

# Berechnung des anharmonischen Oszillators mittels funktionaler Integration

G. RÖPKE \*

Theoretisch-Physikalisches Institut der Universität Leipzig

(Z. Naturforschg. **22 a**, 860—868 [1967]; eingegangen am 19. Dezember 1966)

Energy eigenvalues and transition-probabilities for the anharmonic oscillator are calculated by evaluating functional integrals in a lattice-space and reordering infinite series in summable series. The results are compared with the known values.

## 1. Das quantenmechanische Problem

Der anharmonische Oszillator

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{h}{4} x^4$$

dient als quantenmechanisches Modell zur Quantentheorie stark gekoppelter Felder. Lösungsmethoden der Feldtheorie können an ihm erprobt werden. Seine Energieeigenwerte und Übergangswahrscheinlichkeiten lassen sich numerisch aus der SCHRÖDINGER-Gleichung berechnen<sup>1, 2</sup>. Sie können auch für

den einzeitigen anharmonischen Oszillator unter Vermeidung der SCHRÖDINGER-Gleichung mit der neuen TAMM-DANCOFF-Methode berechnet werden<sup>3, 4</sup>. Im Hinblick auf eine relativistische Feldtheorie ist ihre Berechnung mittels der funktionalen Integration besonders interessant; sie ergeben sich dort aus der FOURIER-Transformierten der Zweipunktfunktion.

Die Zweipunktfunktion ist der Grundzustandserwartungswert des zeitlich geordneten Produktes zweier Ortsoperatoren:

$$\chi(t_1, t_2) = \langle \psi_0 | T x(t_1) x(t_2) | \psi_0 \rangle.$$

Sie läßt sich mit der Sprungfunktion  $\Theta(t) = 0$  für  $t < 0$ ;  $= 1$  für  $t > 0$  und nach Einschieben eines vollständigen orthonormierten Lösungssystems des HAMILTON-Operators folgendermaßen schreiben:

$$\begin{aligned} \chi(t_1, t_2) = & \Theta(t_2 - t_1) \sum_{n=0}^{\infty} |\langle \psi_0 | x | \psi_n \rangle|^2 \exp\{i/\hbar (E_0 - E_n) (t_2 - t_1)\} \\ & + \Theta(t_1 - t_2) \sum_{n=0}^{\infty} |\langle \psi_0 | x | \psi_n \rangle|^2 \exp\{i/\hbar (E_0 - E_n) (t_1 - t_2)\}. \end{aligned}$$

Die FOURIER-Transformation läßt sich hier ohne weiteres durchführen und ergibt

$$\tilde{\chi}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \chi(t) \exp\{-i\omega t\} dt = \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|x_{n0}|^2 \omega_{n0}}{\omega_{n0}^2 - \omega^2}.$$

Sie enthält die Übergangsamplituden  $x_{n0} = \langle \psi_0 | x | \psi_n \rangle$  und die Übergangsfrequenzen  $\omega_{n0} = (E_n - E_0)/\hbar$ .

Wir entwickeln für  $\omega/\omega_{10} < 1$  diesen Ausdruck in eine Potenzreihe von  $\omega^2$ :

$$\frac{\sqrt{2\pi}}{2} \tilde{\chi}(\omega) = \left( \frac{|x_{10}|^2}{\omega_{10}} + \frac{|x_{30}|^2}{\omega_{30}} + \frac{|x_{50}|^2}{\omega_{50}} + \dots \right) + \left( \frac{|x_{10}|^2}{\omega_{10}^3} + \frac{|x_{30}|^2}{\omega_{30}^3} + \dots \right) \omega^2 + \left( \frac{|x_{10}|^2}{\omega_{10}^5} + \dots \right) \omega^4 + \dots \quad (\text{I})$$

Die Reihe kann umgeordnet werden, da sie absolut konvergiert. Beweis: Die Koeffizienten werden von der Vertauschungsrelation majorisiert [siehe (VIII)]. Aus Paritätsgründen sind die  $x_{2n,0}$  gleich Null.

## 2. Die Entwicklung im Gitterraum

Die Zweipunktfunktion läßt sich auch als funktionales Integral darstellen<sup>5</sup>:

$$\chi(t_1, t_2) = \int x(t_1) x(t_2) \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int L dt \right\} D x(t) / \int \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int L dt \right\} D x(t).$$

\* Neue Anschrift: Instiut für Theoretische Physik der Technischen Universität Dresden.

<sup>1</sup> L. I. SCHIFF, Phys. Rev. **92**, 766 [1953].

<sup>2</sup> S. I. CHAN u. D. STELMAN, J. Molec. Spectr. **10**, 278 [1963].

<sup>3</sup> W. HEISENBERG, Nachr. Gött. Akad. Wiss. **1953**, 111.

<sup>4</sup> H. STUMPF, F. WAGNER u. F. WAHL, Z. Naturforschg. **19 a**, 1254 [1964].

<sup>5</sup> N. N. BOGOLJUBOV u. D. V. SHIRKOV, Introduction to the Theory of Quantized Fields, Intersc. Publ., New York 1959.



Die Berechnung solcher funktionaler Integrale kann nach einer Methode von HEBER u. a.<sup>6,7</sup> im Gitterraum vorgenommen werden. In unserem quantenmechanischen Fall gehen wir folgendermaßen vor: Symmetrisch zu  $(t_1 + t_2)/2$  werden auf der Zeitachse  $t$   $N$  äquidistante Punkte im Abstand  $\varepsilon$  ausgewählt. Die Funktionen  $x(t)$  werden durch die  $N$ -tupel  $x(t_\nu) = x_\nu$  dargestellt,  $\nu = 1, 2, 3, \dots, N$ .  $x(t)$  (stetig) wird beliebig gut durch einen Polygonzug durch diese Punkte approximiert, indem wir erst  $N$  gegen  $\infty$ , dann  $\varepsilon$  gegen Null gehen lassen. Die funktionale Integration wird dann zu einem  $N$ -fachen Integral über alle  $x_\nu$ . Eine Integration bezüglich der Zeit wird durch eine Summe ersetzt, eine Differentiation bezüglich der Zeit durch einen Differentialquotienten, z. B.<sup>8</sup>:

$$\left. \frac{d^2 x(t)}{dt^2} \right|_{t=t_\nu} \rightarrow \frac{1}{\varepsilon^2} [x(t_\nu + \varepsilon) - 2x(t_\nu) + x(t_\nu - \varepsilon)] = \ddot{x}_\nu.$$

In diesem Sinne schreiben wir die Zweipunktfunktion folgendermaßen mit  $m/\hbar = \mu$ ,  $l/4\hbar = \lambda$ :

$$\begin{aligned} \chi(t_1, t_2) &= \frac{\int \cdots \int x(t_1) x(t_2) \exp\{i\varepsilon \sum_{\nu=1}^N (-\frac{1}{2}\mu x_\nu \ddot{x}_\nu - \lambda x_\nu^4)\} \cdots dx_\nu \cdots}{\int \cdots \int \exp\{i\varepsilon \sum_{\nu=1}^N (-\frac{1}{2}\mu x_\nu \ddot{x}_\nu - \lambda x_\nu^4)\} \cdots dx_\nu \cdots} = \\ &= \frac{\int x(t_1) x(t_2) \exp\{-i\varepsilon \sum_N \lambda x_\nu^4\} d^N x_\nu + \left(\frac{-i\varepsilon\mu}{2\varepsilon^2}\right) \sum_{t_3} \int x(t_1) x(t_2) x(t_3) [x(t_3 + \varepsilon) - 2x(t_3) + x(t_3 - \varepsilon)] \exp\{-i\varepsilon \sum_N \lambda x_\nu^4\} d^N x_\nu + \dots}{\int \exp\{-i\varepsilon \sum_N \lambda x_\nu^4\} d^N x_\nu + \left(\frac{\mu}{2i\varepsilon}\right) \sum_{t_3} \int x_3 [x_3 + \varepsilon - 2x_3 + x_3 - \varepsilon] \exp\{-i\varepsilon \sum_N \lambda x_\nu^4\} d^N x_\nu + \frac{1}{2!} \left(\frac{\mu}{2i\varepsilon}\right)^2 \sum_{t_3} \sum_{t_4} [x_3] [x_4] \exp\{-i\varepsilon \sum_N \lambda x_\nu^4\} d^N x_\nu + \dots} \quad (\text{II}) \end{aligned}$$

Die Gleichungen sind im  $\lim N \rightarrow \infty \lim \varepsilon \rightarrow 0$  zu verstehen. Der kinetische Teil der LAGRANGE-Funktion  $\frac{1}{2}\mu \dot{x}^2$  wurde in  $-\frac{1}{2}\mu x \ddot{x}$  umgeformt (der Einfluß des Randes  $\nu=1$ ,  $N$  fällt bei der Division heraus) und nach diesem wurde die  $e$ -Funktion entwickelt, um so die einzelnen Integrationen zu entkoppeln. Die Integrationen über die einzelnen  $x_\nu$  ergeben die Momente  $M_n$ .  $M$  je nachdem, wieviele der  $t_1, t_2, t_3, \dots$  gerade auf dem jeweiligen Gitterpunkt  $t_\nu$  liegen:

$$M_n = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} x^n e^{-i\varepsilon\lambda x^4} dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\varepsilon\lambda x^4} dx}, \quad M = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\varepsilon\lambda x^4} dx,$$

$$M_0 = 1,$$

$$M_2 = \frac{\Gamma(3/4)}{\Gamma(1/4)} \cdot \frac{1}{\sqrt{i\varepsilon\lambda}} = 0,33798912 \frac{1}{\sqrt{i\varepsilon\lambda}},$$

$$M_4 = \frac{\Gamma(5/4)}{\Gamma(1/4)} \cdot \frac{1}{\sqrt{i\varepsilon\lambda^2}} = \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{i\varepsilon\lambda}, \quad 9,$$

Zur weiteren Behandlung des Ausdruckes (II) führen wir 2 Größen ein: Einerseits die Differenz des KRONECKER-Symbols im Gitterraum

$$\delta_{t_1 t_2} = 1 \text{ für } t_1 = t_2; = 0 \text{ sonst;}$$

$$\frac{1}{\varepsilon} \delta_{t_1 t_2} \rightarrow \delta(t_1 - t_2),$$

<sup>6</sup> G. HEBER u. H. J. KAISER, Z. Naturforschg. **19 a**, 828 [1964].

<sup>7</sup> G. HEBER, H. J. KAISER u. A. KÜHNEL, Z. Naturforschg. **20 a**, 498 [1965].

<sup>8</sup> R. P. FEYNMAN, Rev. Mod. Phys. **20**, 367 [1948].

$$M_6 = \frac{\Gamma(7/4)}{\Gamma(1/4)} \cdot \frac{1}{\sqrt{i\varepsilon\lambda^3}} = \frac{3}{4} \cdot 0,33798912 \frac{1}{\sqrt{i\varepsilon\lambda^3}},$$

usw., die ungeraden Momente verschwinden. Die Integrale für  $M_n$  sind als Grenzwert zu verstehen, indem ein konvergenzerzeugender Faktor hinzugefügt wird, z. B. im  $\lim \lambda'' \rightarrow 0$  mit  $\lambda = \lambda' - i\lambda''$ ,  $\lambda'' > 0$ . Was bedeutet aber dieser konvergenzerzeugende Faktor physikalisch? Wenn  $\lambda$  mit einem kleinen Imaginärteil versehen ist, so bewirkt das im Ergebnis (IX), daß  $\omega_{n0} = \omega'_{n0} - i\omega''_{n0}$  wird, der Pol wird leicht verschoben sein. Das heißt, daß das  $n$ -te Energieniveau schwach gedämpft sein wird, was wiederum eine Auszeichnung der Zeitrichtung und damit Ausdruck der Kausalität ist. Die Funktionalintegrale sollen also in diesem Sinne verstanden sein, daß  $\lambda$  einen kleinen negativen Imaginärteil enthält. Die Momente sind deshalb auf so viele Stellen angegeben, weil in der folgenden Rechnung oft Differenzen fast gleichgroßer Zahlen auftreten, welche also hinreichend genau bekannt sein müssen.

<sup>9</sup> K. HAYASHI, Sieben- und mehrstellige Tafeln der Kreis- und Hyperbelfunktionen und deren Produkte sowie der Gammafunktion, Springer-Verlag, Berlin 1926.

$$\delta''_{t_1 t_2} = 1 \text{ für } t_1 = t_2 \pm \varepsilon; = -2 \text{ für } t_1 = t_2; = 0 \text{ sonst; } \frac{1}{\varepsilon^3} \delta''_{t_1 t_2} \rightarrow \delta''(t_1 - t_2),$$

$$\delta^{(2n)}_{t_1 t_2} = (-1)^{n+m} \binom{2n}{n+m} \text{ für } t_1 = t_2 \pm m \varepsilon; \quad \frac{1}{\varepsilon^{2n+1}} \delta^{(2n)}_{t_1 t_2} \rightarrow \delta^{(2n)}(t_1 - t_2).$$

Zum anderen benötigen wir die Kombinationsgrößen  $f_\nu$ . Wenn wir nämlich z. B. den Ausdruck

$$\sum_{t_1} \cdots \sum_{t_n} \int x_1 \dots x_n \exp\left\{-i \varepsilon \sum_N \lambda x_\nu^4\right\} d^N x_\nu$$

berechnen wollen, können wir zunächst so tun, als liefen alle  $x_i$  unabhängig voneinander über die  $N$  Gitterpunkte, und wir erhalten  $N^n M^N M_1^n$ . Jetzt bedenken wir, daß es auch vorkommt, daß zwei der  $x_i$  zusammenfallen, dann müssen wir ein  $M_1^2$  durch ein  $M_2$  ersetzen, und die Berücksichtigung aller Möglichkeiten führt zu einem Zusatzterm  $+ \binom{n}{2} N^{n-1} M^N M_1^{n-2} (M_2 - M_1^2)$ . In diesem Ergebnis müssen, wenn drei der  $x_i$  zusammenfallen, ein  $M_1^3$  und drei  $(M_2 - M_1^2) M_1$  durch ein  $M_3$  ersetzt werden, was einen Zusatzterm  $+ \binom{n}{3} N^{n-2} M^N M_1^{n-3} (M_3 - 3(M_2 - M_1^2) M_1 - M_1^3)$  ergibt, usw. Allgemein erhalten wir die Kombinationsgrößen  $f_\nu$  rekursiv, indem wir die  $\nu$  Punkte in alle möglichen Gruppen zerlegen (graphisch etwa folgendermaßen  $\cdot - \cdot - \cdot - \cdot - \cdot - \cdot$ ) und das dieser Zerlegung entsprechende Produkt der  $f_{\nu_i}$  mit dem Gewichtungsfaktor  $\nu! / (\prod \nu_i! \prod g_i!)$  von  $M_\nu$  subtrahieren, wobei  $\nu_i$  die Anzahl der Punkte in einer der Gruppen und  $g_i$  die Zahl der Gruppen mit gleichviel Punkten ist. In unserem Modell tragen nur Zerlegungen in Gruppen mit einer geraden Anzahl von Punkten bei. Wir erhalten folgende Werte:

$$\begin{aligned} f_2 &= M_2 & &= 0,33798912 \frac{1}{\sqrt{i \varepsilon \lambda}}, \\ f_4 &= M_4 - 3 f_2^2 & &= -0,09270994 \frac{1}{i \varepsilon \lambda}, \\ f_6 &= M_6 - 15 f_4 f_2 - 15 f_2^3 & &= 0,1443549 \frac{1}{\sqrt{i \varepsilon \lambda^3}}, \\ f_8 &= M_8 - 28 f_6 f_2 - 35 f_4^2 - 210 f_4 f_2^2 - 105 f_2^4 & &= -0,5006288 \frac{1}{(i \varepsilon \lambda)^2}, \\ f_{10} &= M_{10} - 45 f_8 f_2 - 210 f_6 f_4 - 630 f_6 f_2^2 - 1575 f_4^2 f_2 - 3150 f_4 f_2^3 - 945 f_2^5 & &= 3,011392 \frac{1}{\sqrt{i \varepsilon \lambda^5}}. \end{aligned}$$

Nun können wir die Division (II) durchführen.  $M^N$  kann aus Zähler und Nenner gekürzt werden. Der Nenner kann, solange wir bis zu einer Ordnung  $< N$  entwickeln, aus dem Zähler ausfaktorisiert werden. Dabei fallen genau alle Glieder weg, die  $N$  enthalten (Vakuumterme), so daß  $\chi(t_1, t_2)$  nicht mehr von  $N$  abhängt. Was dann vom Zähler übrig bleibt, wenn der Nenner herausgehoben ist, kann durch Graphen dargestellt werden (Abb. 1). Die Graphen bedeuten dabei folgendes: In der  $n$ -ten Ordnung werden zu  $x(t_1)$  und  $x(t_2)$  noch  $n$  Punktpaare hinzugefügt, welche jeweils durch eine zweite Ableitung verknüpft sind.  $x(t_1)$  wird durch eine einlaufende,  $x(t_2)$  durch eine auslaufende Linie dargestellt, die  $n$  Punktpaare durch  $n$  innere Linien. Die Linien bilden einen zusammenhängenden Graphen, nichtzusammenhängende Graphen enthalten eine Potenz von  $N$  und wurden gekürzt.

Die Punkte, zwischen denen die Linien laufen, tragen eine bestimmte Zeit  $t_\nu$  des Gitters.  $t_1$  (einlaufende Linie) und  $t_2$  (auslaufende Linie) sind fest,

über alle übrigen Zeiten wird summiert. Ein Punkt, von dem  $2n$  Linien ausgehen, ist mit  $2n$   $x_i$  belegt. Er ergibt eine Kombinationsgröße  $f_{2n}$ , denn von  $M_{2n}$  müssen alle möglichen Bedeckungen abgezogen werden. Eine innere Linie ist eine zweite Ableitung im Gitterraum, sie ist gleich  $+1$ , wenn die Zeitdifferenz der Endpunkte  $\varepsilon$  ist, gleich  $-2$ , wenn die Endpunkte zur gleichen Zeit genommen werden, ansonsten gleich Null. Die Graphen dienen zur Veranschaulichung dessen, auf welche Arten die  $n$  Punktpaare, die in der  $n$ -ten Ordnung der Entwicklung der Exponentialfunktion dazukommen, zeitlich zusammenfallen können. Diese  $n$  Punktpaare können auf  $n!$  Arten miteinander permutieren, was sich gerade mit  $1/n!$  der Entwicklung kürzt.  $(1/2)^n$  fällt heraus, da jedes Punktpaar in sich vertauscht werden kann. Einige Permutationen geben aber nichts Neues und müssen weggelassen werden, d. h. man muß dividieren durch 2 bei jeder symmetrischen Schleife an einem Punkt, durch  $r!$ , wenn  $r$  identische Schleifen von einem Punkt ausgehen, durch  $s!$ , wenn

$$\begin{aligned}
\alpha &= \alpha_0 = -\frac{\sqrt{i\varepsilon}}{\sqrt{\lambda}} + \frac{0}{f_2} \frac{\mu}{-f_4} + \left( \frac{0}{\frac{1}{2}f_6} \frac{0}{3f_4f_2} \right) \frac{\mu^2}{\sqrt{i\varepsilon}^3 \sqrt{\lambda}^3} + \left( \frac{0}{-\frac{1}{6}f_8} \frac{0}{-3f_6f_2} \frac{0}{-3f_4^2} \frac{0}{-10f_4f_2^2} \frac{0}{-f_4^{2*}} \right) \frac{\mu^3}{(i\varepsilon)^4 \lambda^2} + \\
&+ \left( \frac{0}{\frac{1}{24}f_{10}} \frac{0}{\frac{1}{2}f_8f_2} \frac{0}{3f_6f_4} \frac{0}{10f_6f_2^2} \frac{0}{\frac{3}{2}f_6f_2^2} \frac{0}{\frac{3}{4}f_6f_4} \frac{0}{\frac{3}{2}f_6f_4} \frac{0}{20f_4^2f_2} \frac{0}{35f_4f_2^3} \frac{0}{7f_4^2f_2} \frac{0}{2f_6f_4^*} \frac{0}{8f_4^2f_2^{**}} \right) \frac{\mu^4}{\sqrt{i\varepsilon}^5 \sqrt{\lambda}^5} + \dots \\
&\quad * (\delta_{t_1t_2}^{(2)})^3 = \delta_{t_1t_2}^{(4)} - 6 \delta_{t_1t_2}^{(2)} \quad ** (\delta_{t_1t_2}^{(2)})^2 \delta_{t_1t_2}^{(4)} = -4 \delta_{t_1t_2}^{(6)} + 16 \delta_{t_1t_2}^{(4)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\alpha_1 &= -\frac{i\varepsilon\mu}{\lambda} + \frac{2}{\sqrt{i\varepsilon}} \frac{\mu^2}{\sqrt{\lambda}^3} + \left( \frac{2}{0} \frac{2}{0} \frac{2}{0} \frac{2}{0} \frac{2}{0} \right) \frac{\mu^3}{(i\varepsilon)^3 \lambda^3} + \left( \frac{2}{0} \frac{2}{0} \frac{2}{0} \frac{2}{0} \frac{2}{0} \frac{2}{0} \frac{2}{0} \frac{2}{0} \frac{2}{0} \frac{2}{0} \right) \frac{\mu^4}{\sqrt{i\varepsilon}^4 \sqrt{\lambda}^5} + \dots \\
\alpha_2 &= -\frac{\sqrt{i\varepsilon}^3 \mu^2}{\sqrt{\lambda}^5} + \frac{3}{\lambda^2} \frac{\mu^3}{\lambda^2} + \left( \frac{3}{0} \frac{3}{0} \frac{3}{0} \frac{3}{0} \frac{3}{0} \frac{3}{0} \right) \frac{\mu^4}{\sqrt{i\varepsilon}^3 \sqrt{\lambda}^5} + \dots \\
\alpha_3 &= -\frac{(i\varepsilon)^2 \mu^3}{\lambda^2} + \frac{4}{\sqrt{\lambda}^5} \frac{\mu^4}{\sqrt{\lambda}^5} + \left( \frac{4}{0} \frac{4}{0} \frac{4}{0} \frac{4}{0} \frac{4}{0} \frac{4}{0} \frac{4}{0} \right) \frac{\mu^5}{i\varepsilon \lambda^3} + \dots
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\alpha\beta &= \frac{0}{\frac{1}{6}f_4} \frac{\mu^2}{(i\varepsilon)^2 \lambda^2} + \left( \frac{2}{0} \frac{2}{0} \right) \frac{\mu^3}{\sqrt{i\varepsilon}^3 \sqrt{\lambda}^3} + \left( \frac{2}{0} \frac{2}{0} \frac{2}{0} \frac{2}{0} \frac{2}{0} \frac{2}{0} \frac{2}{0} \frac{2}{0} \frac{2}{0} \frac{2}{0} \right) \frac{\mu^4}{(i\varepsilon)^5 \lambda^3} + \dots \\
\alpha^2\gamma &= \left( \frac{0}{\frac{1}{36}f_6f_4} \frac{0}{\frac{1}{4}f_4f_2} \frac{0}{\frac{1}{6}f_4^2f_2} \right) \frac{\mu^4}{\sqrt{i\varepsilon}^4 \sqrt{\lambda}^5} + \dots \\
\alpha^3\delta &= \left( \frac{0}{\frac{1}{276}f_6^2f_4} \frac{0}{\frac{1}{12}f_6f_4^2f_2} \frac{0}{\frac{1}{18}f_6f_4^2f_2^2} \frac{0}{\frac{1}{8}f_4^4f_2} \frac{0}{\frac{1}{2}f_4^3f_2^2} \frac{0}{\frac{1}{4}f_4^4f_2} \frac{0}{\frac{1}{6}f_4^2f_2^3} \right) \frac{\mu^6}{(i\varepsilon)^7 \lambda^5} + \dots
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\beta &= \frac{0}{\sqrt{i\varepsilon}^5 \sqrt{\lambda}^3} \frac{\mu^2}{\sqrt{\lambda}^3} + \left( \frac{0}{0} \frac{0}{0} \right) \frac{\mu^3}{(i\varepsilon)^3 \lambda^2} + \left( \frac{0}{0} \frac{0}{0} \frac{0}{0} \frac{0}{0} \frac{0}{0} \frac{0}{0} \frac{0}{0} \frac{0}{0} \frac{0}{0} \frac{0}{0} \right) \frac{\mu^4}{\sqrt{i\varepsilon}^4 \sqrt{\lambda}^5} + \dots \\
\gamma &= \frac{0}{\sqrt{i\varepsilon}^4 \sqrt{\lambda}^5} \frac{\mu^4}{\sqrt{\lambda}^5} + \dots ; \quad \delta = \frac{0}{\sqrt{i\varepsilon}^4 \sqrt{\lambda}^5} \frac{\mu^6}{\sqrt{\lambda}^5} + \dots
\end{aligned}$$

Abb. 1.

eine  $s$ -fache identische Verbindung zwischen zwei Punkten besteht. Die Graphen sollen nur einen Zahlenwert tragen, die Dimension ergibt sich bei der  $n$ -ten Ordnung der Entwicklung ( $n$  innere Linien) zu  $(\mu/i\varepsilon)^n \cdot (1/\sqrt{i\varepsilon} \lambda^{n+1})$ .

In Abb. 1<sup>10</sup> sind die Graphen so geordnet, daß die Graphen von  $\alpha_k$  ein  $\delta_{t_1t_2}^{(2k)}$  haben. Sind  $t_1$  und  $t_2$  durch mehrere Linien verknüpft, trägt der Graph zu mehreren  $\alpha_k$  bei; die einzelnen Beiträge sind mit einem Index versehen worden. Bei dieser Anordnung läßt sich die FOURIER-Transformation sofort durchführen, im  $\lim \varepsilon \rightarrow 0$  wird:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \delta_{t_1t_2}^{(2k)} e^{-i\omega t} dt \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \varepsilon^{2k+1} \delta^{(2k)}(t) e^{-i\omega t} dt = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \varepsilon (i\varepsilon \omega)^{2k};$$

<sup>10</sup> Herrn Dr. KAISER danke ich für eine Idee, wie man sich überzeugen kann, daß man auch wirklich alle Graphen für  $\alpha_0$  in einer bestimmten Ordnung gefunden hat. Dazu setze man die Momente  $M_{2n}=1$  und erhält für  $\alpha_0$ , wenn man alle Graphen mit dem richtigen Gewicht nimmt,

$$\alpha_0 = \frac{2^0}{0!} i\varepsilon + \frac{2^1}{1!} \mu + \frac{2^2}{2!} \frac{\mu^2}{i\varepsilon} + \frac{2^3}{3!} \frac{\mu^3}{(i\varepsilon)^2} + \frac{2^4}{4!} \frac{\mu^4}{(i\varepsilon)^3} + \dots$$

und wir erhalten somit folgenden Ausdruck

$$\sqrt{2} \pi i \tilde{\chi}(\omega) = \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k \omega^{2k}. \quad (\text{III})$$

### 3. Numerische Berechnung

Wir haben  $\tilde{\chi}(\omega)$  wieder als zweifach unendliche Reihe geschrieben; die Koeffizienten  $\alpha_k$  sind nämlich ihrerseits unendliche Reihen in  $\mu(i^3 \varepsilon^3 \lambda)^{-1/2}$ . Aus diesen Reihen von Graphen können die  $\alpha_k$  näherungsweise berechnet werden. Beschränkt man sich jeweils auf das 1. Glied bei den  $\alpha_k$ , ergibt sich folgender Näherungsausdruck<sup>7</sup>, welcher im Falle des harmonischen Oszillators schon exakt wäre:

$$\sqrt{2} \pi i \tilde{\chi}(\omega) \approx -\frac{\sqrt{i \varepsilon}}{\sqrt{\lambda}} + \frac{i \varepsilon}{\lambda} \mu \omega^2 + \frac{\sqrt{i \varepsilon^3}}{\lambda} \mu^2 \omega^4 + \dots = \frac{0,388 (\sqrt{i \varepsilon / \lambda})}{1 - 0,388 (\sqrt{i \varepsilon / \lambda}) \mu \omega^2}.$$

Der Pol dieser Summe ist aber komplex und  $\varepsilon$ -abhängig. In unserem quantenmechanischen Modell ist es aber auch nicht richtig, nur über diese Graphen zu summieren, da sie mit  $\varepsilon$  gegen Null gehen und nichts zu  $\tilde{\chi}(\omega)$  beitragen. Man muß sich ein Verfahren überlegen, das gestattet, alle Graphen zu erfassen und physikalisch sinnvolle, d. h.  $\varepsilon$ -unabhängige und reelle Approximationen für die Pole der Zweipunktfunktion liefert. Wir werden also versuchen, die  $\alpha_k$  der Formel (III) so zu bestimmen, daß sie nicht mehr von  $\varepsilon$  abhängen. Doch vorher wollen wir diese noch umformen, wodurch die Rechnung wesentlich vereinfacht wird. Die  $\alpha_k$  lassen sich nämlich, wie aus Abb. 1 ersichtlich ist, ausreduzieren (siehe<sup>7</sup>):

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= \alpha, \\ \alpha_1 &= \mu \alpha^2 + \mu \alpha \beta, \\ \alpha_2 &= \mu^2 \alpha^3 + \mu^2 \cdot 2 \alpha^2 \beta + \mu^2 \alpha^2 \gamma, \\ \alpha_3 &= \mu^3 \alpha^4 + \mu^3 \cdot 3 \alpha^2 \beta + \mu^3 \cdot 2 \alpha^3 \gamma + \mu^3 \alpha^2 \beta^2 + \mu^3 \alpha^3 \delta. \end{aligned}$$

Für  $\alpha = \alpha_0$  ergibt sich:

$$\begin{aligned} \alpha &= 0,33798912 \frac{\sqrt{i \varepsilon}}{\sqrt{\lambda}} + 0,0927099 \frac{\mu}{i \varepsilon \lambda} - 0,021827 \frac{\mu^2}{\sqrt{i \varepsilon^5} \sqrt{\lambda^3}} \\ &\quad + 0,008595 \frac{\mu^3}{(i \varepsilon)^4 \lambda^2} - 0,004048 \frac{\mu^4}{\sqrt{i \varepsilon^{11}} \sqrt{\lambda^5}} + \dots \end{aligned} \quad (\text{IV})$$

Führen wir hier den  $\lim \varepsilon \rightarrow 0$  aus, divergieren fast alle Glieder der Reihe. Deshalb müssen wir sie, bevor wir  $\varepsilon$  gegen Null gehen lassen, geeignet umformen. Wir betrachten die Reihe

$$\begin{aligned} \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{i^2 \varepsilon^2}{\mu} A_{\nu} \left[ \left( 1 + \sqrt{\frac{\mu^2}{i^3 \varepsilon^3 \lambda}} \right)^{4/3\nu} - 1 \right] &= \frac{4}{3} A_1 \frac{\sqrt{i \varepsilon}}{\sqrt{\lambda}} + \left( \frac{2}{9} A_1 + \frac{2}{3} A_2 \right) \frac{\mu}{i \varepsilon \lambda} + \left( -\frac{4}{81} A_1 + \frac{4}{9} A_3 \right) \frac{\mu^2}{\sqrt{i \varepsilon^5} \sqrt{\lambda^3}} \\ &\quad + \left( \frac{5}{243} A_1 - \frac{1}{9} A_2 + \frac{1}{3} A_4 \right) \frac{\mu^3}{(i \varepsilon)^4 \lambda^2} + \left( -\frac{8}{729} A_1 + \frac{4}{15} A_5 \right) \frac{\mu^4}{\sqrt{i \varepsilon^{11}} \sqrt{\lambda^5}} + \dots \end{aligned} \quad (\text{V})$$

Die linke Seite stellt im  $\lim \varepsilon \rightarrow 0$  die endliche Größe  $\sum_{\nu=1}^{\infty} A_{\nu} \sqrt[3]{\mu/\lambda^2}$  dar, die rechte ist gleich  $\alpha$  nach dem Koeffizientenvergleich

$$\frac{4}{3} A_1 = 0,33798912; \quad \frac{2}{9} A_1 + \frac{2}{3} A_2 = 0,0927099; \quad -\frac{4}{81} A_1 + \frac{4}{9} A_3 = -0,021827;$$

usw., woraus sich die  $A_{\nu}$  berechnen lassen, und wir erhalten:

$$\alpha = (0,253492 + 0,054568 - 0,020946 + 0,028327 - 0,004749 \pm \dots) \sqrt[3]{\frac{\mu}{\lambda^2}}. \quad (\text{VI})$$

Hier erhebt sich natürlich die Frage nach der Konvergenz dieses Verfahrens, darauf soll aber weiter unten noch eingegangen werden.

Für  $\alpha_1$  könnten wir das Quadrat einer solchen Reihe ansetzen und wieder die Koeffizienten systematisch bestimmen, wesentlich einfacher ist es aber, die irreduziblen Graphen nur aufzusummieren.

Für  $\beta$  ergibt sich nach Berechnung der einzelnen Graphen:

$$\beta = 0,00423837 \frac{\mu^2}{\sqrt{i \varepsilon^5} \sqrt{\lambda^3}} - 0,00515406 \frac{\mu^3}{(i \varepsilon)^4 \lambda^2} + 0,0040461 \frac{\mu^4}{\sqrt{i \varepsilon^{11}} \sqrt{\lambda^5}} \mp \dots$$

Durch Koeffizientenvergleich mit einer zu (V) analogen Reihe

$$\sum_{\nu=3}^{\infty} \frac{i^2 \varepsilon^2}{\mu} B_{\nu} \left[ \left( 1 + \sqrt{\frac{\mu^2}{i^3 \varepsilon^3 \lambda}} \right)^{4/3\nu} - 1 \right] = \frac{4}{9} B_3 \frac{\mu^2}{\sqrt{i \varepsilon^5} \sqrt{\lambda^3}} + \frac{1}{3} B_4 \frac{\mu^3}{(i \varepsilon)^4 \lambda^2} + \frac{4}{15} B_5 \frac{\mu^4}{\sqrt{i \varepsilon^{11}} \sqrt{\lambda^5}} + \dots$$

finden wir den im  $\lim \varepsilon \rightarrow 0$  endlichen Ausdruck:

$$\beta = \sum_{\nu=3}^{\infty} B_{\nu} \sqrt[3]{\frac{\mu}{\lambda^2}} = (0,009536 - 0,015462 + 0,015173 \pm \dots) \sqrt[3]{\frac{\mu}{\lambda^2}},$$

ebenso für

$$\gamma = 0,000196469 \frac{\mu^4}{\sqrt{i \varepsilon^{11}} \sqrt{\lambda^5}} \mp \dots$$

mit

$$\sum_{\nu=5}^{\infty} \frac{i^2 \varepsilon^2}{\mu} \Gamma_{\nu} \left[ \left( 1 + \sqrt{\frac{\mu^2}{i^3 \varepsilon^3 \lambda}} \right)^{4/3\nu} - 1 \right] = \frac{4}{15} \Gamma_5 \frac{\mu^4}{\sqrt{i \varepsilon^{11}} \sqrt{\lambda^5}} + \dots :$$

$$\gamma = \sum_{\nu=5}^{\infty} \Gamma_{\nu} \sqrt[3]{\frac{\mu}{\lambda^2}} = (0,000736760 \pm \dots) \sqrt[3]{\frac{\mu}{\lambda^2}}$$

und für

$$\delta = 0,000009107 \frac{\mu^6}{\sqrt{i \varepsilon^{17}} \sqrt{\lambda^7}} \pm \dots = \frac{4}{21} \Delta_7 \frac{\mu^6}{\sqrt{i \varepsilon^{17}} \sqrt{\lambda^7}} + \dots :$$

$$\delta = \sum_{\nu=7}^{\infty} \Delta_{\nu} \sqrt[3]{\frac{\mu}{\lambda^2}} = (0,00004781 \pm \dots) \sqrt[3]{\frac{\mu}{\lambda^2}}.$$

Wenn wir so die  $\alpha_k$  genügend genau berechnet haben, können wir die  $\omega_{n0}$  und  $|x_{n0}|^2$  durch Vergleich mit der am Anfang angegebenen Formel (I):

$$\alpha_0 = 2 \left( \frac{|x_{10}|^2}{\omega_{10}} + \frac{|x_{30}|^2}{\omega_{30}} + \frac{|x_{50}|^2}{\omega_{50}} + \dots \right),$$

$$\alpha_1 = 2 \left( \frac{|x_{10}|^2}{\omega_{10}^3} + \frac{|x_{30}|^2}{\omega_{30}^3} + \frac{|x_{50}|^2}{\omega_{50}^3} + \dots \right) \quad (\text{VII})$$

usw. unter Vernachlässigung höherer Glieder bestimmen. Wir wollen nun die Übergangsfrequenzen und -wahrscheinlichkeiten in den niedrigsten Näherungen aus dem Gleichungssystem (VII) berechnen. Da  $\tilde{\chi}(\omega)$  sowohl in (I) als auch in (III) als doppelt unendliche Reihe dargestellt ist, müssen wir auf zwei Arten nähern: Es werden in (I) nur endlich viele Pole berücksichtigt und in (III) werden die  $\alpha_k$  nur bis zu einer endlichen Ordnung in  $\mu(i^3 \varepsilon^3 \lambda)^{-1/2}$  berechnet. Systematisch können wir so vorgehen, daß wir die  $\alpha_k$  in (III) bis zu einer bestimmten Ordnung berechnen, so viele Pole in (I) nehmen, wie in der bestimmten Ordnung berechnet werden können und diese aus der doppelten Anzahl der Gleichungen (VII) für die  $\alpha_k$  ermitteln. So haben wir in der ersten Ordnung nur einen Beitrag zu  $\alpha$  und können nur den ersten Pol berücksichtigen, erhalten also als erste Näherung aus (VI):

$$2 \frac{|x_{10}|^2}{\omega_{10}} \approx \alpha_0 = \alpha \approx 0,253492 \sqrt[3]{\frac{\mu}{\lambda^2}},$$

$$2 \frac{|x_{10}|^2}{\omega_{10}^3} \approx \alpha_1 \approx \mu \alpha^2 \approx (0,253492)^2 \sqrt[3]{\frac{\mu^5}{\lambda^4}}.$$

Der Zahlenfaktor ergibt sich aus  $\frac{3}{4} M_2$ , und somit wird die erste Näherung

$$\omega_{10} = \sqrt[3]{\frac{\alpha_0}{\alpha_1}} = 1,986 \sqrt[3]{\frac{\lambda}{\mu^2}};$$

$$|x_{10}|^2 = \frac{1}{2} \alpha_0 \omega_{10} = 0,2517 \sqrt[3]{\frac{1}{\mu \lambda}}.$$

In der zweiten Näherung haben wir nach (VI):

$$2 \frac{|x_{10}|^2}{\omega_{10}} \approx \alpha \approx 0,3081 \sqrt[3]{\frac{\mu}{\lambda^2}},$$

$$2 \frac{|x_{10}|^2}{\omega_{10}^3} \approx \mu \alpha^2 \approx (0,3081)^2 \sqrt[3]{\frac{\mu^5}{\lambda^4}}$$

und daraus

$$\omega_{10} = 1,802 \sqrt[3]{\frac{\lambda}{\mu^2}}; \quad |x_{10}|^2 = 0,2776 \sqrt[3]{\frac{1}{\mu \lambda}}.$$

Wie weit müssen wir gehen, um den nächsten Pol zu erhalten? Da wir vier Unbekannte  $\omega_{10}$ ,  $|x_{10}|^2$ ,  $\omega_{30}$  und  $|x_{30}|^2$  bestimmen wollen, brauchen wir vier Gleichungen: für  $\alpha_0$ ,  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  und  $\alpha_3$ . In der Bestimmungsgleichung für  $\omega_{30}$  tritt aber schon ein  $\delta$  auf,

dieses beginnt erst mit der 7. Ordnung. Deshalb müssen wir  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  und  $\delta$  bis zur 7. Ordnung berechnen. Es ist auch einleuchtend, daß wir diese vier Größen zur Bestimmung von den vier Unbekannten brauchen. Daß wir  $\omega_{10}$  und  $|x_{10}|^2$  oben lediglich aus  $\alpha$  bestimmen konnten, liegt daran, daß es noch die Vertauschungsrelation gibt<sup>11</sup>:

$$\frac{1}{\mu} = 2(\omega_{10}|x_{10}|^2 + \omega_{30}|x_{30}|^2 + \omega_{50}|x_{50}|^2 + \dots). \quad (\text{VIII})$$

Diese Formel könnten wir auch als erste des Gleichungssystems (VII) bzw. des folgenden Gleichungssystems schreiben. Aber ihre Glieder konvergieren nicht allzu rasch. So lösen wir in der 7. Näherung

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= \alpha & \approx 2 \left( \frac{|x_{10}|^2}{\omega_{10}} + \frac{|x_{30}|^2}{\omega_{30}} \right), \\ \alpha_1 &= \mu \alpha^2 + \mu \alpha \beta & \approx 2 \left( \frac{|x_{10}|^2}{\omega_{10}^3} + \frac{|x_{30}|^2}{\omega_{30}^3} \right) \\ \alpha_2 &= \mu^2 \alpha^3 + \mu^2 \cdot 2 \alpha^2 \beta + \mu^2 \alpha^2 \gamma & \approx 2 \frac{|x_{10}|^2}{\omega_{10}^5} \\ \alpha_3 &= \mu^3 \alpha^4 + \mu^3 \cdot 3 \alpha^3 \beta + \mu^3 \cdot 2 \alpha^3 \gamma + \mu^3 \cdot \alpha^2 \beta^2 + \mu^3 \alpha^3 \delta & \approx 2 \frac{|x_{10}|^2}{\omega_{10}^7}, \end{aligned}$$

durch

$$\begin{aligned} \omega_{10}^2 &= \frac{\alpha_2}{\alpha_3}; & |x_{10}|^2 &= \frac{1}{2} \alpha_2 \sqrt[3]{\frac{\alpha_2}{\alpha_3}}; \\ \omega_{30}^2 &= \frac{\alpha_0 - \alpha_2^3/\alpha_3^2}{\alpha_1 - \alpha_2^2/\alpha_3} \approx \frac{1}{\alpha_3} \frac{\alpha^4(\alpha\gamma - \beta^2)\mu^2}{\alpha^2\delta + \beta^3 - 2\alpha\beta\gamma}; & |x_{30}|^2 &\approx \frac{1}{2} \omega_{30} \frac{1}{\alpha_3^2} \alpha^7(\alpha\gamma - \beta^2)\mu^6. \end{aligned}$$

Diese Ausdrücke schätzen wir ab, indem wir  $\alpha$ ,  $\beta$  und  $\gamma$  nicht bis zur 7. Ordnung berechnen, sondern die oben bis zur 5. Ordnung berechneten Werte einsetzen.

Wir erhalten:

$$\begin{aligned} \omega_{10} &= 1,766 \sqrt[3]{\frac{\lambda}{\mu^2}}; & |x_{10}|^2 &= 0,2776 \sqrt[3]{\frac{1}{\mu\lambda}}; \\ \omega_{30} &= 10,56 \sqrt[3]{\frac{\lambda}{\mu^2}}; & |x_{30}|^2 &= 0,002032 \sqrt[3]{\frac{1}{\mu\lambda}}. \end{aligned} \quad (\text{IX})$$

Analog können Gleichungssysteme für höhere Näherungen aufgestellt werden. Zum Vergleich errechnete HEISENBERG mit der neuen TAMM-DANCOFF-Methode<sup>3</sup> in erster und zweiter Näherung ähnliche Werte. Die genauen Werte, die mit elektronischen Rechenmaschinen aus der SCHRÖDINGER-Gleichung berechnet wurden, sind<sup>1-3</sup>:

$$\begin{aligned} \omega_{10} &= 1,72566 \sqrt[3]{\frac{\lambda}{\mu^2}}; & |x_{10}|^2 &= 0,28650 \sqrt[3]{\frac{1}{\mu\lambda}}; \\ \omega_{30} &= 6,66775 \sqrt[3]{\frac{\lambda}{\mu^2}}; & |x_{30}|^2 &= 0,0008364 \sqrt[3]{\frac{1}{\mu\lambda}}. \end{aligned}$$

Wir sehen daran, daß es uns gelungen ist, die Übergangsfrequenzen und -wahrscheinlichkeiten so zu bestimmen, daß sie nicht mehr komplex und  $\varepsilon$ -abhängig sind. Die Approximation für den ersten Pol

in (IX) ist schon recht gut, während der zweite Pol zunächst nur größenordnungsmäßig richtig erscheint. Es kommt hier vorerst nicht so sehr darauf an, die schon gut bekannten Werte für den anharmonischen Oszillator noch einmal zu berechnen, sondern, daß die Rechnung durchweg in einem mehrzeitigen Formalismus durchgeführt werden kann und sich ein funktionales Integral von nicht-GAUSSSchem Typ auswerten läßt. Zum Schluß soll noch etwas zum kritischen Punkt gesagt werden: Konvergiert dieses Verfahren? Es wurden bei der Berechnung mehrere Male unendliche Reihen umgeordnet. Zu einer strengen mathematischen Begründung dieser Prozeduren wäre es nötig, die absolute Konvergenz der Reihen im Gitterraum zumindest in einem gewissen  $\varepsilon$ -Intervall zu zeigen, von dem man aus analytisch fortsetzen kann. Ein Beweis der Konvergenz ist aber sehr schwer, ähnlich wie in der Störungstheorie treten in höheren Ordnungen zu viele Graphen auf, und man kann sie nicht abschätzen.

Wir können in unserem Modell nur die ersten Glieder berechnen und die Anfangsglieder der Reihen (IV) und (VI) betrachten und stellen fest, daß diese alternieren und zu konvergieren scheinen. Für die Untersuchung der Konvergenzgeschwindigkeit müßte der weitere Verlauf dieser Reihen studiert werden.

<sup>11</sup> W. HEISENBERG, Z. Phys. 33, 879 [1926].

## 4. Weitere Probleme

Es sollte auch möglich sein,

$$\langle \psi_0 | x^2 | \psi_0 \rangle = \chi(t_1, t_2) |_{t_1=t_2} = \chi(0)$$

zu berechnen. Es ist gelungen, die FOURIER-Transformierte  $\tilde{\chi}(\omega)$  als Potenzreihe in  $\omega^2$  darzustellen:

$$\sqrt{2\pi} i \tilde{\chi}(\omega) = \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k \omega^{2k}.$$

Wollte man aus diesen  $\alpha_k$  das  $\langle \psi_0 | x^2 | \psi_0 \rangle$  berechnen, würde man eine Summe über lauter  $\delta$ -artige Singularitäten haben. Deshalb muß in den Gitterraum zurückgegangen werden. Zur Berechnung von  $\chi(0)$ ,  $\chi'(0)$ , ...,  $\chi^{(n)}(0)$  ist ein anderes Graphenschema geeigneter, welches sich sofort ergibt, wenn die Entwicklung der Zweipunktfunktion nach dem kinetischen Teil von  $L$  dargestellt wird (II) und nicht nach Differenzen des KRONECKER-Symbols  $\delta_{t_1 t_2}^{(2n)}$  geordnet wird, sondern nach KRONECKER-Symbolen  $\delta_{t_1, t_2}, \delta_{t_1, t_2 \pm \varepsilon}, \dots, \delta_{t_1, t_2 \pm n\varepsilon}$ . Dieses ist in Abb. 2 dargestellt. Dabei bedeuten die Kombinationsgrößen  $k_v$ :

$$\begin{aligned} k_2 &= M_2 &= 0,338 \frac{1}{\sqrt{i\varepsilon\lambda}}, \\ k_4 &= M_4 - k_2^2 &= 0,136 \frac{1}{i\varepsilon\lambda}, \\ k_6 &= M_6 - 3k_4 k_2 - k_2^3 &= 0,077 \frac{1}{\sqrt{i\varepsilon\lambda^3}}, \end{aligned}$$

$$k_8 = M_8 - 4k_6 k_2$$

$$-3k_4^2 - 6k_4 k_2^3 - k_2^4 = 0,047 \frac{1}{(i\varepsilon\lambda)^2},$$

$$k_{10} = M_{10} - 5k_8 k_2 - 10k_6 k_6 - 10k_6 k_2^2$$

$$-15k_4^2 k_2 - 10k_4 k_2^3 - k_2^5 = 0,022 \frac{1}{\sqrt{i\varepsilon\lambda^5}}.$$

Sie entstehen, indem wieder alle Bedeckungen der Gitterpunkte abgezogen werden, so daß die nicht-zusammenhängenden Teile der „Vakuumgraphen“ unabhängig voneinander laufen können, aber im Gegensatz zu den  $f_v$  bleiben 2 Punkte jeweils von vornherein zusammen. Die Vielfachheit eines Graphs ergibt sich aus der Anzahl der Anordnungsmöglichkeiten der nummerierten inneren Linien, die zu verschiedenen Reihenfolgen der eingeschobenen Zeiten  $t_3, t_4, \dots, t_n$  führen. -2 einer Schleife und +2 einer Linie sind gegen  $(\frac{1}{2})^n$  gekürzt. Für  $\chi(0)$  ergibt sich:

$$\begin{aligned} \chi(0) &= 0,338 \frac{1}{\sqrt{i\varepsilon\lambda}} + 0,136 \frac{1}{i\varepsilon\lambda} \frac{i\mu}{\varepsilon} \\ &+ 0,084 \frac{1}{\sqrt{i\varepsilon\lambda}} \left(\frac{i\mu}{\varepsilon}\right)^2 + 0,052 \frac{1}{(i\varepsilon\lambda)^2} \left(\frac{i\mu}{\varepsilon}\right)^3 \\ &+ 0,031 \frac{1}{\sqrt{i\varepsilon\lambda}} \left(\frac{i\mu}{\varepsilon}\right)^4 + 0,017 \frac{1}{(i\varepsilon\lambda)^3} \left(\frac{i\mu}{\varepsilon}\right)^5 \\ &+ 0,008 \frac{1}{\sqrt{i\varepsilon\lambda^7}} \left(\frac{i\mu}{\varepsilon}\right)^6 + \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \chi(0) &= k_2 + k_4 \frac{i\mu}{\varepsilon} + \frac{1}{2!} \{ k_6 + 2k_4 k_2 \} \left(\frac{i\mu}{\varepsilon}\right)^2 + \frac{1}{3!} \{ k_8 + 6k_4^2 + 6k_6 k_2 \} \left(\frac{i\mu}{\varepsilon}\right)^3 + \\ &+ \frac{1}{4!} \{ k_{10} + 24k_6 k_4 + 12k_6 k_4 + 12k_8 k_2 + 12k_4^2 k_2 + 6k_6 k_2^2 + 2(M_6 M_4 - M_4^2 M_2 - 6M_4 M_2^3 + 6M_2^5) \} \left(\frac{i\mu}{\varepsilon}\right)^4 + \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} -\chi(\pm\varepsilon) &= k_2^2 \frac{i\mu}{\varepsilon} + \frac{1}{2!} 4k_4 k_2 \left(\frac{i\mu}{\varepsilon}\right)^2 + \frac{1}{3!} \{ 6k_6 k_2 + 6k_4^2 + 6k_4 k_2^2 + (M_4^2 - 3M_2^4) \} \left(\frac{i\mu}{\varepsilon}\right)^3 + \\ &+ \frac{1}{4!} \{ 8k_8 k_2 + 24k_6 k_4 + 24k_6 k_2^2 + 24k_4^2 k_2 + 24k_4^2 k_2 + 8(M_6 M_4 - M_4^2 M_2 - 6M_4 M_2^3 + 6M_2^5) \} \left(\frac{i\mu}{\varepsilon}\right)^4 + \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \chi(\pm 2\varepsilon) &= \frac{1}{2!} 2k_2^3 \left(\frac{i\mu}{\varepsilon}\right)^2 + \frac{1}{3!} 18k_4 k_2^2 \left(\frac{i\mu}{\varepsilon}\right)^3 + \frac{1}{4!} \{ 36k_6 k_2^2 + 72k_4^2 k_2 + 24k_4 k_2^3 + 8(M_4^2 - 3M_2^4) M_2 \} \left(\frac{i\mu}{\varepsilon}\right)^4 + \dots \end{aligned}$$

Zeitachse  $\xrightarrow{\quad \varepsilon \quad} t$

Abb. 2.

Durch eine Reihe

$$\begin{aligned} \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{i\varepsilon}{\mu} A_{\nu} \left[ \left( 1 + \sqrt{\frac{\mu^2}{i^3 \varepsilon^3 \lambda}} \right)^{2/3\nu} - 1 \right] \\ = \frac{2}{3} A_1 \frac{1}{\sqrt{i\varepsilon\lambda}} + \left( -\frac{1}{9} A_1 + \frac{1}{3} A_2 \right) \frac{\mu}{(i\varepsilon)^2 \lambda} \\ + \left( \frac{4}{81} A_1 + \frac{2}{9} A_3 \right) \frac{\mu^2}{\sqrt{i\varepsilon} \sqrt[3]{\lambda^3}} + \dots \end{aligned}$$

kann wieder teilweise so aufsummiert werden, daß eine  $\varepsilon$ -unabhängige Reihe entsteht:

$$\chi(0) = (0,51 - 0,24 + 0,27 - 0,38 + 0,16 \\ + 0,25 + 0,03 \pm \dots) \sqrt[3]{1/\mu\lambda}.$$

Der Ausdruck, der größenordnungsmäßig das richtige Resultat ( $\approx 0,28 \sqrt[3]{1/\mu\lambda}$ ) liefert, konvergiert nur sehr schlecht.

Das hier für den Fall des anharmonischen Oszillators durchgeführte Verfahren läßt sich folgendermaßen verallgemeinern:

Für jedes Potential  $V = \lambda x^m$  existiert eine Reihe der Art (V), welche im  $\lim \varepsilon \rightarrow 0$  ein endliches Ergebnis liefert. Denn mit

$$M_n \sim \frac{1}{\sqrt[m]{i\varepsilon\lambda^n}}$$

wird

$$\alpha = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \frac{i\varepsilon}{\sqrt[m]{i\varepsilon\lambda^{2n+2}}} \left( \frac{\mu}{i\varepsilon} \right)^n,$$

welches sich durch die Reihe

$$\sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{i^2 \varepsilon^2}{\mu} C_{\nu} \left[ \left( 1 + \frac{\mu^{\nu}}{(i\varepsilon)^{\nu} \sqrt[m]{i\varepsilon\lambda^{2\nu}}} \right)^{2m/(m+2)\nu} - 1 \right]$$

$\varepsilon$ -unabhängig aufsummieren läßt.

Für zahlreiche wertvolle Diskussionen danke ich den Herren Dr. M. HOFFMANN, Dr. H.-J. KAISER, Dr. A. KÜHNEL und ganz besonders für die Anleitung zu dieser Arbeit Herrn Prof. Dr. G. HEBER.