Zur stationären Streutheorie mit gebundenen Zuständen

Von W. Brenig

Aus dem Max-Planck-Institut für Physik, Göttingen

(Z. Naturforschg. **13 a**, 359—363 [1958]; eingegangen am 11. März 1958)

Die im stationären Streuformalismus vorkommenden Matrixelemente mit Zuständen aus einem kontinuierlichen Energiespektrum ε sind im allgemeinen singuläre Funktionen von ε. Beim Vorhandensein gebundener Zustände treten die Singularitäten oft nicht explizit in Erscheinung. Es wird an einigen Beispielen gezeigt, welche Fehler man auf Grund derartiger verborgener Singularitäten leicht machen kann, und welche Vorsichtsmaßregeln man beachten muß, um diese Fehler zu vermeiden.

1. Beim Auftreten gebundener Zustände in Streuproblemen ergeben sich einige Gesichtspunkte, welche sonst keine oder nur eine unwesentliche Rolle spielen. (Wir denken dabei nicht an den trivialen Fall von diskreten stationären Zuständen bei der Bewegung eines Teilchens in einem festen Potential, sondern an solche Fälle, bei denen gebundene Zustände bei Reaktionen gebildet oder „ionisiert" werden können.) Um ein Beispiel vor Augen zu haben, betrachten wir folgendes einfache Modell, an dem man viele wesentliche Züge einer allgemeinen Reaktion studieren kann: Ein Teilchen habe mit einem festen Streuzentrum eine Wechselwirkung mit dem Potential v_1, ein weiteres Teilchen mit dem ersten die Wechselwirkung v_{12}. Der Einfachheit halber sei angenommen, daß v_1 nur einen, v_{12} keinen gebundenen Zustand enthält, und daß das zweite Teilchen mit dem Streuzentrum keine Wechselwirkung habe. Der gebundene Zustand $|b\rangle$ sei eine Lösung der Gl. (1):

$$(H_1+v_1)|b\rangle = b\,|b\rangle, \tag{1}$$

und die Zustände des Gesamtsystems mit der Energie ε seien Lösungen von

$$\begin{aligned}(H_1+H_2+v_1+v_{12})|\varepsilon\rangle = (H_0+v)|\varepsilon\rangle = H|\varepsilon\rangle\\ = \varepsilon\,|\varepsilon\rangle.\end{aligned} \tag{2}$$

Durch (2) ist jedoch $|\varepsilon\rangle$ noch nicht festgelegt. Dies geschieht erst durch geeignete Angaben über das asymptotische Verhalten der Zustände. Dazu kann man z. B. folgendermaßen vorgehen: Man nehme die Impulsfunktionen $|k_1\rangle$ und $|k_2\rangle$ der beiden Teilchen und bilde damit $|k\rangle = |k_1\rangle|k_2\rangle$ und $|q\rangle = |b\rangle|k_2\rangle$. Diese Zustände genügen den Gln. (3):

$$\begin{aligned} H_0|k\rangle &= \varepsilon\,|k\rangle, \quad \varepsilon=\varepsilon_1+\varepsilon_2,\\ (H_0+b_1)|q\rangle &= \varepsilon\,|q\rangle, \quad \varepsilon=b+\varepsilon_2. \end{aligned} \tag{3}$$

Wir beschränken uns nun darauf, ohne Beweis[1] folgendes festzustellen: Die Grenzwerte

$$|k\pm\rangle = \lim_{\eta\to 0}\frac{\pm i\eta}{H-\varepsilon\pm i\eta}|k\rangle \tag{4 a}$$

$$|q\pm\rangle = \lim_{\eta\to 0}\frac{\pm i\eta}{H-\varepsilon\pm i\eta}|q\rangle \tag{4 b}$$

$$\eta>0,$$

definieren zwei vollständige Orthonormalsysteme $\{|k+\rangle, |q+\rangle\}$ und $\{|k-\rangle, |q-\rangle\}$ von Eigenzuständen von H, d. h.

$$\langle k\pm|k'\pm\rangle = \delta_{kk'}\,; \quad \langle k\pm|q\pm\rangle = 0\,; \quad \langle q\pm|q'\pm\rangle = \delta_{k_2k_2'}, \tag{5 a}$$

$$\begin{aligned}\int |k\pm\rangle\langle k\pm|\,dk + \int |q\pm\rangle\langle q\pm|\,dk_2\\ = \int |k\rangle\langle k|\,dk = 1.\end{aligned} \tag{5 b}$$

Zu den Grenzwerten (4) ist folgendes zu bemerken: Der Operator $i\eta/(H-\varepsilon+i\eta)$ konvergiert gegen Null, d. h. (unter anderem): Alle Skalarprodukte $\langle\psi|i\eta/(H-\varepsilon+i\eta)|\varphi\rangle$ mit normierbaren Vektoren ψ, φ streben für $\eta\to 0$ gegen Null. Dies gilt jedoch im allgemeinen nicht mehr, wenn φ durch einen nichtnormierbaren Zustand ersetzt wird, wie dies in (4) geschehen ist[2]. (4) soll zunächst bedeuten, daß für jeden normierbaren Vektor ψ gilt

$$\lim_{\eta\to 0}\langle\psi\left|\frac{i\eta}{H-\varepsilon+i\eta}\right|k\rangle = \langle\psi|k+\rangle \quad \text{etc.} \tag{6}$$

[1] Daß $(H-\varepsilon)|k\pm\rangle = (H-\varepsilon)|q\pm\rangle = 0$ ist, folgt direkt aus (4) durch Multiplikation mit $(H-\varepsilon+i\eta)$ und $\eta>0$. Für die Orthogonalitätsrelationen vgl. den Anhang. Es läßt sich zeigen (P. A. M. Dirac, Quantum Mechanics, 2. Edition Oxford 1935, S. 197, W. Heisenberg, Z. Phys. **120**, 513 [1943]), daß $|k-\rangle$ nur auslaufende, $|k+\rangle$ nur einlaufende Kugelwellen enthält.

[2] An einem einfachen Spezialfall sieht man leicht, daß $i\eta/(H-\varepsilon+i\eta)|k\rangle$ keineswegs gegen Null strebt, nämlich für $v=0$, d. h. $H=H_0$. In diesem Fall ist $H|k\rangle = \varepsilon|k\rangle$, also $i\eta/(H-\varepsilon+i\eta)|k\rangle = |k\rangle$, wie es sein muß.

Für die Anwendungen ist es nun oft zweckmäßig, auch an Stelle von ψ nichtnormierbare Zustände (Eigenzustände von H oder H_0) zu benutzen. In diesem Falle enthalten die Matrixelemente in (6) jedoch singuläre Funktionen. Wir betrachten zunächst, gewissermaßen als Vorübung für später zu behandelnde Eigenschaften der S-Matrix, einige sehr einfache Beispiele, bei denen man sich leicht durch unvorsichtiges Hantieren mit solchen Funktionen in Widersprüche verwickeln kann.

2. Als erstes betrachten wir die Vektoren $|k\rangle$ mit $H_0|k\rangle = \varepsilon|k\rangle$ und $|k+\rangle$ mit $(H_0+v)|k+\rangle = \varepsilon|k+\rangle$, und bilden damit:

$$\begin{aligned}\langle k|H_0|k+\rangle &= \varepsilon\langle k|k+\rangle \\ &= \langle k|H_0+v|k+\rangle - \langle k|v|k+\rangle \\ &= \varepsilon\langle k|k+\rangle - \langle k|v|k+\rangle.\end{aligned}$$

Aus diesen Relationen scheint man schließen zu können, daß $\langle k|v|k+\rangle = 0$ ist, wovon jedoch im allgemeinen keine Rede ist. In Wirklichkeit hat man nur die Differenz zweier unendlicher Terme $\varepsilon\langle k|k+\rangle - \langle k|H_0+v|k+\rangle$, d. h. einen zunächst unbestimmten Ausdruck ohne Grund Null gesetzt. Der Schluß lautet richtig:

Aus $\langle k|H_0|k'+\rangle = \langle H_0 k|k'+\rangle$ folgt:

$$(\varepsilon'-\varepsilon)\,\langle k|k'+\rangle = \langle k|v|k'+\rangle, \tag{7}$$

da $\langle k|v|k'+\rangle$ für $k \to k'$ endlich bleibt, muß $\langle k|k'+\rangle$ Anteile enthalten, welche für $\varepsilon \to \varepsilon'$ wie $1/(\varepsilon'-\varepsilon)$ divergieren.

Man kann diese Tatsache formal auch so ausdrükken, daß man sagt[3], H_0 sei in Anwendung auf $|k\rangle$ und $|k+\rangle$ nicht hermitesch. Wir ziehen die obige Formulierung mit hermiteschem H_0 aus folgenden Gründen vor: Die singulären Funktionen $\langle k+|H_0|k'\rangle$ haben nur Sinn nach Faltung mit normierbaren Funktionen $\varphi(k')$ und für diese gilt (unter sehr allgemeinen Voraussetzungen):

$$\int \langle k+|H_0 k'\rangle\varphi(k')\,\mathrm{d}k' = \int \langle H_0 k+|k'\rangle\varphi(k')\,\mathrm{d}k'.$$

Allerdings zeigt sich beim Nachrechnen dieser Hermitezitätsbedingung, z. B. in der Ortsdarstellung durch partielle Integration, daß die beiden Grenzübergänge (Integrationsvolumen) $\to\infty$ und $\varphi(k') \to \delta(k-k')$ nicht vertauschbar sind. In diesem Sinne etwa kann man von einer Nichthermitezität von H_0 sprechen.

[3] Vgl. M. Gell-Mann u. M. L. Goldberger, Phys. Rev. **91**, 401 [1953], Gl. (2.32).

Eine weitere Art nichtvertauschbarer Grenzprozesse bekommt man bei Ausdrücken wie:

$$\lim_{\eta\to 0}\left\{\frac{\varepsilon-\varepsilon'}{\varepsilon-\varepsilon'+i\eta}\langle k+|k'\rangle\right\}. \tag{8 a}$$

Der Grenzwert des Quotienten ist offenbar 1. Daraus darf jedoch nicht geschlossen werden, daß für $\eta\to 0$

$$\frac{\varepsilon-\varepsilon'}{\varepsilon-\varepsilon'+i\eta}\langle k+|k'\rangle \to \langle k+|k'\rangle \tag{8 b}$$

gilt, denn da $\langle k+|k'\rangle$ eine singuläre Funktion ist, sind die beiden Grenzwerte

$$\langle k+|k'\rangle \lim_{\eta\to 0}\frac{\varepsilon-\varepsilon'}{\varepsilon-\varepsilon'+i\eta} = \langle k+|k'\rangle$$

und (8 a) verschieden. Für (8 a) ergibt sich nämlich nach (7)

$$\lim_{\eta\to 0}\frac{\varepsilon-\varepsilon'}{\varepsilon-\varepsilon'+i\eta}\langle k+|k'\rangle = -i\pi\,\delta_-(\varepsilon-\varepsilon')\,\langle k+|v|k'\rangle. \tag{8 c}$$

Bei Nichtbeachtung dieser Tatsache würde man aus (4) schließen können:

$$\lim_{\eta\to 0}\frac{i\eta}{\varepsilon-\varepsilon'+i\eta}\langle k+|k'\rangle = 0,$$

während nach (8 c) und (5 a)[4]:

$$\begin{aligned}\lim_{\eta\to 0}\frac{i\eta}{\varepsilon-\varepsilon'+i\eta}\langle k+|k'\rangle &= \delta_{kk'} \\ &= \langle k+|k'\rangle - \frac{\langle k+|v|k'\rangle}{\varepsilon-\varepsilon'+i\eta}.\end{aligned} \tag{9}$$

Eine ganz entsprechende Gleichung bekommt man aus (4) für $|q'+\rangle$, nämlich:

$$0 = \langle k+|q'\rangle - \frac{\langle k+|v_{12}|q'\rangle}{\varepsilon-b-\varepsilon_2'+i\eta}. \tag{10}$$

Wir kommen nun zur Anwendung unserer obigen Betrachtungen auf die S-Matrix. Diese ist definiert durch $|k-\rangle = S|k+\rangle$; $|q-\rangle = S|q+\rangle$ bzw. durch die Matrixelemente

$$\begin{aligned}S_{k'k} &= \langle k'+|k-\rangle; \quad S_{k'q} = \langle k'+|q-\rangle, \\ S_{q'k} &= \langle q'+|k-\rangle; \quad S_{q'q} = \langle q'+|q-\rangle.\end{aligned} \tag{11}$$

Aus den Orthogonalitäts- und Vollständigkeitsrelationen (5) folgt dann sofort die Unitarität von S:

$$S\,S^* = S^*\,S = 1. \tag{12}$$

Für das weitere ist eine Umformung von (11) nützlich, welche auf (4) beruht. Daraus folgt nämlich

$$|k\pm\rangle = |k\rangle - \frac{1}{H-\varepsilon\pm i\eta}v|k\rangle, \tag{13 a}$$

[4] Falls keine Zweifel entstehen können, lassen wir im folgenden das Zeichen lim $\eta\to 0$ der Einfachheit halber weg.

$$|q\pm\rangle = |q\rangle - \frac{1}{H-\varepsilon\pm i\eta} v_{12}|q\rangle. \tag{13 b}$$

Nach Subtraktion von $|k+\rangle$ und $|k-\rangle$ ergibt sich

$$|k-\rangle = |k+\rangle - \frac{2i\eta}{(H-\varepsilon)^2+\eta^2} v|k\rangle \tag{14 a}$$

und entsprechend:

$$|q-\rangle = |q+\rangle - \frac{2i\eta}{(H-\varepsilon)^2+\eta^2} v_{12}|q\rangle, \tag{14 b}$$

d. h. für $\eta\to 0$

$$\begin{aligned} S_{k'k} &= \delta_{k'k} - 2\pi i\langle k'+|v|k\rangle\,\delta(\varepsilon'-\varepsilon),\\ &= \delta_{k'k} - 2\pi i\langle k'|v|k-\rangle\,\delta(\varepsilon'-\varepsilon); \end{aligned} \tag{15 a}$$

$$\begin{aligned} S_{k'q} &= 0 - 2\pi i\langle k'+|v_{12}|q\rangle\,\delta(\varepsilon'-\varepsilon),\\ &= 0 - 2\pi i\langle k'|v|q-\rangle\,\delta(\varepsilon'-\varepsilon), \end{aligned} \quad \text{etc.} \tag{15 b}$$

Aus (13 a) folgt u. a. nach Multiplikation mit $\langle k'|v$ eine Gleichung für die Matrixelemente $\langle k'|v|k-\rangle$:

$$\langle k'|v|k-\rangle = \langle k'|v|k\rangle - \int\frac{\langle k'|v|k''-\rangle\langle k''-|v|k\rangle}{\varepsilon''-\varepsilon-i\eta}\mathrm{d}k'' - \int\frac{\langle k'|v|q''-\rangle\langle q''-|v|k\rangle}{\varepsilon''-\varepsilon-i\eta}\mathrm{d}q''. \tag{16}$$

Vertauscht man hierin k mit k', bildet das konjugiert Komplexe und subtrahiert, so ergibt sich für $\varepsilon=\varepsilon'$:

$$\begin{aligned}&\langle k'|v|k-\rangle - \langle k'-|v|k\rangle \\ &= -\int\langle k'|v|k''-\rangle\langle k''-|v|k\rangle\frac{2i\eta}{(\varepsilon''-\varepsilon)^2+\eta^2}\mathrm{d}k'' - \int\langle k'|v|q''-\rangle\langle q''-|v|k\rangle\frac{2i\eta}{(\varepsilon''-\varepsilon)^2+\eta^2}\mathrm{d}q''.\end{aligned} \tag{17}$$

Nach Multiplikation mit $2\pi i\,\delta(\varepsilon'-\varepsilon)$ ist dies gleichbedeutend mit der Unitaritätsrelation

$$\int S_{k'k''}S^*_{kk''}\,\mathrm{d}k'' + \int S_{k'q''}S^*_{kq''}\,\mathrm{d}q'' = \delta_{k'k}. \tag{18}$$

Eine andere Art von Beziehungen bekommt man[5] durch Multiplikation von (4 a) mit

$$(H_0-\varepsilon+i\eta)^{-1}(H-\varepsilon+i\eta-v) = 1.$$

Es ergibt sich dann eine Integralgleichung[6] für $|k+\rangle$:

$$|k+\rangle = |k\rangle - \frac{1}{H_0-\varepsilon+i\eta}v|k+\rangle. \tag{19}$$

Durch Multiplikation von (19) mit $\langle k'+|v$ und Summation über $|k''\rangle$ als Zwischenzustände bekommt man:

$$\begin{aligned}&\langle k'+|v|k+\rangle\\ &= \langle k'+|v|k\rangle - \int\frac{\langle k'+|v|k''\rangle\langle k''|v|k+\rangle}{\varepsilon''-\varepsilon+i\eta}\mathrm{d}k''\end{aligned}$$

und entsprechend zu (17):

$$\begin{aligned}0 &= \langle k'+|v|k\rangle - \langle k'+|v|k+\rangle\\ &\quad - \int\langle k'+|v|k''\rangle\langle k''|v|k+\rangle\frac{2i\eta}{(\varepsilon-\varepsilon'')^2+\eta^2}\mathrm{d}k''.\end{aligned} \tag{20}$$

Daraus scheint man nach Multiplikation mit $2\pi i\,\delta(\varepsilon-\varepsilon')$ wegen (15) schließen zu können:

$$\int S_{k'k''}S^*_{kk''}\,\mathrm{d}k'' = \delta_{k'k} \tag{18 f}$$

im Widerspruch zu (18).

Tatsächlich sind bei dem Übergang von (20) zu (18 f) wieder einige Singularitäten nicht sorgfältig genug behandelt worden. Zur genaueren Untersuchung dieser Behauptung sehen wir uns zunächst die Singularität in (10) an. (10) besagt offenbar, daß $\langle k+|q'\rangle = \langle k+|b\rangle|k_2'\rangle$ als Funktion von ε_2' an der Stelle

$$\varepsilon_2' = \varepsilon - b \tag{21}$$

singulär wird. In der Ortsdarstellung bedeutet dies das Auftreten einer Kugelwelle $\exp(-i|k_2'|r_2)/r_2$ des zweiten Teilchens allein, welche ja auch zu erwarten ist. Entscheidend ist nun, daß $\langle r_1 r_2|k+\rangle$ auch eine solche Kugelwelle enthält und infolgedessen die Funktion $\langle k+|k'\rangle$ in Abhängigkeit von ε_2' ebenfalls eine Singularität an der Stelle (21) besitzen muß. Da diese in (9) noch nicht explizit auftritt, muß sie in dem Matrixelement $\langle k+|v|k'\rangle$ enthalten sein. Um sie deutlicher herauszupräparieren, schreiben wir zunächst den v_1-Anteil an:

$$\langle k+|v_1|k'\rangle = \langle k+|k_2'\rangle|v_1|k_1'\rangle.$$

Wir spalten diesen Term mit Hilfe des Projektionsoperators

$$P = 1 - |b\rangle\langle b| \quad \text{auf in:}$$

$$\langle k+|v_1|k'\rangle = \langle k+|q'\rangle\langle b|v_1|k_1'\rangle + \langle k+|Pv_1|k'\rangle. \tag{22}$$

[5] Vgl. C. Møller, Dan. mat. fys. medd. **23**, Nr. 1 [1945].

[6] Auch bei Gl. (19) ist einige Sorgfalt mit dem Grenzübergang $\eta\to 0$ auf der rechten Seite erforderlich: Man hat zunächst die Gleichung für endliches η zu lösen und dann an der Lösung, etwa $|k+\eta\rangle$ genannt, den Grenzwert $\lim_{\eta\to 0}|k+\eta\rangle = |k+\rangle$ zu bilden. Die Gleichung $|k+\rangle = |k\rangle - \lim_{\eta\to 0}(H_0-\varepsilon+i\eta)^{-1}v|k+\rangle$ dagegen hat keine eindeutige Lösung. Vgl. etwa L. L. Foldy u. W. Tobocman, Phys. Rev. **105**, 1099 [1957].

Für den ersten Summanden bekommt man unter Benutzung von (1) und (10):

$$\langle k+|q'\rangle\langle b|v_1|k_1'\rangle = \frac{b-\varepsilon_1'}{\varepsilon-b-\varepsilon_2'+i\eta}\langle b|k_1'\rangle\langle k+|v_{12}|q'\rangle. \tag{23}$$

Der zweite Summand ist an der Stelle (21) regulär, da die singulären Anteile wegprojiziert sind. Weiterhin enthält der Term mit v_{12} auf Grund unserer Annahme, daß v_{12} keine gebundenen Zustände besitzen soll, keine Singularitäten mehr. Man bekommt somit, nach Addition und Subtraktion von $\varepsilon-\varepsilon_2'+i\eta$ im Zähler von (23) und Trennung der geeigneten Terme:

$$\langle k+|v|k'\rangle = \langle k+|\underbrace{P\,v_1+v_{12}P}_{r}|k'\rangle + \frac{\varepsilon-\varepsilon'+i\eta}{\varepsilon-b-\varepsilon_2'+i\eta}\langle b|k_1'\rangle\langle k+|v_{12}|q'\rangle. \tag{24}$$

Setzt man dies in (9) ein, so erhält man eine Partialbruchzerlegung von $\langle k+|k'\rangle$ an der man beide Singularitäten explizit erkennen kann. Beim Einsetzen in (15) bekommt man neben einem Term mit $r=P\,v_1+v_{12}P$ ein Zusatzglied mit einem Faktor $i\eta/(\varepsilon-b-\varepsilon_2'+i\eta)$. Da dieses jedoch mit einer regulären Funktion multipliziert ist, verschwindet es für $\eta\to 0$. Für die Behandlung von (20) ist nun entscheidend, daß dort der gleiche Term mit einer singulären Funktion multipliziert wird [nämlich $1/(\varepsilon-b-\varepsilon_2'-i\eta)$], und infolgedessen einen Beitrag liefert. Man bekommt dafür nach Einsetzen von (24) in (20) und unter Berücksichtigung der Tatsache, daß in (20) $|k+\rangle$ und $|k'+\rangle$ zunächst für endliches η zu nehmen sind [im Gegensatz zu den $|k-\rangle$ in (16), vgl. Anm. zu Gl. (19)]:

$$\int\langle k'+|v|k''\rangle\langle k''|v|k+\rangle\frac{2i\eta}{(\varepsilon-\varepsilon'')^2+\eta^2}\,dk'' = \int\left\{\langle k'+|r|k''\rangle + \frac{(\varepsilon-\varepsilon''+i\eta)}{\varepsilon-b-\varepsilon_2''+i\eta}\langle b|k_1'\rangle\langle k+|v_{12}|q'\rangle\right\}$$
$$\cdot\left\{\langle k''|r|k+\rangle + \frac{\varepsilon-\varepsilon''-i\eta}{\varepsilon-b-\varepsilon_2''-i\eta}\langle b|k_1'\rangle\langle k+|v_{12}|q'\rangle\right\}\frac{2i\eta}{(\varepsilon-\varepsilon'')^2+\eta^2}\,dk''.$$

Das in r quadratische Glied liefert gerade die Beiträge von (12 f). Die beiden in r linearen Glieder verschwinden für $\eta\to 0$, da die Singularitäten $1/(\varepsilon-\varepsilon''+i\eta)$ und $1/(\varepsilon-b-\varepsilon_2''+i\eta)$ an verschiedenen Stellen liegen. In dem r nicht enthaltenden Glied kürzen sich die Zähler gegen den Nenner des Termes mit $2i\eta$ und es bleibt:

$$-\int\langle k'+|v_{12}|b\,k_2''\rangle\langle b|k_1''\rangle\langle k_1''|b\rangle\langle b\,k_2''|v_{12}|k+\rangle\frac{2i\eta}{(\varepsilon-b-\varepsilon_2'')^2+\eta^2}\,dk_1''\,dk. \tag{25}$$

Nach Integration über k_1'' und (15) bekommt man damit aus (20) nicht (18 f) sondern genau (18).

Zu einer anderen Art von Zerlegung als in (24) kommt man bei Benutzung der Eigenfunktionen von H_0+v_1 an Stelle von H_0. Diese sind Produkte von ebenen Wellen $|k_2\rangle$ mit den Eigenfunktionen $(|k_1+\rangle, |b\rangle)$ oder $(|k_1-\rangle, |b\rangle)$ von H_1+v_1. Wir führen die Bezeichnungen

$$|\overset{+}{k}\rangle = \begin{cases}|k_1+\rangle|k_2\rangle\\ |b\rangle|k_2\rangle=|q\rangle\end{cases};\quad |\overset{-}{k}\rangle = \begin{cases}|k_1-\rangle|k_2\rangle\\ |b\rangle|k_2\rangle=|q\rangle\end{cases} \tag{26}$$

ein. Diese Zustände bilden, anders als $(|k\rangle, |q\rangle)$, je ein vollständiges Orthonormalsystem. Die Eigenzustände von H bekommt man aus (26) in der Form:

$$|k\pm\rangle = \frac{\pm i\eta}{H-\varepsilon\pm i\eta}|\overset{+}{k}\rangle. \tag{27 a}$$

Diese Gleichung definiert jetzt die Zustände (4 a) *und* (4 b). Analog zu (19) kann man nun, gültig für *alle* Eigenzustände von H, bilden:

$$|k+\rangle = |\overset{+}{k}\rangle - \frac{1}{H_0+v_1-\varepsilon+i\eta}v_{12}|\overset{+}{k}\rangle \tag{27 b}$$

und bekommt daraus in Analogie zu (20):

$$0=\langle k'+|v_{12}|\overset{+}{k}\rangle - \langle\overset{+}{k'}|v_{12}|k+\rangle - \int\langle k'+|v_{12}|\overset{+}{k''}\rangle\langle\overset{+}{k''}|v_{12}|k+\rangle\frac{2i\eta}{(\varepsilon-\varepsilon'')^2+\eta^2}\,dk'' \tag{28}$$

[Integration über *alle* Zustände in Gegensatz zu (20)].

Da hier die vorkommenden Matrixelemente regulär sind bei $\varepsilon=\varepsilon''$, erhält man aus (28) die eine Hälfte der Unitaritätsbedingungen einer Matrix

$$\tilde{S}_{k'k} = \delta_{k'k} - 2\pi i\,\delta(\varepsilon'-\varepsilon)\langle k'+|v_{12}|\overset{+}{k}\rangle. \tag{29}$$

Man kann nun leicht den Zusammenhang dieser Matrix mit $S_{k'k}=\langle k'+|k-\rangle$ angeben. Wir schreiben dazu

$$|\overset{-}{k}\rangle = \int s_{k'k}\,|\overset{+}{k'}\rangle\,\mathrm{d}k' \tag{30}$$

mit $\qquad s_{k'k} = \langle \overset{+}{k'}\,|\,\overset{-}{k}\rangle .$

Nach Multiplikation von

$$|k''+\rangle = |\overset{+}{k''}\rangle - \frac{1}{H-\varepsilon''+i\,\eta}\,v_{12}\,|\overset{+}{k''}\rangle \tag{31}$$

mit $s_{k''k}$ und Integration über k'' :

$$\int s_{k''k}\,|k''+\rangle\,\mathrm{d}k'' = |\overset{-}{k}\rangle - \frac{1}{H-\varepsilon+i\,\eta}\,v_{12}\,|\overset{-}{k}\rangle$$

sowie Subtraktion von

$$|k-\rangle = |\overset{-}{k}\rangle - \frac{1}{H-\varepsilon-i\,\eta}\,v_{12}\,|\overset{-}{k}\rangle$$

und skalarer Multiplikation mit $\langle k'+|$ bekommt man

$$S_{k'k} = s_{k'k} - 2\,\pi\,i\,\delta(\varepsilon'-\varepsilon)\,\langle k'+|\,v_{12}\,|\overset{-}{k}\rangle ,$$

d. h. $$S_{k'k} = \int \tilde{S}_{k'k''}\,s_{k''k}\,\mathrm{d}k'' . \tag{32}$$

Wegen der Unitarität von $s_{k''k}$ hat man mit (28) wegen (32) auch die Unitarität von $S_{k''k}$ bewiesen.

3. Die bisher besprochenen Schwierigkeiten lassen sich vermeiden, wenn man statt der Impulseigenfunktionen normierbare Zustände benutzt. An Stelle von (4 a) kann man dann schreiben:

$$\psi_+ = \int \psi(k)\,|k+\rangle\,\mathrm{d}k = \lim_{\eta\to0}\int \frac{i\,\eta}{H-\varepsilon+i\,\eta}\,\psi(k)\,|k\rangle\,\mathrm{d}k$$

$$= \lim_{\eta\to0}\ \lim_{t\to\infty}\int_0^t e^{i\,H\,\tau}\,e^{-i\,H_0\,\tau-\eta\,\tau}\,\mathrm{d}\eta\,\tau\,\psi$$

mit

$$\psi = \int \psi(k)\,|k\rangle\,\mathrm{d}k .$$

Nach partieller Integration

$$\psi_+ = \left(1 + i\,\lim_{\eta\to0}\ \lim_{t\to\infty}\int_0^t e^{i\,H\,\tau}\,v\,e^{-i\,H_0\,\tau-\eta\,\tau}\,\mathrm{d}\tau\right)\psi$$

und Vertauschung der Grenzprozesse $\eta\to0$ und $t\to\infty$ erhält man daraus

$$\psi_+ = \lim_{t\to\infty}\,(e^{i\,H\,t}\,e^{-i\,H_0\,t})\,\psi . \tag{33}$$

An Stelle des Beweises der Vertauschbarkeit begnügen wir uns mit dem Hinweis, daß die Existenz des Grenzwertes (33) physikalisch einleuchtend ist. $\psi(t) = e^{-i\,H_0\,t}\,\psi$ ist ja die Entwicklung des Wellenpaketes $\psi(t)$ mit $\psi(0) = \psi$ nach der freien Schrödinger-Gleichung. Da dessen Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Wechselwirkungsbereich mit zunehmender Zeit gegen Null geht, kann für große Zeiten die zeitliche Änderung von $\psi(t)$ durch $e^{i\,H\,t}$ kompensiert werden.

Entsprechendes gilt für die Wellenpakete

$$\int \psi(k_2)\,\exp\{-i(b+\varepsilon_2)\,t\}\,|b\rangle\,|k_2\rangle\,\mathrm{d}k_2$$

und für die Grenzwerte bei $t\to-\infty$. Läßt man die $\psi(k)$ und $\psi(k_2)$ je ein vollständiges Orthogonalsystem normierbarer Zustände ψ_ν durchlaufen, so werden durch

$$\psi_{\pm\nu} = \lim_{t\to\pm\infty} e^{i\,H\,t}\,e^{-i\,H_0\,t}\,\psi_\nu \tag{34}$$

zwei vollständige Orthogonalsysteme $\psi_{+\nu}$ und $\psi_{-\nu}$ erzeugt. Die S-Matrix kann dann durch

$$\psi_{-\nu} = S\,\psi_{+\nu} \tag{35}$$

definiert werden. Da in (35) singuläre Funktionen völlig vermieden sind, ist der zeitabhängige Formalismus (33) für manche allgemeinen Betrachtungen vorzuziehen, während die stationäre Behandlung nach (4) meist für die praktische Rechnung (z. B. Störungsrechnung) geeigneter ist.

Herrn Prof. W. Heisenberg danke ich für die Anregung zu diesen Untersuchungen und zahlreiche klärende Diskussionen. Den Herren Dr. R. Haag und Dr. K. Symanzik verdanke ich ebenfalls wertvolle Bemerkungen.

4. Anhang

Die Orthogonalitätsrelationen (5 a)

Durch Addition und Subtraktion von $H-\varepsilon$ im Zähler von (4) bekommt man

$$|k+\rangle = |k\rangle - \frac{1}{H-\varepsilon+i\,\eta}\,v\,|k\rangle , \tag{36 a}$$

$$|q+\rangle = |q\rangle - \frac{1}{H-\varepsilon+i\,\eta}\,v_{12}\,|q\rangle , \tag{36 b}$$

andrerseits durch Multiplikation von (4 a) mit

$$(H_0-\varepsilon+i\,\eta)^{-1}\,(H-\varepsilon+i\,\eta-v) = 1$$

und $\quad (H_0+v_1-\varepsilon+i\,\eta)^{-1}\,(H-v_{12}-\varepsilon+i\,\eta) = 1 ,$

$$|k'+\rangle = |k'\rangle - \frac{1}{H_0-\varepsilon'+i\,\eta}\,|k'+\rangle , \tag{37 a}$$

$$|k'+\rangle = \frac{i\,\eta}{H_0+v_1-\varepsilon'+i\,\eta}\,|k'\rangle - \frac{1}{H_0+v_1-\varepsilon'+i\,\eta}\,v_{12}\,|k'+\rangle . \tag{37 b}$$

Multipliziert man nun (36) von links mit $\langle k'+|$, (37 a) mit $\langle k|$ und (37 b) mit $\langle q|$ so erhält man durch Vergleich von (36) und (37) die ersten beiden Orthogonalitätsrelationen (5 a). Die übrigen bekommt man auf entsprechende Weise.