

BAYERISCHE AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN
MATHEMATISCH-NATURWISSENSCHAFTLICHE KLASSE

SITZUNGSBERICHTE

JAHRGANG

1970

MÜNCHEN 1971

VERLAG DER BAYERISCHEN AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN

In Kommission bei der C.H.Beck'schen Verlagsbuchhandlung München

Grundzustand und globale Anregungen nach einer Spinorfeldtheorie vom Heisenberg-Typ im Gitterraum mittels umgekehrter Störungsrechnung

Von F. Bopp und H. Maier-Bötzel

Sektion Physik der Universität München

Mit 2 Abbildungen

Vorgelegt am 1. 6. 1970

Abstrakt:

As previously we consider a spinor field equation of the Heisenberg type in a lattice space with a finite number of points. The dimension of the Hilbert space is then also finite. Its metric is positive definit. The coupling constant W is assumed to be of the order of magnitude $\sqrt{Z^3}$ ($Z^3 =$ number of lattice points), corresponding to a finite coupling constant in a continuous space. In this case the inverse perturbation theory, $H_0 = H_{int}$, $H_1 = H_{kin}$, is very useful. The exact solution of the elementary second order perturbation equations is given for the ground state of the Dirac sea with interaction. It can be shown by more advanced methods that the second order result is nearly exact in the limit $Z \rightarrow \infty$. By the way we obtain a rather complicate global excitation spectrum, so to say, of static plasma states. The backbone is a nearly equidistant line spectrum with a splitting of $12 W = O(\sqrt{Z^3})$. Each of this lines is a ground state of a quasi continuous spectrum which is overlapping most of the higher lying energy bands. The band width equals $Z^4/4 W = O(\sqrt{Z^5})$. The line distances within each band are $Z/4 W = O(1/\sqrt{Z})$. They are vanishing in the limit. The energy of the proper ground state is $E_0 = -4 W Z^3 - \frac{Z^4}{4 W}$. The state vectors can be given for all these states. They are unsymmetric under Tauschek-transformation, as Heisenberg has pointed out it for the ground state. For each

energy we obtain pairs of states connected by a certain Tauschek-transformation. It is probable that, in particle physics, only the lowest not overlapping part of the continuous spectrum is relevant. In any case we must expect a coupling between the particle and the plasma states. But up to now we have not yet dealt with particle states.

1. Einführung

Der Raum sei wie früher angegeben [1] bei Einbettung in einen Euklidischen Raum ein einfach kubisches Gitter in einem endlichen Kubus. Die Zahl der Gitterpunkte längs der Kante des Raumkubus sei Z . Die Zahl der Gitterpunkte Z^3 ist also endlich. Danach ist der Hilbertraum für Spinorfeldtheorien endlich dimensional. Bei vierkomponentigen Spinoren ist seine Dimension gleich $16Z^3$.

Das euklidische Maß der Gitterkonstante sei $a = \frac{l}{\sqrt{Z}}$. Darin ist l eine universelle Längenkongstante, von der wir vermuten, daß sie von nuklearer Größe sei, über deren wahre Größe wir aber zunächst keine Annahme machen. Diese muß sich vielmehr z. B. aus den Größen der Massen ergeben. Wir wählen diese Länge und außerdem \hbar und c als Einheiten, so daß alle Größen dimensionslos sind.

Die Annahme $a = \frac{l}{\sqrt{Z}}$ führt dazu, daß die Gitterkonstante im Limes $Z \rightarrow \infty$ verschwindet und daß die Gitterausdehnung über alle Grenzen wächst, vorausgesetzt daß l beim Grenzübergang konstant bleibt. Das Gitter wird also zugleich beliebig fein und beliebig ausgedehnt.

Selbst wenn das Gitter nur dazu dient, den Grenzübergang zum Kontinuum zu definieren, geht in die Theorie eine natürliche Länge ein, die auch im Limes ihre Bedeutung bewahrt, da sich physikalische Größen wie Massen, Wirkungsquerschnitte u. dgl. an ihr messen. Hier betrachten wir den Gitterraum nur als methodisches Hilfsmittel. Doch wollen wir die Möglichkeit nicht ganz aus den Augen verlieren, daß der wirkliche Raum im Kleinen nichteuklidisch sein könnte. In diesem Fall wäre ein endlicher Wert von Z ein Maß für die Nichteuklidizität, wie grob auch

immer der Gitterraum als Modell eines im Kleinen nichteuklidischen Raumes sein mag. Bei solcher Auffassung muß Z eine sehr große Zahl sein: \sqrt{Z} wäre etwa gleich dem Verhältnis von Welt-radius zu Nukleonenradius (also $Z \approx 10^{82}$).

Unter den Spinorfeldtheorien wählen wir wegen ihrer hohen Symmetrie die Heisenbergsche als Modell [2]. In Schrödingerdarstellung[3] lauten der Wechselwirkungsoperator:

$$(1) \quad H_W := H_O = W \sum_{\mathbf{n}, i} \psi^\dagger(\mathbf{n}) \beta^i \psi(\mathbf{n}) \psi^\dagger(\mathbf{n}) \beta_i \psi(\mathbf{n}),$$

$$(\beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4) = (\beta^1, \beta^2, \beta^3, -\beta^4) = (\sigma, \varrho_1)$$

und der Bewegungsoperator:

$$(2) \quad H_B := H_1 = \frac{\sqrt{Z}}{2i} \sum_{\mathbf{n}, k, s} s \psi^\dagger(\mathbf{n}) \varrho_1 \sigma_k \psi(\mathbf{n} + s \mathbf{e}_k), \quad s = \pm 1.$$

Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $\psi_\mu^\dagger(\mathbf{n})$, $\psi_\mu(\mathbf{n})$ genügen den Jordan-Wignerschen Vertauschungsrelationen. Die Bezeichnungen sind dieselben wie früher (I. c. 1).

Der Hilbertraum ist anders als bei Heisenberg positiv definit. Als endlich dimensional ist er vollständig durch die Fockdarstellung gegeben:

$$(3) \quad |\varphi\rangle = F(\psi^\dagger) |O\rangle.$$

Darin ist $|O\rangle$ der Vakuumvektor:

$$(4) \quad \psi_\mu(\mathbf{n}) |O\rangle = O,$$

und $F(\psi^\dagger)$ sind beliebige Polynome von $\psi_\mu^\dagger(\mathbf{n})$. Die Teilchen, die durch $\psi_\mu^\dagger(\mathbf{n})$ in $|O\rangle$ erzeugt und durch $\psi_\mu(\mathbf{n})$ vernichtet werden, nennen wir Urfermionen.

Es ist bekannt, daß sowohl das Vakuum $|O\rangle$ als auch die Urfermionen keine unitärinvariante Bedeutung haben. Man strebt darum an, von einem unitär invariant definierten Zustand auszugehen, dem physikalischen Vakuum, wie man sagt. Doch ist dieser Zustand in Strenge nicht bekannt. Auch haben dahin führende Transformationen die Eigenschaft, daß sie die einfache Struktur der Operatoren in (1) und (2) verschleiern. Da im endlich dimensional Hilbertraum alle Darstellungen unitär äquivalent sind, macht es keine Schwierigkeiten, und es ist im Gegenteil recht

empfehlenswert, bei der Urfermionendarstellung zu bleiben. Doch sei nachdrücklich betont, daß wir in den Urfermionen keineswegs so etwas wie Urmaterie sehen. Würden wir z. B. zur Dürr'schen [4] Darstellung übergehen, so würden gewisse Zustände, die hier aus zwei Urfermionen bestehen, Null- oder Vier-Teilchen-Zustände sein (H. Frank)*. Die Begriffe Vakuum und Urfermion sind also auf eine spezielle Darstellung bezogen, die bequem ist, weil sich in ihr das das Geschehen beherrschende Gesetz einfach formulieren läßt.

Natürlich bleibt die Aufgabe, den Grundzustand zu definieren und zu berechnen. Das soll hier geschehen. Die Gesamtzahl der Urfermionen ist konstant. Die Welt besteht also aus einer bestimmten Zahl von Urfermionen. Von dem gesamten Hilbertraum hat daher nur der mit einer bestimmten Zahl von Urfermionen Realbedeutung. Dirac folgend nehmen wir an, daß von den $4Z^3$ Plätzen die Hälfte besetzt ist. In einem „Hotel mit endlich vielen Zimmern“¹ ist das wohldefiniert. Wir betrachten also die Welt als einen Diracsee mit $2Z^3$ Urfermionen. Die Dimension des Unterraumes mit $2Z^3$ Teilchen ist gleich $\binom{4Z^3}{2Z^3} = \frac{(4Z^3)!}{((2Z^3)!)^2}$. Sie ist größer als bei jeder anderen Teilchenzahl.

Von diesem System suchen wir den Zustand oder die Zustände kleinster Energie. Wir nennen sie „wahre Grundzustände des Diracsees“. Es wird sich zeigen, daß es tatsächlich mehrere Zustände kleinster Energie gibt, von denen einer in dem Maße zur realen Welt gehört, in dem wir mit dem Ansatz in den Gl. (1) und (2) die reale Welt erfassen. Auf die Frage, ob und wie weit das der Fall ist, gehen wir nicht ein, weil wir uns hier nicht für die Frage interessieren, ob wir mit dem Heisenbergschen Ansatz bereits alle Symmetrien im Griff haben oder nicht. Es kommt uns vielmehr darauf an, die Dynamik besser zu beherrschen als bisher, weil das, wie wir meinen, die Voraussetzung zur abschließenden Beurteilung von Symmetrieproblemen ist.

* l. c. 7.

¹ D. Hilbert hat schon 1934 gesprächsweise zu bedenken gegeben, ein Hotelier mit unendlich vielen Zimmern könne nicht sagen, seine Südzimmer seien besetzt, weil jeder Gast in das nächste Zimmer ziehen könne⁶).

Spinorfeldtheorien mit endlicher Kopplungskonstante im Kontinuum führen im Gitterraum zu Kopplungskonstanten von der Größenordnung [8] $W = O(\sqrt{Z^3})$. Nach den Gl. (1) und (2) folgt daraus, daß der Bewegungsoperator klein gegen den Wechselwirkungsoperator ist. Man sollte also meinen, daß die umgekehrte Störungsrechnung, bei der man mit den Eigenlösungen des Wechselwirkungsoperators beginnt, angemessen sei. Doch sind bisherige Versuche in dieser Richtung nicht gerade ermutigend [5]. Das kann verschiedene Gründe haben. Erstens hat man bei Beschränkung auf Bosonen stets einen unendlich dimensional Hilbertraum. Zweitens weiß man, daß es beim Vielkörperproblem nicht allein auf die Kleinheit der Störung ankommt. Viele kleine Störungen können sich insbesondere bei höheren Ordnungen zu überwältigenden Beiträgen aufsummieren.

Ob das die entscheidenden Hindernisse sind, wissen wir nicht. Doch ist es ein Faktum, daß die umgekehrte Störungsrechnung in Verbindung mit Summationsmethoden zu überraschend guten Ergebnissen führt. H. Frank [7] hat eine strenge Lösung der Heisenberg-Theorie im Gitterraum angeben können, die bei hinreichend großem W tiefer liegt, als alle Näherungen, die man von der gewöhnlichen Störungsrechnung herkommend erreicht hat. Zugleich zeigen seine Ergebnisse, daß es noch tiefere Zustände geben muß. Diese kann man mittels einer umgekehrten Störungsrechnung zweiter Ordnung in den Griff kriegen, zunächst allerdings ohne zu wissen, wie gut die so erreichte Näherung ist.

Bisher haben wir angenommen, daß $W = O(\sqrt{Z^3})$ ist. Nun sprechen frühere Rechnungen mehr für die Annahme, daß W wesentlich kleiner ist, nämlich $W = O(\sqrt{Z})$ [1, 8]. So konnte unter der speziellen Voraussetzung $W \approx \frac{1.1}{4} \sqrt{Z}$ gezeigt werden, daß man mit direkter Störungsrechnung ($H_0 = H_B, H_1 = H_W$) schon bei Beschränkung auf die Hartree-Fock-Näherung zu einer endlichen Masse gelangt. Die tiefste Energie von H , die man im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung erhält, liegt jedoch für alle $W \geq \frac{1.25}{4} \sqrt{Z}$ höher als die Energie, die wir durch die inverse Störungsrechnung ($H_0 = H_W, H_1 = H_B$) gewinnen konnten. An Hand der Figur 1 lassen sich die Verhältnisse unmittelbar über-

blicken. Dabei erweist sich in dem Gebiet, in dem direkte und die inverse Störungsrechnung konkurrieren, die folgende Einheitenwahl als zweckmäßig

$$x = \frac{4W}{\sqrt{Z}} \quad y = \frac{E}{\sqrt{Z^3}}$$

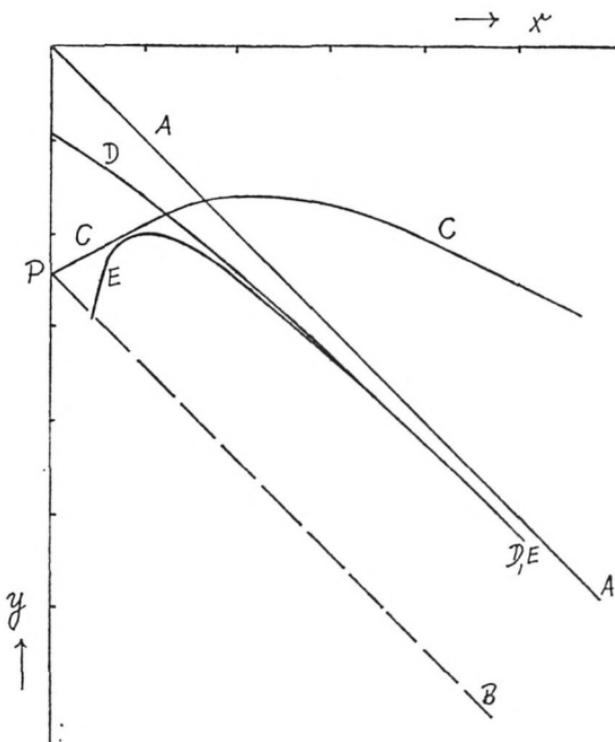


Fig. 1: Die Energie verschiedener Näherungen für den Grundzustand in Abhängigkeit von der Kopplungskonstanten W

Die Kurve (A) gibt die Energie des Grundzustandes von $H_0 = H_W$ in den neuen Einheiten wieder:*

$$y = -x.$$

Die Gerade (B),

$$y = -2.3876 - x,$$

* Zugleich stellt sie die Energie der von H. Frank gefundenen strengen Lösungen der Heisenberg-Theorie im Gitterraum dar.

stellt, wie früher nachgewiesen wurde, eine absolute untere Schranke für die Eigenwerte von H dar (l. c. 1). Der Punkt P ,

$$y = -2.3876, x = 0,$$

entspricht exakt der tiefsten Energie von $2Z^3$ Urfermionen ohne Wechselwirkung.

Der tiefste Erwartungswert von H in der Hartree-Fock-Näherung (C) wird für die Grenzfälle $x \leq 1$ und $x \gg 1$ durch die nachstehenden Formeln beschrieben:

$$y = -2.3876 + \frac{1}{2}x, x \leq 1,$$

$$y = -\frac{1}{2}x, x \gg 1.$$

In Figur 1 wurde zwischen den beiden Grenzfällen graphisch interpoliert. Der genaue Verlauf läßt sich aus den in einer früheren Arbeit (l. c. 1) angegebenen Tafeln bestimmen, spielt hier aber keine Rolle.

Die Kurve (D),

$$y = -\frac{13}{22}x - \frac{9}{22}\sqrt{x^2 + \frac{44}{9}}$$

stellt das Ergebnis einer Variationsrechnung mit einem Testansatz dar, der aus dominanten, nach demselben Prinzip aufgebauten Termen jeder Ordnung der inversen Störungsrechnung gebildet ist (vgl. Ziff. 4, 5). Das Ergebnis der inversen Störungsrechnung 2. Ordnung wird von der Kurve (E),

$$y = -x - \frac{1}{x},$$

wiedergegeben (s. Ziff. 3). Zugleich beschreibt sie das asymptotische Verhalten der Kurve (D).

Die inverse Störungsrechnung verliert, wie aus Figur 1 unmittelbar hervorgeht, unterhalb eines bestimmten Wertes der Wechselwirkungskonstante ihre Gültigkeit. Wie nahe der oben angegebene Wert $W = \frac{1.25}{4}\sqrt{Z}$ dieser Grenze schon kommt, hängt wesentlich von der Güte der Lösung (D) ab. In jedem Fall liegt

der Wert $W = \frac{1.1}{4} \sqrt{Z}$, bei dem im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung eine endliche Masse auftritt, an der Grenze des Gültigkeitsbereiches dieser Näherung. Die Wahl kräftefreier Teilchen als Ausgangspunkt von Näherungsverfahren ist also offensichtlich nur für kleine W ($W < 0.4 \sqrt{Z}$) günstig, speziell folgt für Kontinuumstheorien mit endlicher Kopplungskonstante, daß sie wegen $W = O(\sqrt{Z^3})$ weit jenseits dieses Bereiches liegen.

E. Weidemann [9] und H.-J. Winter haben die umgekehrte Störungsrechnung mit der Methode der Greenfunktionen durchgeführt und dabei insbesondere den Fall $W = O(\sqrt{Z})$ ins Auge gefaßt. Unsere Rechnungen sind mehr der konventionellen Annahme $W = O(\sqrt{Z^3})$ angepaßt, doch erstreckt sich ihre Gültigkeit auch noch in das Gebiet $W = O(\sqrt{Z})$. Wo der wirkliche Wert von W liegt, bleibt im folgenden noch eine offene Frage. Es sei aber erwähnt, daß Untersuchungen von H. Müller [10] und M. Löwer [11] für die Annahme $W = O(\sqrt{Z^3})$ sprechen.

Nach orientierenden Rechnungen mit elementarer Störungsrechnung und mit der Variationsmethode haben wir zunächst die Resolventenmethode benutzt. Dabei hat sich gezeigt, daß im $\sqrt{Z^3}$ -Fall verschiedene Teilsummen in ihrer Größenordnung so verschieden sind, daß man nur wenige Teilsummen wirklich berechnen muß. Für $W = O(\sqrt{Z^3})$, – also auch bei endlichen Kopplungskonstanten g im Kontinuum, – ist sozusagen die Kopplung immer stark, wie klein der Zahlenwert von g auch sein mag.

Die Teilsummen haben sich ausrechnen lassen. Dabei ist man zu Ausdrücken gelangt, die man ohne die Mühe der Summationen direkt aus der Schrödingergleichung gewinnen kann. Diesen Weg schlagen wir hier ein. Es ist nicht unwahrscheinlich, daß man auf solche Weise Ergebnisse erhalten kann, die im Limes $Z \rightarrow \infty$ exakt gelten. Wie weit wir dies im folgenden bereits erreicht haben, wird noch genauer gesagt. Sicher liegt der erreichte Wert tiefer als alle, die uns bekannt sind, auch tiefer als der Franksche.

Ferner erhält man auf dem eingeschlagenen Weg nicht nur den Grundzustand, sondern ein mehrfach gegliedertes Spektrum von

globalen Anregungen, (statischen Plasmaanregungen) des Diracsees, die noch nichts mit Teilchenanregungen (Quasiteilchen) zu tun haben. Erstens gibt es Anregungen, die dem Spektrum des Wechselwirkungsoperators entsprechen. Zweitens werden diese Terme im $\sqrt{Z^3}$ -Fall wie in der Festkörperphysik zu quasi-kontinuierlichen Bändern auseinandergezogen, die sich übereinanderschieben. In diese Bänder sind die Teilchenspektren eingebettet. Die Termstruktur ist hiernach ziemlich verwickelt. Man wird sie wohl bei der Berechnung der Teilchenspektren berücksichtigen müssen.

Fast harmlos erscheint demgegenüber, daß der Grundzustand zweifach entartet ist. Dies ist auch im Einklang mit den Ergebnissen von Heisenberg [2]. Schon die bereits erwähnten exakten Lösungen von H. Frank sind zweifach entartet.

Schließlich ist zu bemerken, daß das Lösungsverfahren nicht nur die Energie des Grundzustandes liefert, sondern auch einen geschlossenen Ausdruck für den zugehörigen Zustandsvektor.* Diese weitreichenden Ergebnisse werden dadurch erzielt, daß wir zwar in den einzelnen Ordnungen der Störungsrechnung nahe-liegende Näherungen machen, daß wir aber im übrigen zu Störungen unendlich hoher Ordnung fortschreiten. Die Näherungen in den einzelnen Ordnungen kommen dadurch zustande, daß man jeden Zustandsvektor in Teile zerlegen kann, die zu bestimmten Energien des Wechselwirkungsoperators $H_W = H_O$ gehören und daß diese Projektionen Summen sind, die sich in der Zahl ihrer Summanden um Z -Potenzen unterscheiden. Im Limes ist also die Zahl der Summanden unendlich verschieden. Da wir die Störungsreihen vollständig aufsummieren und die Näherung nur dadurch hereinkommt, daß wir unter den genannten Projektionen eine Auswahl treffen, können wir von einer Projektionsmethode sprechen. Die auf diese Weise gewonnene tiefste Energie stellt, da die Projektionsmethode im wesentlichen äquivalent einer Variationsrechnung mit einer entsprechenden Testfunktion ist (vgl. Ziff. 5), eine obere Schranke für die Grundzustandsenergie dar.

* Auch für die Zustandsvektoren der globalen Anregungen lassen sich geschlossene Ausdrücke angeben.

2. Grundzustände des Wechselwirkungsoperators

Bereits früher (l. c. 1) haben wir das lokale Energiespektrum des Wechselwirkungsoperators in Gl. (1) bestimmt. Das Ergebnis ist aus folgender Tafel zu entnehmen:

Energie	Teilchenzahl	Entartungsgrad	Anhebung	Zustandsvektor
$E = + 8W$	$N = 2$	$= 3$	$= 12W$	$\psi^\dagger \sigma \psi^\dagger O \rangle$
$+ 2W$	$1; 3$	8	$6W$	alle
0	$0; 2; 4$	3	$4W$	$ O \rangle; \psi^\dagger \varrho_1 \psi^\dagger O \rangle;$ $\psi_1^\dagger \psi_2^\dagger \psi_3^\dagger \psi_4^\dagger O \rangle$
$- 4W$	2	2	0	$\psi^\dagger \varrho_i \psi^\dagger O \rangle, i = 2, 3$

Danach ist

$$(6) \quad | F_2 \rangle = \prod_{\mathbf{n}} \psi^\dagger(\mathbf{n}) \frac{\varrho_2}{\sqrt{8}} \psi^\dagger(\mathbf{n}) | O \rangle$$

einer der Grundzustände von $H_O = H_W$. Andere erhält man, indem man ϱ_2 in beliebigen Faktoren durch ϱ_3 ersetzt. Das sind 2^{2^3} linear unabhängige Zustände, die man noch beliebig linear kombinieren kann.

Diese Zustände kann man mittels der Operatoren

$$(7) \quad I(\mathbf{n}) = \frac{1}{2} \psi^\dagger(\mathbf{n}) \varrho_1 \psi(\mathbf{n})$$

aus $| F_2 \rangle$ erzeugen. Aus

$$(8) \quad \begin{cases} \psi^\dagger \varrho_1 \psi \psi^\dagger \varrho_2 \psi^\dagger | O \rangle = 2i \psi^\dagger \varrho_3 \psi^\dagger | O \rangle \\ \psi^\dagger \varrho_1 \psi \psi^\dagger \varrho_3 \psi^\dagger | O \rangle = -2i \psi^\dagger \varrho_2 \psi^\dagger | O \rangle \end{cases}$$

folgt, daß $I(\mathbf{n})$ vor $| F_2 \rangle$ die Matrix ϱ_2 an der Stelle \mathbf{n} in $i\varrho_3$ verwandelt und daß

$$(9) \quad I(\mathbf{n})^2 | F_2 \rangle = | F_2 \rangle$$

ist. Bezeichnen wir gemäß

$$(10) \quad I := \{I(\mathbf{n})\}$$

die Gesamtheit aller $I(\mathbf{n})$ mit I , so ist der Hilbertraum der Grundzustände von H_0 durch

$$(11) \quad |f\rangle = f(I) |F_2\rangle$$

bestimmt. Darin ist $f(I)$ ein beliebiges multilineares Polynom. Wegen (9) kommt $I(\mathbf{n})$ in jedem Summanden höchstens einmal vor. Beispielsweise ist

$$(12) \quad |F_3\rangle = \prod_{\mathbf{n}} I(\mathbf{n}) |F_2\rangle$$

derjenige Zustandsvektor, der aus (7) hervorgeht, indem man alle ϱ_2 durch ϱ_3 ersetzt.

Sämtliche Zustände $|f\rangle$ gehören zum Eigenwert

$$(13) \quad E_0 = -4WZ^3$$

von $H_0 = H_W$:

$$(14) \quad H_0 |f\rangle = E_0 |f\rangle.$$

Bei allen verschwindet die mittlere kinetische Energie

$$(15) \quad E_{kin} = \langle f | H_1 | f \rangle = 0.$$

Im allgemeinen sind jedoch die $|f\rangle$ keine Eigenlösungen von H_1 . H. Frank (l. c. 7) hat gezeigt, daß die beiden speziellen Zustände

$$(16) \quad |F_{\pm}\rangle = \prod_{\mathbf{n}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} (1 \pm I(\mathbf{n})) \right) |F_2\rangle$$

auch Eigenlösungen von H_1 sind. Nach (15) muß dann

$$(17) \quad H_1 |F_{\pm}\rangle = 0$$

sein. Folglich sind $|F_{\pm}\rangle$ Eigenlösungen von H :

$$(18) \quad H |F_{\pm}\rangle = (H_0 + H_1) |F_{\pm}\rangle = E_0 |F_{\pm}\rangle.$$

Nach Ausmultiplikation lauten die beiden Frankschen Lösungen

$$(19) \quad |F_{\pm}\rangle = \prod_{\mathbf{n}} \psi^{\dagger}(\mathbf{n}) \frac{\varrho_2 \pm i\varrho_3}{4} \psi^{\dagger}(\mathbf{n}) |O\rangle.$$

Andere Zustände $|f\rangle$, die keine Eigenlösungen von H_1 sind, müssen nach (15) Zustände enthalten, die zu einer tieferen Energie

gehören. Darum ist der Franksche Zustand notwendig vom Grundzustand verschieden. Wir wollen versuchen, solche tiefer liegende Zustände zu ermitteln. Dabei werden uns folgende Zustände begegnen:

$$(20) \quad |s(\mathbf{n})\rangle = \prod_{\mathbf{n}, k} \frac{1 - s(\mathbf{n}) I(\mathbf{n}) I(\mathbf{n} + \mathbf{e}_k)}{2} |F_2\rangle.$$

Darin bilden die \mathbf{e}_k das Dreibein der Gitterbasis. Durch die Funktion $s(\mathbf{n})$ wird jedem Gitterpunkt ein Vorzeichen zugeordnet. Es gibt 2^{Z^3} verschiedene Möglichkeiten. Aber nicht alle führen zu unabhängigen Zustandsvektoren. Da beim Ausmultiplizieren der Produkte nur Glieder mit gerader Faktorenzahl vorkommen, gibt es nur halb so viele unabhängige Vektoren. Die andere Hälfte erhält man bei ungeradem* Z , indem man von $|F_3\rangle$ ausgeht. Beide Hälften gehen gemäß

$$\frac{1 - i\varrho_1}{\sqrt{2}} \varrho_2 \frac{1 + i\varrho_1}{\sqrt{2}} = \varrho_3$$

durch eine Tauschek-Transformation auseinander hervor. Was wir aus Gl. (20) ableiten werden, gilt entsprechend, wenn wir $|F_2\rangle$ durch $|F_3\rangle$ ersetzen. Danach bilden beide Hälften zusammen wiederum eine vollständige Basis des Hilbertraumes der Grundzustände von H_0 . Die Bedeutung der Zustandsvektoren in (20) und der entsprechenden mit $|F_3\rangle$ beruht darauf, daß sie auch nach Einschaltung der Störung H_1 Eigenfunktionen** sind. Nach Gl. (15) tritt die partielle Aufhebung der Entartung erstmals in der Störungsrechnung 2. Ordnung auf.

3. Störungsrechnung zweiter Ordnung

Wir gehen von den Grundgleichungen der Störungsrechnung zweiter Ordnung aus:

* Bei geradem Z ist die Betrachtung ein wenig komplizierter, so daß wir uns im weiteren auf ungerade Z beschränken.

** In Strenge ist dies nur bei der Störungsrechnung 2. Ordnung richtig, doch mischen sich die Zustände in (20) auch bei Störungsrechnung höherer Ordnung nicht mehr.

$$(21) \quad \begin{cases} (H_0 - E_0) |\varphi_0\rangle = 0, \\ (H_0 - E_0) |\varphi_1\rangle = -(H_1 - E_1) |\varphi_0\rangle, \\ (H_0 - E_0) |\varphi_2\rangle = -(H_1 - E_1) |\varphi_1\rangle + E_2 |\varphi_0\rangle. \end{cases}$$

Es sei

$$(22) \quad |\varphi_0\rangle = |s(\mathbf{n})\rangle, \quad E_0 = -4WZ^3.$$

Daraus erhält man mittels (15):

$$(23) \quad E_1 = 0.$$

Die verbleibende Gleichung

$$(24) \quad (H_0 - E_0) |\varphi_1\rangle = -H_1 |\varphi_0\rangle$$

läßt sich leicht in Strenge auflösen. Der Zustand $H_1 |\varphi_0\rangle$ besteht nämlich nach der Gleichung (2) aus einer Summe von Zuständen, die außer in zwei Punkten mit den lokalen Grundzuständen identisch sind. In einem der Ausnahmepunkte haben wir drei Urfermionen, im anderen nur eines, nach unserer Energietafel also die Energieanhebung um $2 \cdot 6W = 12W$. Folglich ist

$$(H_0 - E_0) H_1 |\varphi_0\rangle = 12WH_1 |\varphi_0\rangle.$$

Daraus folgt als Lösung von Gl. (24):

$$(25) \quad |\varphi_1\rangle = -\frac{1}{12W} H_1 |\varphi_0\rangle.$$

Die Energiestörung zweiter Ordnung ist also in Strenge gleich:

$$(26) \quad E_2 = -\frac{1}{12W} \langle \varphi_0 | H_1^2 | \varphi_0 \rangle.$$

Klarerweise ist es eine Energieabsenkung.

Mit dem Operator aus Gl. (2) erhalten wir explizite (Summation über $\mathbf{n}_1, k_1, s_1, \mathbf{n}_2, k_2, s_2$):

$$(27) \quad E_2 = \frac{Z}{48W} \sum s_1 s_2 \langle \varphi_0 | \psi^\dagger(\mathbf{n}_1) \varrho_1 \sigma_{k_1} \psi(\mathbf{n}_1 + s_1 \mathbf{e}_{k_1}) \cdot \psi^\dagger(\mathbf{n}_2) \varrho_1 \sigma_{k_2} \psi(\mathbf{n}_2 + s_2 \mathbf{e}_{k_2}) | \varphi_0 \rangle.$$

Offensichtlich sind nur solche Summanden von 0 verschieden, die zu keiner Verlagerung der Urfermionen führen. Darum ist

$$(28) \quad \mathbf{n}_2 = \mathbf{n}_1 + s_1 \mathbf{e}_{k_1}, \quad \mathbf{n}_1 = \mathbf{n}_2 + s_2 \mathbf{e}_{k_2}.$$

Daraus folgt

$$(29) \quad s_1 = s_2 = -s_1, \quad k_1 = k_2 = k_1,$$

und Gl. (17) vereinfacht sich wie folgt

$$(30) \quad E_2 = -\frac{Z}{48W} \sum_{\mathbf{n}, k, s} \langle \varphi_0 | \psi^\dagger(\mathbf{n}) \varrho_1 \sigma_k \psi(\mathbf{n} + s \mathbf{e}_k) \psi^\dagger(\mathbf{n} + s \mathbf{e}_k) \varrho_1 \sigma_k \psi(\mathbf{n}) | \varphi_0 \rangle.$$

Die Produkte $\psi_\mu^\dagger(\mathbf{n}) \psi_\nu(\mathbf{n})$ kann man umformen; es ist nämlich

$$(31) \quad \psi_\mu^\dagger \psi_\nu = \frac{1}{4} \sum_i \gamma_{i\nu\mu} \psi^\dagger \gamma_i \psi.$$

Darin läuft der Index i von 1 bis 16 und die γ_i sind in irgendeiner Reihenfolge die Matrizen 1 , ϱ_i , σ_k und $\varrho_i \sigma_k$. Wir verifizieren diese Gleichung durch Matrixmultiplikation mit $(\gamma_{k\mu\nu})$ und Spurbildung. Dafür erhält man

$$\psi^\dagger \gamma_k \psi = \frac{1}{4} \sum_i \text{Spur}(\gamma_i \gamma_k) \psi^\dagger \gamma_i \psi,$$

was wegen

$$\text{Spur}(\gamma_i \gamma_k) = 4 \delta_{ik}$$

richtig ist. Wegen der Vollständigkeit der Matrixbasis gilt auch die Umkehrung. Mit Rücksicht auf die Vertauschungsrelationen folgt aus (31):

$$(32) \quad \psi_\mu \psi_\nu^\dagger = \delta_{\mu\nu} - \frac{1}{4} \sum_i \gamma_{i\mu\nu} \psi^\dagger \gamma_i \psi.$$

Durch Substitution in (30) erhält man für den Operator zwischen BRA und KET:

$$\begin{aligned} & + \frac{1}{4} \sum_{i, k} \text{Spur}(\gamma_i \varrho_1 \sigma_k \varrho_1 \sigma_k) (\psi^\dagger(\mathbf{n}) \gamma_i \psi(\mathbf{n})) \\ & - \frac{1}{16} \sum_{i, k', k} \text{Spur}(\gamma_i \varrho_1 \sigma_k \gamma_{k'} \varrho_1 \sigma_k) (\psi^\dagger(\mathbf{n}) \gamma_i \psi(\mathbf{n})) \\ & \quad (\psi^\dagger(\mathbf{n} + s \mathbf{e}_k) \gamma_{k'} \psi(\mathbf{n} + s \mathbf{e}_k)). \end{aligned}$$

Wenn die Matrizen γ_i von 1 und ϱ_1 verschieden sind, machen sie aus dem KET-Vektor einen, der gleich 0 oder zum BRA-Vektor orthogonal ist. Wir brauchen also nur die Matrizen $\gamma = 1$ und $\gamma = \varrho_1$ zu berücksichtigen. Darum bleiben von den letzten Ausdrücken, da außerdem $\psi^\dagger(\mathbf{n})\psi(\mathbf{n})$ vor $|\varphi_0\rangle$ gleich 2 ist und einige der Spuren verschwinden, nur folgende übrig

$$(33) \quad +2 - 1 - I(\mathbf{n})I(\mathbf{n} + s\mathbf{e}_k) = +1 - I(\mathbf{n})I(\mathbf{n} + s\mathbf{e}_k).$$

Nun ist

$$(34) \quad \frac{1 - I(\mathbf{n})I(\mathbf{n} + s\mathbf{e}_k)}{2} \cdot \frac{1 - s(\mathbf{n})I(\mathbf{n})I(\mathbf{n} + s\mathbf{e}_k)}{2} \\ = \frac{1 - s(\mathbf{n})I(\mathbf{n})I(\mathbf{n} + s\mathbf{e}_k)}{2} \frac{1 + s(\mathbf{n})}{2}.$$

Damit folgt aus (30) und (33)

$$E_2 = -\frac{Z}{24W} \sum_{\mathbf{n}, k, s} \frac{1 + s(\mathbf{n})}{2}.$$

Das sind $6Z^3$ Summanden. Führen wir den Mittelwert der Vorzeichenfunktion $s(\mathbf{n})$ ein, sozusagen das mittlere Vorzeichen:

$$(35) \quad \bar{s} = \frac{1}{6Z^3} \sum_{\mathbf{n}, k, s} s(\mathbf{n}) = \frac{1}{Z^3} \sum_{\mathbf{n}} s(\mathbf{n}),$$

das von +1 bis -1 läuft, so erhalten wir als Störungsenergie zweiter Ordnung:

$$(36) \quad E_2 = -\frac{Z^4}{4W} \frac{1 + \bar{s}}{2}.$$

Das Ergebnis ist in zweiter Ordnung der Störungsrechnung streng. Das Spektrum reicht von der maximalen Absenkung $-Z^4/4W$ bis zur Absenkung 0. Die Energie des Grundzustands lautet in dieser Näherung:

$$(37) \quad E = -4WZ^3 - \frac{Z^4}{4W}; \quad \frac{Z^4}{4W} = O(\sqrt{Z^5}) \text{ für } W = O(\sqrt{Z^3}).$$

Wir haben schon betont, daß die Störungsrechnung zweiter Ordnung nicht zulässig sein muß. Das zeigt sich z. B. darin, daß die Norm des in erster Ordnung korrigierten Zustandsvektors

$$(38) \quad |\varphi\rangle = |\varphi_0\rangle + |\varphi_1\rangle = \left(1 - \frac{1}{12W} H_1\right) |\varphi_0\rangle$$

sehr groß wird. Ohne neue Rechnungen findet man für den Grundzustand $|\varphi_0\rangle := |F\rangle$ mit $s(\mathbf{n}) = 1, \bar{s} = 1$:

$$(39) \quad \langle \varphi | \varphi \rangle = 1 + \frac{1}{144 W^2} \langle F | H_1^2 | F \rangle = \frac{Z^4}{48 W^2} + 1,$$

was im Falle $W = O(\sqrt{Z^3})$ von der Größenordnung Z ist. Das Ergebnis erscheint hiernach sehr fragwürdig. Doch wird es durch die folgende, sehr viel genauere Rechnung nicht mehr korrigiert.

4. Grundzustand und globale Anregungen

Die Einfachheit der Störungsrechnung zweiter Ordnung beruht darauf, daß $H_1 |\varphi_0\rangle$ Eigenlösung von H_0 ist. Würde das auch für höhere Potenzen von H_1 gelten, so erhielten wir bei Fortsetzung der Störungsrechnung in Strenge eine Potenzreihe in H_1 . Nun sind die Zustände $H_1^l |\varphi_0\rangle$ sicher keine exakten Eigenzustände von H_0 , doch besitzen alle einen stark dominierenden Term, der Eigenzustand von H_0 ist. So gehören in $H_1^2 |\varphi_0\rangle$ nach Gl. (27) alle Summanden zu demselben Eigenwert von $H_0 - E_0$, nämlich $24W$, für die die vier Argumente $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_1 + s_1 \mathbf{e}_{k_1}, \mathbf{n}_2 + s_2 \mathbf{e}_{k_2}$ voneinander verschieden sind. Deren Anzahl ist von der Größenordnung Z^6 , während die Anzahl der übrigen von der Größenordnung Z^3 ist. Man kann also erwarten, daß die Potenzreihe

$$(40) \quad |\varphi\rangle = \sum_{l=0} a_l \{H_1^l\} |\varphi_0\rangle$$

eine gute Näherung liefert, wenn man unter $\{H_1^l\}$ versteht, daß nach Ausmultiplikation der Summen nur diejenigen Summanden beibehalten werden, die lauter verschiedene Argumente haben. Das ist ein wohldefinierter Ansatz, der den allgemeinsten Zustand in dem Unterraum darstellt, der von den Zuständen $\{H_1^l\} |\varphi_0\rangle$ ($l = 0, 1, 2 \dots$) aufgespannt wird. Bezeichnen wir mit P den Projektionsoperator auf diesen Unterraum,* so gilt:

$$(40a) \quad P |\varphi\rangle = |\varphi\rangle; (1 - P) |\varphi\rangle = 0.$$

* Den Unterraum selbst bezeichnen wir mit $\{P\}$.

Die auf diesen Unterraum reduzierte Schrödingergleichung lautet dann:

$$(41) \quad PH_1 |\varphi\rangle = (E - H_0) |\varphi\rangle$$

Bei geeigneter Wahl der Koeffizienten a_l ist der Ansatz (40) für $|\varphi\rangle$ eine exakte Lösung der Gleichung (41). Wegen (40a) ist unmittelbar erkennbar, daß die Lösung der reduzierten Schrödingergleichung im wesentlichen äquivalent mit dem Ergebnis einer Variationsrechnung mit $|\varphi\rangle$ als Testzustand ist. Damit ist gesichert, daß der tiefste Eigenwert der Gleichung (41) eine obere Schranke für die wahre Grundzustandsenergie darstellt.

Die rechte Seite der Gleichung (41) läßt sich leicht angeben, führt doch der Operator $(E - H_0)$ nicht aus dem Unterraum heraus:

$$(42) \quad (E - H_0) |\varphi\rangle = - \sum_{l=0} a_l (\varepsilon + 12Wl) \{H_1^l\} |\varphi_0\rangle$$

Darin bedeutet

$$(43) \quad \varepsilon = -(E + 4WZ^3)$$

die Energieabsenkung. Mit den Bezeichnungen

$$(44) \quad \omega = 12W; \varepsilon = \lambda\omega$$

läßt sich (42) übersichtlicher schreiben:

$$(45) \quad (E - H_0) |\varphi\rangle = - \omega \sum_{l=0} a_l (\lambda + l) \{H_1^l\} |\varphi_0\rangle$$

Weniger einfach ist die Berechnung der linken Seite von Gleichung (41):

$$(46) \quad PH_1 |\varphi\rangle = \sum_{l=0} a_l PH_1 \{H_1^l\} |\varphi_0\rangle,$$

denn der Operator H_1 liefert bei Anwendung auf $|\varphi\rangle$ auch Terme außerhalb des Unterraums $\{P\}$. Unter den Summanden von H_1 finden sich offensichtlich solche, die in das Klammersymbol aufgenommen werden können. Diese bilden den Zustand

$$(47) \quad \sum_I a_I P \{H_1^{I+1}\} |\varphi_0\rangle = \sum_I a_I \{H_1^{I+1}\} |\varphi_0\rangle,$$

der klarerweise zum Unterraum gehört.

Zu jedem der übrigen Summanden des vor der geschweiften Klammer stehenden H_1 findet sich unter den Summanden der H_1 aus der geschweiften Klammer mindestens einer, der in einem oder zwei seiner Argumente mit einem oder zwei Argumenten des Summanden vom äußeren H_1 übereinstimmt. Damit fällt in jedem Fall wenigstens eine Gittersumme weg. Die meisten dieser Zustände liegen nicht im Unterraum $\{P\}$, werden also in (46) unterdrückt. Freilich würden diese Zustände auch Beiträge zum Unterraum $\{P\}$ liefern, wenn wir die Schrödingergleichung statt im Unterraum $\{P\}$ im ganzen Hilbertraum lösen würden. Doch müßte dazu der Operator H_1 unter Wegfall einer weiteren Gittersumme abermals ins Spiel kommen. Als 1. Näherung ist deshalb sicher gerechtfertigt, die Zustände aus dem Unterraum $\{1 - P\}$ in der Reihe (46) zu vernachlässigen, nachdem der Einfluß der großen Zahl von Urfermionen durch die Reihen (47) und (51) aufgefangen wird.

Unter den Termen, bei denen Argumente der Summanden des äußeren H_1 mit Argumenten von Summanden der inneren H_1 zusammenfallen, befinden sich aber auch solche, die zum Unterraum $\{P\}$ beitragen. Sie stecken in denjenigen Summanden, bei denen die Operatoren ψ^\dagger und ψ des vor der geschweiften Klammer stehenden H_1 und die ψ^\dagger und ψ von je einem H_1 aus der geschweiften Klammer paarweise gleiche Argumente haben:

$$(48a) \quad \underline{H_1 H_1} = \frac{Z}{4} \sum_{n,s,k} \psi^\dagger(\mathbf{n} + s\mathbf{e}_k) \varrho_1 \sigma_k \psi(\mathbf{n}) \psi^\dagger(\mathbf{n}) \varrho_1 \sigma_k \psi(\mathbf{n} + s\mathbf{e}_k).$$

Mit der Relation (31) läßt sich der kontraktionsartige Ring $\underline{H_1 H_1}$ in folgender Weise schreiben

48b)

$$\begin{aligned} \underline{H_1 H_1} &= \frac{Z}{4} \sum_{n,s,k} \left(\psi^\dagger(\mathbf{n} + s\mathbf{e}_k) \psi(\mathbf{n} + s\mathbf{e}_k) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{16} \sum_{i,j} \text{Spur} (\gamma_i \varrho_1 \sigma_k \gamma_j \varrho_1 \sigma_k) \psi^\dagger(\mathbf{n} + s\mathbf{e}_k) \gamma_i \psi(\mathbf{n} + s\mathbf{e}_k) \right. \\ &\quad \left. \psi^\dagger(\mathbf{n}) \gamma_j \psi(\mathbf{n}) \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{Z}{4} \sum_{\mathbf{n}, s, k} \left(\psi^\dagger(\mathbf{n} + s \mathbf{e}_k) \psi(\mathbf{n} + s \mathbf{e}_k) \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{4} \sum_i A_i \psi^\dagger(\mathbf{n} + s \mathbf{e}_k) \gamma_i \psi(\mathbf{n} + s \mathbf{e}_k) \psi^\dagger(\mathbf{n}) \gamma_i \psi(\mathbf{n}) \right)
 \end{aligned}$$

mit

$$A_i = \begin{cases} +1 & \text{für } \gamma_i: [\varrho_1 \sigma_k, \gamma_i]_- = 0 \\ -1 & \text{für } \gamma_i: [\varrho_1 \sigma_k, \gamma_i]_+ = 0. \end{cases}$$

Da sich das äußere H_1 mit jedem der inneren H_1 , also im Fall $H_1 \{H_1^l\} | \varphi_0 \rangle$ l -mal, zu einem Ring $\underline{H_1 H_1}$ zusammenschließen kann, erhalten wir zur Reihe (46) den folgenden Beitrag

$$(49) \quad \sum_{l=1}^{\infty} l a_l P \{ \underline{H_1 H_1} H_1^{l-1} \} | \varphi_0 \rangle.$$

Innerhalb des Klammersymbols läßt sich $\underline{H_1 H_1}$ nach rechts durchschieben, so daß es unmittelbar auf $| \varphi_0 \rangle$ wirkt. Beachtet man die Definition von $| \varphi_0 \rangle$ (s. Gl. (22), (20)), so erkennt man, daß nur die Terme von $\underline{H_1 H_1}$ mit $\gamma_i = 1$ und $\gamma_i = \varrho_1$ nicht aus dem Unterraum herausführen, bilden sie doch $| \varphi_0 \rangle$ bis auf einen Faktor auf sich selbst ab. Die Größe des Faktors ist wie früher bei der Störungsrechnung 2. Ordnung wesentlich durch die Zahl der Paare $(\mathbf{n}, \mathbf{n} + s \mathbf{e}_k)$ bestimmt, über die in $\underline{H_1 H_1}$ zu summieren ist.

Da $\underline{H_1 H_1}$ jetzt innerhalb der geschweiften Klammer steht, unterliegen seine Summen – im Gegensatz zu früher – Summationsbeschränkungen. Diese sind außerdem, wie später (vgl. Ziff. 5) noch näher ausgeführt wird, nicht für alle Produkte gleich, die bei der Ausmultiplikation der Summen der übrigen $(l - 1)$ inneren H_1 entstehen.

Für jedes l existiert jedoch eine ausgezeichnete Beschränkung der Summen von $\underline{H_1 H_1}$ innerhalb der geschweiften Klammer $\{ H_1^{l-1} \underline{H_1 H_1} \}$. Zu ihr gehören wenigstens Z -mal* mehr Summanden des Produktes H_1^{l-1} als zu jeder anderen Summationsbeschränkung von $\underline{H_1 H_1}$. Deshalb ist der Zustand $P \{ H_1^{l-1} \underline{H_1 H_1} \} | \varphi_0 \rangle$

* Die Vernachlässigung ist von derselben Größenordnung, wie die Zahl der in die einzelnen Glieder der Reihe (40) nicht aufgenommenen Zustände.

zumindesten näherungsweise bis auf einen Faktor gleich dem Zustand $\{H_1^{l-1}\} |\varphi_0\rangle$. Bleiben die Summationsbeschränkungen zunächst einmal unberücksichtigt, so erhält man als Faktor genau wie in der Störungsrechnung 2. Ordnung:

$$(50) \quad \gamma = 3Z^4 \frac{1+\bar{3}}{2} = \omega^2 \alpha = -\omega E_2.$$

Damit ergibt sich für die Reihe (49):

$$(51) \quad \alpha \omega^2 \sum_{l=1} l a_l \{H_1^{l-1}\} |\varphi_0\rangle.$$

Aus den Formeln (45), (47) und (51) sowie der Schrödingergleichung (41) gewinnen wir durch Vergleich der Koeffizienten der linear unabhängigen Zustände $\{H_1^l\} |\varphi_0\rangle$ schließlich die Rekursionsformel*:

$$(52) \quad a_{l-1} + \omega(\lambda + l) a_l + \alpha \omega^2(l + 1) a_{l+1} = 0.$$

Das Eigenwertproblem der Schrödingergleichung (41) wird jedoch durch die Rekursionsformel (52) allein nicht vollständig erfaßt. Es fehlen noch die für die Bestimmung der Lösungen wesentlichen Randbedingungen an die Amplituden a_l . Die untere Randbedingung ergibt sich unmittelbar aus dem Potenzreihenansatz (40) für $|\varphi\rangle$:

$$(53) \quad a_{-1} = 0.$$

Nach der Rekursionsformel (52) verschwinden damit alle Amplituden a_l mit negativem l . Die obere Randbedingung ist eine Folge des endlichen Gitterraumes. Bei Z^3 Gitterpunkten gibt es maximal L Paare $(\mathbf{n}, \mathbf{n} + s\mathbf{e}_k)$, deren Argumente alle voneinander verschieden sind. Dabei ist L die größte ganze Zahl, die kleiner oder gleich $Z^3/2$ ist:

$$(54) \quad \frac{Z^3}{2} - 1 < L \leq \frac{Z^3}{2}.$$

* Bei einer Variationsrechnung mit $|\varphi\rangle$ (40) als Testzustand erhält man bis auf den Faktor $(l + 1) \alpha \omega^2$ dieselbe Rekursionsformel. An die Stelle dieses Faktors tritt:

$$\langle \varphi_0 | \{H_1^l\} H_1 \{H_1^{l+1}\} |\varphi_0\rangle \cdot \langle \langle \varphi_0 | \{H_1^l\} \{H_1^l\} |\varphi_0\rangle \rangle^{-1}$$

Infolgedessen verschwinden nach der Definition des Klammersymbols alle Zustände $\{H_1^l\} |\varphi_0\rangle$ für $l > L$. Auch kann die Amplitude a_L nur noch an die Amplitude a_{L-1} koppeln:

$$(55) \quad a_{L-1} + (\lambda + L) \omega a_L = 0.$$

Die unserem Problem entsprechenden Lösungen der Rekursionsformel (52) müssen also nach Gl. (55) der nachstehenden, oberen Randbedingung genügen:

$$(56) \quad a_{L+1} = 0.$$

Wie im Anhang näher ausgeführt wird, folgt aus den beiden Randbedingungen (53) und (56) für die physikalisch allein relevanten, niedrigen Eigenwerte in ausgezeichnete Näherung:

$$(57) \quad \lambda = \alpha - m, \quad m = 0, 1, 2, \dots,$$

also nach Gl. (43), (44) und (50):

$$(58) \quad E_{m\bar{s}} = -4WZ^3 - \frac{Z^4}{4W} \cdot \frac{1 + \bar{s}}{2} + 12Wm$$

mit $\bar{s} = 1, 1 - \frac{2}{Z^3}, 1 - \frac{4}{Z^3}, \dots$

Mit Hilfe des Klammersymbols $\{\}$ lassen sich die zugehörigen Eigenzustände $|m, \bar{s}\rangle$ in geschlossener Form angeben:

$$(59) \quad |m, \bar{s}\rangle = \left\{ \left(1 + \frac{4W}{Z^4} \cdot \left(\frac{2}{1 + \bar{s}} \right) H_1 \right)^m e^{-\frac{H_1}{12W}} \right\} |s(\mathbf{n})\rangle$$

mit

$$(60) \quad \bar{s} = \frac{1}{Z^3} \sum_{\mathbf{n}} s(\mathbf{n}).$$

Die Zustände $|m, \bar{s}\rangle$ sind nach Gl. (60) in bezug auf \bar{s} noch hochgradig entartet.

Die Grundstruktur des Spektrums (58) bildet ein Linienspektrum mit einem Linienabstand von $12W$, d. h. mit demselben Termabstand wie das im Ansatz (40) für $|\varphi\rangle$ herausgegriffene Spektrum von H_0 . Jede Linie stellt im Fall $W = O(\sqrt{Z^3})$ die

untere Bandkante eines Quasikontinuums dar, dessen Bandbreite $\frac{Z^4}{4W} = O(\sqrt{Z^3})$ Z -mal größer ist, als der Linienabstand $12W = O(\sqrt{Z^3})$. Der Termabstand zweier benachbarter Niveaus in jedem der Quasikontinua ist nach (58) $\frac{Z}{4W} = O\left(\frac{1}{\sqrt{Z}}\right)$. Das Energiespektrum (58) besteht also aus einer Fülle sich übereinanderschiebender Quasikontinua, von denen einige in Figur 2 nebeneinandergezeichnet sind

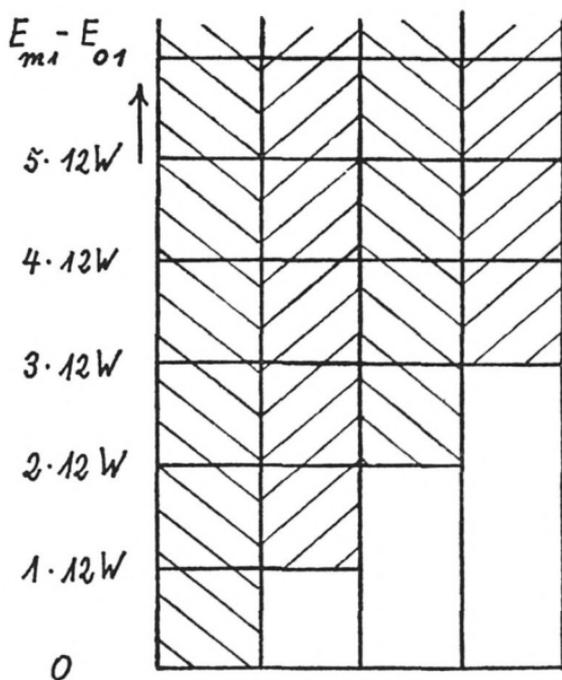


Fig. 2: Energiespektrum globaler Anregungen einer Spinorfeldtheorie vom Heisenberg-Typ im Gitterraum

Bei der Diskussion des Spektrums (58) haben wir zunächst den Fall $W = O(\sqrt{Z^3})$, entsprechend einer endlichen Kopplungskonstante in einer Kontinuumstheorie, ins Auge gefaßt. An Hand der folgenden Tabelle lassen sich die Verhältnisse für andere Größenordnungen der Kopplungskonstanten W sofort überblicken.

Wechselwirkungskonstante	$W \sim$	$\sqrt{Z^3}$	Z	\sqrt{Z}
Linienabstand	${}_{12}W \sim$	$\sqrt{Z^3}$	Z	\sqrt{Z}
Bandbreite	$\frac{Z^4}{4W} \sim$	$\sqrt{Z^6}$	Z^3	$\sqrt{Z^7}$
Niveauabstand innerhalb eines Bandes	$\frac{Z}{4W} \sim$	$\frac{1}{\sqrt{Z}}$	1	\sqrt{Z}

Tabelle: Spektraldaten in Abhängigkeit von der Größenordnung der Wechselwirkungskonstanten W .

Das tiefste Band des Spektrums (58) stimmt exakt mit dem Ergebnis der Störungsrechnung 2. Ordnung überein. Der charakteristische Unterschied gegenüber früher ist jedoch, daß in die Berechnung der Eigenwerte jetzt keine Voraussetzungen mehr über die Norm des Zustands eingehen. Mit der Beschränkung auf den durch die Zustände $\{H_1^i\} | \varphi_0 \rangle$ aufgespannten Unterraum $\{P\}$ haben wir einerseits die Kleinheit der Störung H_1 ausgenutzt, andererseits aber auch der großen Teilchenzahl Rechnung getragen.

5. Die Güte der Grundzustandsapproximation

Vergleichen wir die verschiedenen Näherungen für die Grundzustandsenergie einer Spinorfeldtheorie vom Heisenberg-Typ im Gitterraum, die in Fig. 1 als Funktionen der Kopplungskonstanten W dargestellt sind, so sehen wir, daß die untere Bandkante vom tiefsten Band des Spektrums (58), deren Abhängigkeit von der Kopplungskonstanten die Kurve (E) beschreibt, für alle W tiefer liegt als die anderen uns bekannten Näherungen. Die Energie des Grundzustandes senkt sich jedoch nach dieser Näherung, wie der monotone Anstieg der Kurve (E) für $W \leq \frac{1}{4} \sqrt{Z}$ zeigt, mit verschwindender Kopplungskonstante immer stärker

ab, was in klarem Widerspruch zu der Existenz einer unteren Schranke (Kurve (B) in Fig. 1) für die Grundzustandsenergie des Hamiltonoperators $H = H_B + H_W$ ((1), (2)) steht. Damit stellt sich die Frage, inwieweit die bei der Ableitung des Spektrums (58) gemachten Näherungen, nämlich die Beschränkung auf den Teilraum $\{P\}$ und die Vernachlässigung der Summationsbeschränkungen in der Gleichung

$$(61) \quad P \{H_1^l \underbrace{H_1 H_1}_{\square} \} | \varphi_0 \rangle \cong \gamma \{H_1^l\} | \varphi_0 \rangle$$

gerechtfertigt sind. Da man im Rahmen der Variationsrechnung bei Beschränkung auf einen Teilraum stets eine obere Schranke für die Grundzustandsenergie erhält, ist die Näherung (61) der Grund für den unphysikalischen Abfall der Kurve (E) unterhalb $W = \frac{1}{4} \sqrt{Z}$.

Die Differenzgleichung für die a_l , die man durch Variationsrechnung mit $|\varphi\rangle$ (40) als Testzustand erhält, lautet in Strenge*

$$(62) \quad a_{l-1} + \omega (\lambda + l) a_l + \frac{\langle \varphi_0 | \{H_1^l\} H_1 \{H_1^{l+1}\} | \varphi_0 \rangle}{\langle \varphi_0 | \{H_1^l\} \{H_1^l\} | \varphi_0 \rangle} a_{l+1} = 0.$$

Die Näherung (61) ist äquivalent mit

$$(63) \quad \frac{\langle \varphi_0 | \{H_1^l\} H_1 \{H_1^{l+1}\} | \varphi_0 \rangle}{\langle \varphi_0 | \{H_1^l\} \{H_1^l\} | \varphi_0 \rangle} \cong (l + 1) \gamma.$$

Berücksichtigen wir bei der Berechnung der Erwartungswerte des Quotienten

$$(64) \quad \frac{\langle \varphi_0 | \{H_1^l\} H_1 \{H_1^{l+1}\} | \varphi_0 \rangle}{\langle \varphi_0 | \{H_1^l\} \{H_1^l\} | \varphi_0 \rangle}$$

nur Zweieringe $\underbrace{H_1 H_1}_{\square}$, vernachlässigen** also Ringe aus $2l$ Faktoren H_1 ($l > 1$) etwa von der Gestalt*** $\underbrace{H_1 H_1 \dots H_1}_{\square \dots \square}$, so läßt sich der Quotient (64) auf die folgende Form bringen:

* Vgl. S. 122 Anmerkung *.

** Soweit wir bis jetzt überblicken können, beeinflussen die längeren Ringe die Energie der Zustände nicht (vgl. S. 134).

*** Solche Ringe lassen sich nur mit H_1 aus verschiedenen, geschweiften Klammern bilden.

$$(64a) \quad (l + 1) \frac{\langle \varphi_0 | \{(\underline{H}_1 \underline{H}_1)^{l+1}\} | \varphi_0 \rangle}{\langle \varphi_0 | \{(\underline{H}_1 \underline{H}_1)^l\} | \varphi_0 \rangle}.$$

Um die Summationsbeschränkungen besser zu überblicken, schreiben wir die Summen des Zählers explizit an und charakterisieren die Summanden durch die Angabe ihres Argumentenpaares $(\mathbf{n}_i, \mathbf{n}_i + s_i \mathbf{e}_{k_i})$:

$$(65) \quad \langle \varphi_0 | \{(\underline{H}_1 \underline{H}_1)^{l+1}\} | \varphi_0 \rangle \\ = \langle \varphi_0 | \left(\sum_{\mathbf{n}_1, s_1, k_1}^{(0)} (\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_1 + s_1 \mathbf{e}_{k_1}) \dots \sum_{\mathbf{n}_i, s_i, k_i}^{(i-1)} (\mathbf{n}_i, \mathbf{n}_i + s_i \mathbf{e}_{k_i}) \dots \right) | \varphi_0 \rangle.$$

Der obere Index $(i - 1)$ am Summenzeichen der i -ten Summe soll andeuten, daß vor dieser $(i - 1)$ Paare $(\mathbf{n}_j, \mathbf{n}_j + s_j \mathbf{e}_{k_j})$ stehen und die Summe nur über solche Paare $(\mathbf{n}_i, \mathbf{n}_i + s_i \mathbf{e}_{k_i})$ geht, deren beide Argumente \mathbf{n}_i und $\mathbf{n}_i + s_i \mathbf{e}_{k_i}$ von allen \mathbf{n}_j und $\mathbf{n}_j + s_j \mathbf{e}_{k_j}$ ($j = 1, 2, \dots, (i - 1)$) verschieden sind. In der 2-ten Summe müssen dann gerade 22 Paare ausgelassen werden, nämlich die Paare $(s_2 = \pm 1, k_2 = 1, 2, 3)$:

$$(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_1 + s_2 \mathbf{e}_{k_2}), (\mathbf{n}_1 + s_1 \mathbf{e}_{k_1}, \mathbf{n}_1 + s_1 \mathbf{e}_{k_1} + s_2 \mathbf{e}_{k_2}), (\mathbf{n}_1 - s_2 \mathbf{e}_{k_2}, \mathbf{n}_1) \\ \text{mit Ausnahme des Falles } s_2 = -s_1, k_2 = k_1 \text{ und } (\mathbf{n}_1 + s_1 \mathbf{e}_{k_1} - \\ - s_2 \mathbf{e}_{k_2}, \mathbf{n}_1 + s_1 \mathbf{e}_{k_1}) \text{ mit Ausnahme des Falles } s_2 = s_1, k_2 = k_1.$$

Damit läßt sich die Zahl der in der i -ten Summe auszulassenden Paare für den Fall sofort angeben, daß unter den vor der i -ten Summe stehenden Paaren $(\mathbf{n}_j, \mathbf{n}_j + s_j \mathbf{e}_{k_j})$ nur solche vorkommen, bei denen jedes der Argumente eines Paares von allen Argumenten der anderen Paare weiter als 2 Gitterabstände entfernt ist. Für jedes der $(i - 1)$ Paare müssen nämlich dann in der i -ten Summe 22 Paare ausgelassen werden, also insgesamt $(i - 1)$ 22 Paare. Bei allen übrigen Konfigurationen der Argumente der $(i - 1)$ Paare $(\mathbf{n}_j, \mathbf{n}_j + s_j \mathbf{e}_{k_j})$, bei denen sich stets einige Argumente verschiedener Paare zumindest bis auf 2 Gitterabstände nahekomen, ist die Zahl der Ausfälle in der i -ten Summe etwas kleiner. Die Zahl dieser Konfigurationen ist jedoch, solange die Werte des Index i die Größenordnung Z nicht überschreiten, wenigstens Z -mal kleiner als die Zahl der Konfigurationen, bei denen der Ab-

stand der Argumente verschiedener Paare $(\mathbf{n}_j, \mathbf{n}_j + s_j \mathbf{e}_{kj})$ stets größer als der doppelte Gitterabstand ist.

Berücksichtigt man, daß nur die Terme von $\underline{H_1 H_1}$ (48b) mit $\gamma_i = 1$ und $\gamma_i = \varrho_1$, die $|\varphi_0\rangle$ bis auf einen Faktor auf sich selbst abbilden, zum Erwartungswert (65) beitragen und schätzt man zudem die Zahl der Summanden der $(l+1)$ -ten Summe in (65) einheitlich durch $(6Z^3 - 22l)$ ab,* so kann man den Erwartungswert (65) in folgender Weise darstellen:

$$(66) \quad \begin{aligned} & \langle \varphi_0 | \{(\underline{H_1 H_1})^{l+1}\} | \varphi_0 \rangle \\ &= 3Z^4 \left(1 - \frac{11}{3Z^3} l\right) \frac{1+\bar{3}}{2} \langle \varphi_0 | \{(\underline{H_1 H_1})^l\} | \varphi_0 \rangle. \end{aligned}$$

Mit (66) und (64a) erhalten wir für den Quotienten (64):

$$(67) \quad \begin{aligned} \frac{\langle \varphi_0 | \{H_1^l\} H_1 \{H_1^{l+1}\} | \varphi_0 \rangle}{\langle \varphi_0 | \{H_1^l\} \{H_1^l\} | \varphi_0 \rangle} &\simeq (l+1) 3Z^4 \left(1 - \frac{11}{3Z^3} l\right) \frac{1+\bar{3}}{2} \\ &= (l+1) \gamma \left(1 - \frac{11}{3Z^3} l\right). \end{aligned}$$

Die Differenzgleichung (62) geht in dieser Näherung über in:

$$(68) \quad a_{l-1} + \omega(\lambda + l) a_l + (l+1) \alpha \omega^2 \left(1 - \frac{11}{3Z^3} l\right) a_{l+1} = 0.$$

Die Lösung dieser Differenzgleichung mit der Methode der erzeugenden Funktionen ist im Anhang näher ausgeführt. Als Energiespektrum erhält man:

$$(69) \quad \begin{aligned} E_{m\bar{x}} &= -\frac{13}{22} 4WZ^3 - \frac{9}{22} 4WZ^3 \sqrt{1 + 2 \frac{22}{9} \cdot \frac{Z}{(4W)^2} \cdot \frac{1+\bar{3}}{2}} \\ &+ m \cdot 12W \sqrt{1 + 2 \frac{22}{9} \cdot \frac{Z}{(4W)^2} \cdot \frac{1+\bar{3}}{2}}. \end{aligned}$$

Die untere Bandkante vom tiefsten Band dieses Spektrums wird als Funktion der Kopplungskonstanten W von der Kurve (D) in Figur 1 beschrieben. Sie liegt jetzt für alle Kopplungskonstanten über der unteren Schranke für die Grundzustandsenergie des

* Die Zahl der Summanden wird hier nach unten abgeschätzt, während die frühere Näherung (63) eine Abschätzung nach oben darstellt.

Hamiltonoperators $H = H_B + H_W$ (Gl. (1), (2)) und stellt wohl eine obere Schranke für diese dar. Im Fall $W = O(\sqrt{Z^3})$ stimmt das Spektrum (69) mit dem Spektrum (58), bei dessen Berechnung die Summationsbeschränkungen an einer Stelle vernachlässigt wurden (vgl. S. 121 f.), bis auf Terme von der Ordnung $\frac{1}{\sqrt{Z}}$ überein. Die Näherung (63) bzw. (61) ist also für $W = O(\sqrt{Z^3})$ schon sehr gut, während sie für $W = O(\sqrt{Z})$ unzureichend wird. Der Grund für diesen Unterschied ist, daß bei der Bestimmung der Grundzustandsenergie durch Variationsrechnung im Fall $W = O(\sqrt{Z^3})$ die Glieder des Testansatzes $|\varphi\rangle$ (40) mit $l = O(Z)$ den wesentlichen Beitrag liefern, während für $W = O(\sqrt{Z})$ die Glieder mit $l = O(Z^3)$ die entscheidende Rolle spielen. Damit ist auch klar, daß eine weitere Verbesserung der Näherung (67) für $W = O(\sqrt{Z^3})$ höchstens noch Energiekorrekturen von der Ordnung $\frac{1}{\sqrt{Z}}$ bringen würde.

Die Diskussion über die Güte der Grundzustandsapproximation wollen wir schließen, indem wir noch kurz auf die Frage eingehen, welche Korrekturen zur Grundzustandsenergie zu erwarten sind, wenn wir uns von der Beschränkung auf den Unterraum $\{P\}$ freimachen. Eine systematische Untersuchung dieser Frage ist noch nicht abgeschlossen, doch läßt sich aufgrund der vorliegenden Teilergebnisse* sagen, daß im Fall $W = O(\sqrt{Z^3})$ höchstens Korrekturen von der Ordnung \sqrt{Z} auftreten. Zugleich lassen die Rechnungen einen Weg erkennen, wie man zumindest prinzipiell die Grundzustandsenergie im Fall $W = O(\sqrt{Z^3})$ bis auf Korrekturen von der Ordnung $\frac{1}{\sqrt{Z}}$ exakt bestimmen kann. Abgesehen von diesen Korrekturen zur Grundzustandsenergie,

* So wurde die Schrödingergleichung (41) statt im Unterraum $\{P\}$ in dem von den Zuständen $\{H_1^n Q^l R^m\} |\varphi_0\rangle$ ($l, n, m = 0, 1, \dots$) aufgespannten Unterraum gelöst. Dabei bedeuten:

$$Q := \sum_{\mathbf{n}, s, k} I_3(\mathbf{n}) I_3(\mathbf{n} + s\mathbf{e}_k); I_3(\mathbf{n}) := \frac{1}{2} \psi^\dagger(\mathbf{n}) \varrho_3 \psi(\mathbf{n})$$

$$R := \frac{\sqrt{Z}}{2i} \sum_{\mathbf{n}, s, k} (-s) \psi^\dagger(\mathbf{n} + s\mathbf{e}_k) \varrho_1 \sigma_k \psi(\mathbf{n}) I_3(\mathbf{n}) I_3(\mathbf{n} + s\mathbf{e}_k)$$

die für $W = O(\sqrt{Z})$ von der Größenordnung der Grundzustandsenergie selbst sein können,* hat die Erweiterung des Zustandsraumes $\{P\}$ vor allem in Hinblick auf die Bestimmung von Anregungen über dem Grundzustand, die Teilchen beschreiben, große Bedeutung. Bei ihrer Berechnung wird zumindestens eine Auswahl der im Ansatz (40) vernachlässigten Zustände eine entscheidende Rolle spielen.

Rückblick

Das Grundzustandsproblem bei einer Spinorfeldtheorie vom Heisenberg-Typ im Gitterraum läßt sich mit der umgekehrten Störungsrechnung für alle Kopplungskonstanten W größer $\frac{1}{4}\sqrt{Z}$ prinzipiell lösen. Für $W \geq 0.4\sqrt{Z}$ ist die in dieser Arbeit gerechnete Approximation quantitativ besser als andere Näherungen (vgl. Fig. 1). Sie erfaßt die dominanten Beiträge zur Grundzustandsenergie. Überraschenderweise erhält man im Fall $W = O(\sqrt{Z^3})$ schon bei umgekehrter Störungsrechnung 2. Ordnung den wesentlichen Beitrag. Der Grundzustand des Systems ist zweifach entartet. Durch eine globale Touschek-Transformation lassen sich die beiden Zustände ineinander überführen.

Neben der Grundzustandsenergie erhalten wir noch ein kompliziertes Spektrum globaler Anregungen, das für $W = O(\sqrt{Z^3})$, d. h. für endliche Kopplungskonstante bei Kontinuumstheorien, teilweise quasikontinuierlich ist. In dieses Spektrum sind vermutlich die Partikelanregungen eingelagert. Methodisch beruhen diese interessanten Ergebnisse in erster Linie darauf, daß sich im Gitterraum bei streng lokaler Wechselwirkung im Rahmen der umgekehrten Störungsrechnung wesentliche Strukturen leichter erkennen und damit auch besser berücksichtigen lassen.

Die Autoren danken den Herren V. Ernst, H. Frank, F. Wahl, E. Weidemann und H.-J. Winter für Anregungen und Diskussionen.

* Im Fall $W = O(\sqrt{Z})$ rühren, worauf oben schon hingewiesen wurde, die wesentlichen Beiträge von den Gliedern des Testansatzes $|\varphi\rangle$ (40) mit $l = O(Z^3)$ her. Bei dieser Ordnung von l sind die in den Ansatz $|\varphi\rangle$ aufgenommenen Zustände den vernachlässigten Zuständen zahlenmäßig nicht mehr überlegen.

Anhang: Zur Bestimmung der Eigenwerte

Die Rekursionsformel

$$(A 1) \quad a_{n-1} + \omega(\lambda + n) a_n + \alpha\omega^2(\bar{n} + 1) a_{n+1} = 0$$

kann man mit der Methode der erzeugenden Funktionen lösen.
Der Ansatz*

$$(A 2) \quad f(t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n t^n$$

führt zu der Differentialgleichung

$$(A 3) \quad (t + \lambda\omega) f(t) + \omega(t + \alpha\omega) f'(t) = 0.$$

Aus

$$\frac{f'(t)}{f(t)} = -\frac{t + \lambda\omega}{\omega(t + \alpha\omega)}$$

folgt unmittelbar für $f(0) = 1$:

$$\ln f(t) = -\frac{1}{\omega} t + (\alpha - \lambda) \ln\left(\frac{1}{\alpha\omega} t + 1\right)$$

also

$$(A 4) \quad f(t) = \left(\frac{1}{\alpha\omega} t + 1\right)^{\alpha - \lambda} e^{-\frac{1}{\omega} t}.$$

Der Koeffizient a_n von t^n in (A 2) läßt sich nun auf Grund von (A 4) sofort angeben:

$$(A 5) \quad a_n = \sum_{\substack{\mu, \nu=0 \\ \mu + \nu = n}}^n \binom{\alpha - \lambda}{\mu} \left(\frac{1}{\alpha\omega}\right)^\mu \frac{1}{\nu!} \left(-\frac{1}{\omega}\right)^\nu \\ = \left(\frac{1}{\alpha\omega}\right)^n \sum_{\nu=0}^n \binom{\bar{\lambda}}{n - \nu} \frac{(-\alpha)^\nu}{\nu!}$$

mit

$$(A 6) \quad \bar{\lambda} = \alpha - \lambda.$$

* Hier ist die Bedingung $a_{-1} = 0$ schon berücksichtigt.

Berücksichtigen wir die obere Randbedingung (56) für die Amplituden

$$(A 7) \quad a_N = 0, N = L + 1$$

so erhalten wir aus (A 5) für die Eigenwerte $\bar{\lambda}$ die Säkulargleichung:

$$(A 8) \quad \frac{1}{\alpha^N} \sum_{\nu=0}^N \binom{N}{N-\nu} \frac{(-\alpha)^\nu}{\nu!} = 0.$$

Das Ergebnis wird übersichtlicher, wenn wir beginnend mit $\nu = N$ die ersten Summenglieder anschreiben:

$$(A 9) \quad \frac{1}{N!} - \frac{\bar{\lambda} \left(\frac{1}{\alpha}\right)}{1!(N-1)!} + \frac{\bar{\lambda}(\bar{\lambda}-1) \left(\frac{1}{\alpha}\right)^2}{2!(N-2)!} - \frac{\bar{\lambda}(\bar{\lambda}-1)(\bar{\lambda}-2) \left(\frac{1}{\alpha}\right)^3}{3!(N-3)!} + \dots = 0.$$

Zunächst folgt unmittelbar, daß die Summe für $\bar{\lambda} \leq 0$ nur positive Summanden besitzt. Es gibt also nur positive Eigenwerte $\bar{\lambda}$, d. h. das Spektrum ist nach unten begrenzt. Offensichtlich hat die Gleichung (A 9) eine Nullstelle im Intervall $(0, 1)$, die sehr nahe bei 0 liegt, also $\bar{\lambda} \ll 1$. Wir können deshalb die Abweichungen von 0 in $\bar{\lambda} - 1$, $\bar{\lambda} - 2$, usw. vernachlässigen und für (A 9) schreiben:

$$(A 10) \quad \frac{1}{N!} - \bar{\lambda} \left(\frac{1}{(N-1)!} \cdot \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{2 \cdot (N-2)!} \left(\frac{1}{\alpha}\right)^2 + \dots + \frac{1}{N} \left(\frac{1}{\alpha}\right)^N \right) = 0.$$

Aus Gl. (A 10) folgt sofort:

$$(A 11) \quad \frac{1}{\bar{\lambda}} = N! \left(\frac{1}{(N-1)!} \cdot \frac{1}{\alpha} + \dots + \frac{1}{N} \left(\frac{1}{\alpha}\right)^N \right).$$

Schätzen wir nun $\frac{1}{\bar{\lambda}}$ mit Hilfe der Stirlingschen Formel nach unten ab:

$$(A 12) \quad \frac{1}{\bar{\lambda}} > \frac{1}{\sqrt{N^3}} \left(\frac{N}{e\alpha}\right)^N,$$

so genügt $\bar{\lambda}$ selbst der Ungleichung

$$(A 13) \quad \bar{\lambda} < \sqrt{N^3} \left(\frac{e\alpha}{N} \right)^N.$$

Für die Größenordnung von $\bar{\lambda}$ erhalten wir im Fall* $W \sim O(\sqrt{Z^3})$ aus Gl. (A 13) die Abschätzung:**

$$(A 14) \quad \bar{\lambda} < O\left(\frac{Z^3 \sqrt{Z^3}}{Z^2 Z^3}\right),$$

d. h. $\bar{\lambda}$ ist praktisch null.

Der nächste Eigenwert liegt dicht bei $\bar{\lambda} = 1$; es ist $\bar{\lambda} > 1$ und $\bar{\lambda} - 1 \ll 1$.

In diesem Fall folgt aus Gleichung (A 9):

$$(A 15) \quad \frac{1}{\bar{\lambda} - 1} = \frac{N!}{\alpha - 1} \left(\frac{1}{1 \cdot 2 \cdot (N-2)!} \left(\frac{1}{\alpha}\right)^2 + \dots + \frac{1}{(N-1)N} \left(\frac{1}{\alpha}\right)^N \right) - \frac{\frac{N}{\alpha}}{\alpha - 1}.$$

Schätzt man $\frac{1}{\bar{\lambda} - 1}$ wie oben (s. Gl. (A 12)) ab, so erhält man im Fall $W = O(\sqrt{Z^3})$ für $\bar{\lambda} - 1$:

$$(A 16) \quad 0 < \bar{\lambda} - 1 < O\left(\frac{\sqrt{Z^{15}}}{Z^2 Z^3}\right),$$

$\bar{\lambda}$ ist also praktisch gleich eins. Das Verfahren läßt sich offensichtlich fortsetzen. Als Spektrum bekommt man in äußerst guter Näherung:

$$(A 17) \quad \bar{\lambda} = 0, 1, 2, \dots.$$

Erst bei sehr hohen Eigenwerten, die ohne physikalisches Interesse sind, muß mit merklichen Abweichungen der Eigenwerte von der Ganzzahligkeit gerechnet werden.

* Im Fall $W = O(Z)$ ist die grobe Abschätzung (A 12) noch extrem gut, doch genügt sie im Fall $W = O(\sqrt{Z})$ nicht mehr. Die Abschätzung (A 12) läßt sich aber für diesen Fall ohne große Mühe wesentlich verbessern.

** $W = O(\sqrt{Z^3})$: $\alpha = O(Z)$ (vgl. Gl. (50)), $\frac{N}{\alpha} = O(Z^2)$ (vgl. Gl. (A 7), (54)).

Streng ganzzahlige, nicht negative Werte für $\bar{\lambda}$ erhält man auch ohne die obere Randbedingung (A 7), wenn man fordert, daß die erzeugende Funktion (A 4) in der ganzen t -Ebene regulär sei. Die Regularität der erzeugenden Funktion legt das asymptotische Verhalten der Amplituden a_n eindeutig fest:

$$(A 18) \quad -\frac{a_{n+1}}{a_n} \sim \frac{1}{\omega(n+1)}, \quad n \rightarrow \infty.$$

Dasselbe Verhalten weisen die Amplituden auf, wenn man vom endlichen Gitterraum herkommend den Grenzübergang $Z \rightarrow \infty$ betrachtet.

Bei der Untersuchung des Einflusses vernachlässigter Glieder* tritt an die Stelle von Gl. (A 1) die modifizierte Rekursionsformel

$$(A 19) \quad a'_{n-1} + (\varepsilon + n\omega) a'_n + \gamma(n+1) f_{n+1} a'_{n+1} = O.$$

Wir wollen zeigen, daß sie zum selben Eigenwertspektrum führt wie Gl. (A 1), wenn gilt:

$$(A 20) \quad f_n \geq 1, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} f_n = 1, \quad f_1 = 1.$$

Dazu berechnen wir zunächst die Wurzeln der charakteristischen Gleichung (nach Perron) [12]:

$$\gamma(n+1) f_{n+1} x_n^2 + (\varepsilon + n\omega) x_n + 1 = 0$$

im Limes $n \rightarrow \infty$. Zunächst folgt:

$$x_n = \frac{-(\varepsilon + n\omega) \pm \sqrt{(\varepsilon + n\omega)^2 - 4\gamma(n+1)f_{n+1}}}{2\gamma(n+1)f_{n+1}}.$$

Daraus erhält man nach Gl. (A 20) im Limes $n \rightarrow \infty$ die beiden Lösungen

$$(A 21) \quad x' = -\frac{\omega}{\gamma}, \quad x'' = -\frac{1}{n\omega}.$$

Nur die letzte ist im Einklang mit der Anfangsbedingung $\alpha_{-1} = O$. Sie führt zu einer Potenzreihe, deren Glieder wie in Gl. (A 4) in

$$\frac{1}{n!} \left(-\frac{t}{\omega} \right)^n$$

* Vgl. S. 126, Anm **.

übergehen. (Man beachte, daß der Faktor vor der Exponentialfunktion gleich $\omega^2 \left(\alpha - \left(-\frac{t}{\omega} \right)^n \right)$ ist.) Danach genügt es, die Koeffizienten a'_n aus Gl. (A 19) mit a_n aus Gl. (A 1) zu vergleichen.

Zu diesem Ende betrachten wir die Verhältnisse

$$(A 22) \quad -\frac{a'_{n+1}}{a'_n} = \xi'_n > 0, \quad -\frac{a_{n+1}}{a_n} = \xi_n > 0.$$

Dafür erhält man aus Gl. (A 19)

$$(A 23) \quad \xi'_n = \frac{\varepsilon + n\omega - \frac{1}{\xi'_{n-1}}}{\gamma(n+1)f_{n+1}}.$$

Für ξ_n gelten die entsprechenden Gleichungen mit $f_n = 1$. Aus $a_{-1} = 0$ folgt nach Gln. (A 1), (A 19) und (A 20):

$$\xi'_0 = \xi_0 = \frac{\varepsilon}{\gamma}.$$

Danach folgt aus Gl. (A 23) und (A 20):

$$\xi'_1 = \frac{\xi_1}{f_2} \leq \xi_1.$$

Beim nächsten Schritt $n = 2$ wird nicht nur der Nenner vergrößert, sondern auch der Zähler verkleinert, wenn er, weil $f_2 = 1$ nicht ausgeschlossen ist, nicht zufällig konstant bleibt. In jedem Fall ist $\xi'_2 \leq \xi_2$. Dasselbe gilt für alle folgenden Glieder

$$\xi'_n \leq \xi_n.$$

Die Reihe mit a_n ist also eine Majorante zu der mit a'_n . Damit konvergiert diese in der ganzen t -Ebene, wenn jene es tut, also für

$$(A 25) \quad \varepsilon = \frac{\gamma}{\omega} - n\omega.$$

Das Eigenwertspektrum bleibt daher von der Störung unberührt. Natürlich ändert sich die Potenzreihe und mit ihr der Zustandsvektor.

Die Majorisierung der Koeffizienten a'_n ist von der Annahme $\lim_{n \rightarrow \infty} f_n = 1$ unabhängig. Es könnte darum der Eindruck entstehen, daß Gl. (A 25) noch allgemeiner gilt, z. B. für $f_n = 1 + \beta n$. Doch ändern sich in diesem Fall die charakteristischen Wurzeln.

Immerhin ist es auch in solchen Fällen möglich, die Eigenwerte zu bestimmen, ohne auf die Lösung der Differentialgleichung für die erzeugende Funktion einzugehen, die in obigem Beispiel noch möglich ist, in allgemeineren Fällen aber nicht mehr.

Wir untersuchen noch das obige Beispiel mit der Methode der erzeugenden Funktionen, betrachten also die neue Rekursionsformel (vgl. Gl. (68)):

$$(A\ 26) \quad a_{n-1} + (\varepsilon + n\omega) a_n + (n+1)\gamma(1 + \beta n)a_{n-1} = 0.$$

Darin kann β positiv oder negativ sein. Die übrigen Konstanten sind positiv. Mit

$$(A\ 27) \quad f(t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n t^n$$

folgt daraus

$$(A\ 28) \quad tf + \varepsilon f + \omega tf' + \gamma f + \beta \gamma t f'' = 0.$$

Nach Kamke [13] 2.273 (A 9) folgt daraus mit

$$(A\ 29) \quad \varepsilon = \lambda\omega, \gamma = \alpha\omega^2$$

die Funktion

$$f = t^{-\frac{1}{2\beta}} e^{-\frac{\omega t}{2\gamma\beta}} y \left(\frac{\varepsilon - \frac{\omega}{2\beta}}{\sqrt{\omega^2 - 4\beta\gamma}}, \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\beta} - 1 \right), \frac{t}{\beta\gamma} \sqrt{\omega^2 - 4\beta\gamma} \right).$$

Aus Gl. (2) ebenda erhält man

$$f = e^{-\frac{t}{2\gamma\beta}(\omega + \sqrt{\omega^2 - 4\gamma\beta})}$$

$${}_1F_1 \left(\frac{1}{2\beta} - \frac{\varepsilon - \frac{\omega}{2\beta}}{\sqrt{\omega^2 - 4\beta\gamma}}, \frac{1}{\beta}, \frac{t}{\beta\gamma} \sqrt{\omega^2 - 4\beta\gamma} \right)$$

oder nach Magnus-Oberhettinger [14] p. 262

$$(A\ 30) \quad f = e^{-\frac{t}{2\gamma\beta}(\omega + \sqrt{\omega^2 - 4\gamma\beta})}$$

$${}_1F_1 \left(\frac{1}{2\beta} + \frac{\varepsilon - \frac{\omega}{2\beta}}{\sqrt{\omega^2 - 4\beta\gamma}}, \frac{1}{\beta}, -\frac{t}{\beta\gamma} \sqrt{\omega^2 - 4\beta\gamma} \right).$$

Dieser Ausdruck ist in der ganzen t -Ebene regulär, wenn ${}_1F_1$ ein Polynom ist; also für

$$\frac{1}{2\beta} + \frac{\varepsilon - \frac{\omega}{2\beta}}{\sqrt{\omega^2 - 4\beta\gamma}} = -n, n = 0, 1, 2, \dots$$

Daraus folgt:

$$(A 31) \quad \varepsilon = \frac{\omega}{2\beta} - \left(n + \frac{1}{2\beta}\right) \sqrt{\omega^2 - 4\beta\gamma}.$$

Falls $4\beta\gamma \ll \omega^2$ ist, ergibt sich schließlich

$$(A 32) \quad \varepsilon = \frac{\gamma}{\omega} - n\omega \left(1 - \frac{2\beta\gamma}{\omega^2}\right).$$

Der Grundzustand bleibt also unverändert. Doch verschiebt sich der Bandabstand um

$$(A 33) \quad \Delta \varepsilon = \frac{2\beta\gamma}{\omega},$$

was in der $\sqrt{Z^3}$ -Theorie von der Größenordnung $1/\sqrt{Z}$ ist und im Limes verschwindet.

Literaturverzeichnis

- [1] E. G. Weidemann u. F. Bopp, Z. Physik **204**, 311 (1967).
- [2] W. Heisenberg, Einführung in die einheitliche Feldtheorie der Elementarteilchen, Stuttgart, Hirzel 1967.
- [3] F. Bopp, Sitz.-Ber. Bayer. Akad. Wiss., Math.-Naturw. Kl. **13** (1967).
- [4] H.-P. Dürr, Z. Naturforsch. **16a**, 327 (1961).
- [5] H. Ezawa, Comm. math. Phys. **8**, 261 (1968); **9**, 38 (1968).
L. I. Schiff, Phys. Rev. **92**, 766 (1953).
G. Wentzel, Helv. Phys. Acta **13**, 269 (1940).
- [6] Nach F. Sauter, persönliche Mitteilung aus dem gleichen Jahr.
- [7] Persönliche Mitteilung.
- [8] E. G. Weidemann, Z. Naturforsch. **24a**, 499 (1969).
Hier finden sich auch weitere Literaturangaben zur Hartree-Fock-Approximation bei Spinorfeldtheorien.
- [9] Persönliche Mitteilung
- [10] H. J. W. Müller, Z. Naturforsch. **25a**, 1017 (1970).

- [11] M. Löwer, Dissertation 1970, Universität München.
- [12] O. Perron, Math. Ann. 84, 1 (1921).
H. Meschkowski, Differenzgleichungen, Göttingen, Vandenhoeck & Ruprecht 1959.
- [13] E. Kamke, Differentialgleichungen. Lösungsmethoden und Lösungen. Leipzig, Akad. Verlagsges. 1942.
- [14] W. Magnus u. F. Oberhettinger, Formeln und Sätze für die speziellen Funktionen der mathematischen Physik, Berlin, Göttingen, Springer-Verlag (1948).