutet, wie Korrekturen zur einfachen Mean-Field-Lösung berechnet werden können.

Der Schlüssel für die Verbindung TDMF-TIMF lag in der Anwendung von Pfadintegralen, welche unter statischer Stationärer Phasen-Approximation die Interpretationsmöglichkeit eröffneten, die TIMF als semiklassische Näherung anzusehen, bei der zeitliche Fluktuationen um das Mean-Field die RPA-Korrekturen erzeugen.

Die in den Kapiteln 4 und 5 vorgestellten Wege können als 'Vorschlag' angesehen werden, wie die TIMF alternativ konstruiert und gesehen werden kann. In beiden Ableitungen mußten einige Hindernisse überwunden werden: So wurde immer auf die Art und Weise genähert, daß die künstlich eingeführten Definitionsgleichungen für die Einteilchenwellenfunktionen φ_i, φ'_i gerade ausreichten, um alle benötigten Größen zu berechnen. Dieses 'zielgerichtete' Arbeiten wirkt zugegebenermaßen etwas abrupt und unmotiviert, erst im Endergebnis haben sich die gemachten Annahmen als berechtigt erwiesen.

Der zweifellos elegantere Weg zur TIMF ist der über den homogenen Ansatz aus Kapitel 4. Unter 'legaler' Ausnutzung der Flexibilität in der Pfadintegraldarstellung werden die Mean-Field-Gleichungen an den TIMF-Gleichungen fixiert und dann die TIMF-Amplitude als stationärer Integralwert erhalten. Die Hauptnäherung liegt dabei in der Vernachlässigung der Überlappe der Teilchenorbitale φ_n, φ'_n mit den Kanalorbitalen χ_i, χ'_i .

Der Weg über die inhomogene Version ist holprig und durch Probleme bei der Eliminierung von Normkonstanten der Integrale nach der SPA gekennzeichnet. Man erhält aber auf 'natürliche' Weise gleichzeitig in laufender Rechnung TIMF-Gleichung und -Amplitude. Den zur homogenen Fassung inversen Weg nimmt die im Anhang vorgeführte Rechnung: Hier wird die TIMF-Amplitude im wesentlichen vorgegeben und

die TIMF-Gleichungen erhalten.

Die in dieser Arbeit angewandten Pfadintegralmethoden lassen sich möglicherweise auch für die Ableitung der TIMF für die T-Matrix [8] verwenden. Die zeitunabhängige Beschreibung der Reaktion $a + A \rightarrow b + B$ hat ihr zeitabhängiges Analogon in der Formulierung durch Møller-Operatoren bzw. der S-Matrix. Alhassid, Koonin [21] und Rheinhardt [5] haben den Pfadintegralzugang hierfür formuliert, indem für die S-Matrix im Wechselwirkungsbild für die auftretenden Kanal- und Gesamt-Zeitentwicklungsoperatoren U_f, U_i und U Funktionalintegrale eingeführt werden:

$$\begin{aligned} \langle \chi' | S | \chi \rangle &= \lim_{T \rightarrow \infty} \langle \chi' | U_f(0, T) U(T, -T) U_i(-T, 0) | \chi \rangle \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \int D\sigma_f D\sigma D\sigma_i e^{\frac{i}{2\hbar} \left\{ \int_T^0 dt \sigma_f v_f \sigma_f + \int_{-T}^T dt \sigma v \sigma + \int_0^{-T} dt \sigma_i v_i \sigma_i \right\}} \\ &\quad \times \langle \chi' | U_{\sigma_f}(0; T) U_{\sigma}(T, -T) U_{\sigma_i}(-T, 0) | \chi \rangle \end{aligned}$$

mit den Einteilchenoperatoren U_{σ} und innerhalb der Fragmente antisymmetrisierten Zuständen χ, χ' .

Man könnte nun analog zu Kapitel 4 z.B. Hilfszustände Φ, Φ' als Eigenfunktionen von U_{σ} im Limes $T \rightarrow \infty$ zwischen den Operatoren einführen und danach für alle drei Pfadintegrale eine gleichzeitige statische SPA mit allen möglichen Vorzügen der Nichteindeutigkeit anstreben, wobei hierdurch die Matrixelemente $\langle \chi' | U_{\sigma_f} | \Phi \rangle$, $\langle \Phi' | U_{\sigma_i} | \chi \rangle$ und $\langle \Phi' | U_{\sigma} | \Phi \rangle$ die Kanal-Mean-Field-Potentiale bzw. das Wechselwirkungs-Mean-Field erzeugen sollen. Im Vergleich zu Kapitel 4 und 5 wird jetzt die T -Integration durch die Grenzwertbildung $T \rightarrow \infty$ ersetzt. Durch die statische Voraussetzung fallen grundlegende Probleme bei der Konvergenz zeitabhängiger Felder, welche über die nichtlineare, selbstkonsistente Definition entstehen, unter den Tisch, da die zu erwartende T -Abhängigkeit auf reine Phasen führen wird. Die Grenzwertbildung $T \rightarrow \infty$ schafft den Übergang zur zeitunabhängigen Theorie, und die Benutzung der elementaren Beziehung von S- und T-Matrix bringt die mögliche Verbindung zur TIMF. Die dabei zu erwartenden Probleme liegen darin, daß keine homogene Formulierung der T-Matrix im Rahmen der TIMF vorliegt, so daß Eigenwertdefinitionen schwer übertragbar sein werden. Außerdem sind die Kanal-Wechselwirkungen v_f, v_i unsymmetrisch in den Teilchen und damit die Zustände χ, χ' nur noch teilweise antisymmetrisch, was auf weitere Schwierigkeiten führt.

Anhang A

Spektraler Zugang zur TIMF

In [11] wird ein anderer Zugang zur TIMF dargelegt. Dabei werden die Variationsfunktionale (1.9, 1.10) auf eine Integralform gebracht, indem für die Versuchsfunktionen – statt einfacher Slaterdeterminanten – Integralentwicklungen von Slaterdeterminanten mit Orbitalen, die Einteilchen-Inversionsgleichungen erfüllen, angenommen werden. Es wird gezeigt, daß die Sattelpunkte des Integranden wieder zurück zur TIMF führen.

Dieses wird in [11] explizit für einen auf Einteilchenanteile eingeschränkten Hamiltonoperator \mathcal{H} mittels einer Integralentwicklung in endlicher Dimension vorgeführt und für die Verallgemeinerung auf den Hamiltonoperator (1.7) eine Einführung von Integralen mit unendlicher Zahl von Parametern als Darstellung der Versuchsfunktionen vorgeschlagen. Dieses Konzept wird hier unter Gebrauch von Pfadintegralen durchgeführt.

In Kapitel 5 wird mit Gleichung (5.7) erfolgreich die Vielteilchenresolvente als Produkt von Einteilchen-Propagatoren ausgedrückt. Die dort definierten Zustände (5.10) werden unter dem Integral durch die eingeführten Hilfsvariablen gekoppelt. Unter der Annahme, daß das Feld σ° nicht von der Zeit T abhängt ($\sigma^\circ \neq \sigma^\circ(T)$) kann die Zeit in (5.7) formal ausintegriert werden, also

$$\frac{1}{E - \mathcal{H} + i\kappa} = \int D\sigma^\circ \int \left(\prod_i d\omega_i \right) f_{\sigma^\circ}(\omega_i) \prod_{i=1}^N g_i \quad (\text{A.1})$$

mit den Einteilchresolventen

$$g_i = \frac{1}{\omega_i - h + i\kappa_i} \quad (\text{A.2})$$

und dem Kopplungsfaktor

$$f_{\sigma^\circ}(\omega_i) = \left(\frac{i}{2\pi} \right)^N \left(\frac{-i}{\hbar} \right) \int_0^\infty \frac{dT}{\tilde{\mathcal{N}}(T)} e^{\frac{i}{\hbar} (E + \frac{1}{2}\sigma^\circ v^{-1}\sigma^\circ - \sum_i \omega_i + i\kappa')T} \quad , \quad (\text{A.3})$$

wobei Probleme mit der Wohldefiniertheit und Konvergenz des Integrals (A.3) ($\tilde{\mathcal{N}}(T)$ in (5.3)!) mit der Begründung ignoriert werden, daß die Norm nach Durchführung der SPA ihren eigentlichen Sinn verliert – sie wird bei erfolgreich angewandter SPA gerade weggekürzt.

Die Gleichung (A.1) ist bereits als Approximation anzusehen, da die Summation auf Felder σ° eingeschränkt wird, die von den beiden Zeitparametern $t \in [0; T]$ (zeitliches Verhalten des Feldes) und $T \in [0; \infty]$ (obere zeitliche Grenze des Entwicklungsoperators) nicht abhängen; dieses ist natürlich im Hinblick auf die TIMF-Ergebnisse gerechtfertigt. Aufgrund von (A.1) bietet es sich an, für die Versuchsfunktionen der Variationsfunktionale folgende Integralentwicklungen anzusetzen:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \int D\sigma^\circ \int d\omega f_{\sigma^\circ}(\omega) |\Phi(\sigma^\circ, \omega)\rangle \\ \langle\Psi'| &= \int D\sigma'^\circ \int d\omega' f_{\sigma'^\circ}(\omega') \langle\Phi'(\sigma'^\circ, \omega')| \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Dabei sind $\Phi(\sigma^\circ, \omega)$ und $\Phi'(\sigma'^\circ, \omega')$ Slaterdeterminanten, deren Orbitale die Einteilchengleichungen

$$(\omega_i - h^{\sigma^\circ}) |\varphi_i(\sigma^\circ, \omega_i)\rangle = |\chi_i\rangle, \quad \langle\varphi'_i(\sigma'^\circ, \omega'_i)| (\omega'_i - h^{\sigma'^\circ}) = \langle\chi'_i| \quad (\text{A.5})$$

erfüllen sollen; es werden also im Gegensatz zu (5.10) verschiedene Felder und Energien für die bra- und ket-Gleichungen zugelassen.

Die Einschränkung des Projektionsraums entspricht also einer GCM-Projektion auf Slaterdeterminanten, die – zusätzlich zur Pauli-Korrelation – Orbitale besitzen, die Inversionsbedingungen von der Struktur der TIMF-Gleichungen erfüllen und gleichzeitig durch f gekoppelt werden. Stationaritätsforderungen an Funktionale mit (A.4) als Darstellung der Variationszustände entsprechen dann einer Variation *nach* Projektion.

Es gibt nun neben (1.9, 1.10) mehrere Funktionale, die für eine erfolgreiche Rechnung angesetzt werden können. Da beim additiven und multiplikativen Funktional Probleme mit der gleichzeitigen Integraldarstellung aller Terme des Funktionals auftreten, empfiehlt es sich nach [11] folgendes Funktional zu betrachten:

$$F = \langle\Psi'| \chi\rangle \langle\chi'| \Psi\rangle - D \langle\Psi'| E - \mathcal{H} | \Psi\rangle \quad (\text{A.6})$$

Der stationäre Wert des Funktionals bei uneingeschränkter Variation ist wegen der Stationaritätsgleichungen

$$D \langle\Psi'| (E - \mathcal{H}) = \langle\Psi'| \chi\rangle \langle\chi'|, \quad D(E - \mathcal{H}) | \Psi\rangle = \langle\chi'| \Psi\rangle | \chi\rangle \quad (\text{A.7})$$

unabhängig von D identisch Null. Die genäherte Amplitude D_{TIMF} wird nachher so definiert, daß gefordert wird, daß auch bei Stationaritätsbedingungen mit dem eingeschränkten Versuchsraum (A.4) der Wert des Funktionals verschwindet. Nach Einsetzen der GCM-Ansätze erhält das Funktional die Gestalt:

$$\begin{aligned} F &= \int D\sigma^\circ \int D\sigma'^\circ \int d\omega \int d\omega' f_{\sigma^\circ}(\omega) f_{\sigma'^\circ}(\omega') \\ &\times \left[\langle\Phi'(\sigma'^\circ, \omega')| \chi\rangle \langle\chi'| \Phi(\sigma^\circ, \omega)\rangle - D \langle\Phi'(\sigma'^\circ, \omega')| E - \mathcal{H} | \Phi(\sigma^\circ, \omega)\rangle \right] \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Bei Zulassen von komplexen Sattelpunkten des Integranden durch Verlassen der reellen Integrationswege können die Sattelpunktgleichungen unter Ausnutzung von

$\omega_i = \omega_i(\varphi_i)$, $\omega'_i = \omega'_i(\varphi'_i)$ und $\sigma^\circ = \sigma^\circ(\varphi_1; \dots; \varphi_N)$, bzw. $\sigma'^\circ = \sigma'^\circ(\varphi'_1 \dots \varphi'_N)$ angegeben werden (mit $\Phi = \Phi(\sigma, \omega)$ und $\Phi' = \Phi'(\sigma', \omega')$):

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial F}{\partial \omega_i} & (A.9) \\ &= \left[\langle \chi' | \Phi \rangle \langle \Phi' | \chi \rangle - D \langle \Phi' | E - \mathcal{H} | \Phi \rangle \right] f(\omega', \sigma') \frac{\partial f(\omega, \sigma)}{\partial \omega_i} \\ &\quad + f f' \left[\frac{\delta \{ \langle \chi' | \Phi \rangle \langle \Phi' | \chi \rangle - D \langle \Phi' | E - \mathcal{H} | \Phi \rangle \}}{\delta | \varphi_i \rangle} \right] \frac{\partial | \varphi_i \rangle}{\partial \omega_i} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\delta F}{\delta \sigma} & (A.10) \\ &= \left[\langle \chi' | \Phi \rangle \langle \Phi' | \chi \rangle - D \langle \Phi' | E - \mathcal{H} | \Phi \rangle \right] \frac{\delta f}{\delta \sigma} f' \\ &\quad + f f' \sum_{i=1}^N \left[\frac{\delta \{ \langle \chi' | \Phi \rangle \langle \Phi' | \chi \rangle - D \langle \Phi' | E - \mathcal{H} | \Phi \rangle \}}{\delta | \varphi_i \rangle} \frac{\delta | \varphi_i \rangle}{\delta \sigma} \right] \end{aligned}$$

$$0 = \frac{\partial F}{\partial \omega'_i} \quad \text{und} \quad 0 = \frac{\delta F}{\delta \sigma'} \quad . \quad (A.11)$$

Dabei entsprechen die Gleichungen (A.11) denen von (A.9, A.10) mit Rollentausch $\varphi_i \leftrightarrow \varphi'_i$.

Die gleichzeitigen Lösungen von (A.9-A.11) legen die Stationaritätsstelle $\tilde{\omega}, \tilde{\sigma}, \tilde{\omega}', \tilde{\sigma}'$ fest. Daß diese Gleichungen gerade die TIMF-Theorie generieren, kann erkannt werden, wenn man fordert, daß sämtliche eckige Klammern aus (A.9-A.11) verschwinden. Die ausgerechneten Funktionalableitungen der geschweiften Klammern lauten:

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \frac{\delta [\langle \chi' | \Phi \rangle \langle \Phi' | \chi \rangle - D \langle \Phi' | E - \mathcal{H} | \Phi \rangle]}{\delta \langle \varphi'_i |} & (A.12) \\ &= \langle \chi' | \Phi \rangle \frac{\langle \Phi' | \chi \rangle}{\langle \varphi'_i | \chi_i \rangle} | \chi_i \rangle - D \frac{\langle \Phi' | \Phi \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} (\eta_i - h) | \varphi_i \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \frac{\delta [\langle \chi' | \Phi \rangle \langle \Phi' | \chi \rangle - D \langle \Phi' | E - \mathcal{H} | \Phi \rangle]}{\delta | \varphi_i \rangle} & (A.13) \\ &= \frac{\langle \chi' | \Phi \rangle}{\langle \chi'_i | \varphi_i \rangle} \langle \Phi' | \chi \rangle \langle \chi'_i | - D \frac{\langle \Phi' | \Phi \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} \langle \varphi'_i | (\eta_i - h) \end{aligned}$$

mit den normunabhängigen TIMF-Größen η_i (1.21) und h (1.20), *aber* mit den Orbitalen $\varphi_i(\tilde{\omega}, \tilde{\sigma})$ und $\varphi'_i(\tilde{\omega}', \tilde{\sigma}')$ aus (A.5), die sich von (1.19) in der Normierung unterscheiden.

Um die Gleichungen (A.12, A.13), die die Struktur der TIMF-Gleichungen *mit* norm- und phasenerzeugenden Faktoren besitzen, mit den gleichzeitig zu erfüllenden Orbitalgleichungen aus (A.5) *ohne* λ_i, λ'_i in Einklang zu bringen, kann eine Umnormierung aller Orbitale $\varphi_i(\omega_i, \sigma)$ bzw. $\varphi'_i(\omega'_i, \sigma')$ auf die gewünschten Normen in (A.4) vorgenommen werden:

$$\hat{\varphi}_i(\omega_i, \sigma) \equiv \frac{1}{\lambda_i(\omega, \sigma)} \varphi_i(\omega_i, \sigma) \quad \text{bzw.} \quad \hat{\varphi}'_i(\omega'_i, \sigma') \equiv \frac{1}{\lambda'_i(\omega', \sigma')} \varphi'_i(\omega'_i, \sigma') \quad . \quad (A.14)$$

Dieses wird erreicht, indem die Gewichtungsfaktoren gleichzeitig in

$$\left(\prod_{i=1}^N \lambda_i(\omega, \sigma) \right) f(\omega, \sigma) \quad \text{bzw.} \quad \left(\prod_{i=1}^N \lambda'_i(\omega', \sigma') \right) f(\omega', \sigma') \quad (\text{A.15})$$

abgeändert werden, wobei die Orbitale φ_i, φ'_i weiterhin die Gleichung (A.5) erfüllen. Wichtig ist hierbei, daß die selbstkonsistenten Größen η_i und h von der Umnormierung unberührt bleiben; in den Gleichungen (A.14) wurde investiert, daß die Faktoren λ_i nach (1.22) unabhängig unter Umnormierung von Φ' und λ'_i unabhängig unter Umnormierung von Φ ist. Dadurch ist die separate Umnormierung von φ_i, φ'_i in (A.14) legitimiert.

Mit den angepaßten Orbitalen können die Gleichungen (A.12, A.13) umgeschrieben werden:

$$|\chi_i\rangle = \frac{D}{\langle \chi' | \hat{\Phi} \rangle} \frac{\langle \hat{\Phi}' | \hat{\Phi} \rangle \langle \hat{\varphi}'_i | \chi_i \rangle}{\langle \hat{\Phi}' | \chi \rangle \langle \hat{\varphi}'_i | \hat{\varphi}_i \rangle} (\eta_i - h) |\hat{\varphi}_i\rangle \quad (\text{A.16})$$

$$\langle \chi'_i | = \frac{D}{\langle \hat{\Phi}' | \chi \rangle} \frac{\langle \hat{\Phi}' | \Phi \rangle \langle \chi'_i | \hat{\varphi}_i \rangle}{\langle \chi' | \hat{\Phi} \rangle \langle \hat{\varphi}'_i | \hat{\varphi}_i \rangle} \langle \hat{\varphi}'_i | (\eta_i - h) \quad (\text{A.17})$$

Bei Fixierung von D auf D_{TIMF} sind dieses nichts anderes als die TIMF-Gleichungen (1.19) bezüglich $\hat{\varphi}_i, \hat{\varphi}'_i$, da $D_{TIMF} = \langle \chi' | \hat{\Phi} \rangle = \langle \hat{\Phi}' | \chi \rangle$. Somit verschwinden jeweils die zweiten eckigen Klammern aus (A.9-A.11), wenn für die Orbitale φ_i, φ'_i die Bedingung (A.5) mit den stationären Werten $\tilde{\omega}_i = \tilde{\omega}'_i = \eta_i^{TIMF}$ und $\tilde{\sigma}^\circ = \tilde{\sigma}'^\circ = U^{TIMF}$ erfüllt ist, was Einsetzen von (A.14) in (A.16) direkt liefert. Die ersten eckigen Klammern und damit der Stationaritätswert von (A.6) sind bei gleicher Wahl für D ebenfalls identisch Null. Die TIMF-Gleichungen und -Amplitude werden also gewonnen, wenn Stationarität *und* weiterhin das Verschwinden des stationären Werts des Funktionals (A.6) bezüglich der Funktionen (A.4, A.5) gefordert wird.

Literaturverzeichnis

- [1] Reinhardt,H.: Fortschr.d.Physik **30**, 127 (1982)
- [2] Ring,P.,Schuck,P.: The Nuclear Many-Body Problem. New York: Springer 1980
- [3] Blaizot,J.-P.,Ripka,G.: Quantum Theory of Finite Systems. Cambridge,Massachusetts: MIT Press 1986
- [4] Negele,J.-P.,Orland,H.: Quantum Many-Particle Systems. Massachusetts: Addison-Wesley 1981
- [5] Reinhardt,H.: Nucl.Phys. **A 390**, 70 (1982)
- [6] Giraud,B.G.,Nagarajan;M.A.,Thompson;I.J.: Ann.Phys. **152**, 475 (1984)
- [7] Giraud,B.G.,Nagarajan,M.A.,Noble,C.J.: Phys.Rev **A34**, 1034 (1986)
- [8] Lemm,J.C.: Ann.Phys. **244**, 136 (1995)
- [9] Lemm,J.,Weiguny,A.,Giraud,B.G.: Z.Phys. **A336**, 179 (1990)
- [10] Lemm,J.C.: Ann.Phys. **244**, 201 (1995)
- [11] Giraud;B.G,Hahn,Y.: Phys.Rev. **C40**, 2907 (1989)
- [12] Taylor,J.R.: Scattering Theory. New York: Wiley 1972
- [13] Backhaus,P.: Variations-Methoden zur Bestimmung der Energiebreite von Rydberg-Zuständen. WWU Münster: Diplomarbeit 1995
- [14] Lemm,J.C.,Giraud,B.G.,Weiguny,A.: Phys.Rev.Lett. **73** (1994)
- [15] Levit,S.: Phys.Rev. **C21**, 1594 (1980)
- [16] Levit,S.,Negele;J.W.,Paltiel,Z.: Phys.Rev. **C21**, 1603 (1980)
- [17] Kerman,A.K.,Levit,S.,Troudet,T: Ann.Phys. **148**, 436 (1982)
- [18] Kerman,A.K.,Levit,S.: Phys.Rev. **C24**, 1029 (1981)
- [19] Nolting;W.: Grundkurs Theoretische Physik 7: Vielteilchentheorie. Ulmen: Zimmermann-Neufang 1991

[20] Brown, G.E.: Many Body Problems. Amsterdam: North-Holland 1972

[21] Alhassid, Y., Koonin, S.E.: Phys.Rev. **C23**, 1590 (1980)

Ich möchte mich bei Prof. Dr. Achim Weiguny und Dr. Jörg Lemm bedanken, von denen ich viel gelernt habe; insbesondere, zu versuchen, den Überblick zu behalten, die wesentlichen Probleme zu fokussieren und eine gewisse 'Coolness' zu bewahren.

Hiermit versichere ich, diese Arbeit selbständig und ohne andere als die angegebenen Hilfsmittel angefertigt zu haben.

Münster, im November 1996

