

# Berechnung der niedrigsten Pole der Zweipunktfunktion in der Quantenmechanik durch funktionale Integration

M. HOFFMANN

Sektion Physik der Universität Leipzig, 701 Leipzig, Linné-Str. 5

(Z. Naturforsch. **24 a**, 871—875 [1969]; eingegangen am 3. März 1969)

The lowest poles of the two-point function in quantum mechanics are calculated for some simple potentials by the method of functional integration, and the results are compared with the results of the usual methods. In most cases there is good agreement. The reasons for the disagreement in other cases are discussed.

In früheren Arbeiten<sup>1, 2</sup> war gezeigt worden, daß man bei der Berechnung von Zweipunktfunktionen in der Quantenmechanik durch funktionale Integration den Übergang vom Gitterraum, in dem die funktionalen Integrale berechnet wurden, zum Kontinuum, zumindest bei einer bestimmten Klasse von eindimensionalen Potentialen, ohne Renormierung vollziehen kann, und daß die Pole der Zweipunktfunktion eng mit den Energieeigenwerten (Übergangsfrequenzen) zusammenhängen. Zur Klärung der Frage, ob das beschriebene Verfahren vernünftige numerische Werte liefert, wird der niedrigste Pol der Zweipunktfunktion für die Potentiale

$$V(x) = \lambda |x|^p, \quad \lambda > 0, \quad p = 1, 5, 6 \quad (1)$$

näherungsweise berechnet und mit den Näherungslösungen von quantenmechanischen Standardverfahren verglichen.

Für die Auswahl der  $p$ -Werte für numerische Rechnungen sind folgende Gesichtspunkte maßgebend: Aus Gründen der Einfachheit wird man zunächst nur ganze  $p$  auswählen, wobei  $p = 1$  strenge quantenmechanische Lösungen zu finden gestattet, mit denen man unsere Näherungswerte vergleichen kann.  $p = 2$  ist in gewisser Weise ein trivialer Fall, denn er entspricht in der Feldtheorie freien Feldern; die auftretenden Funktionalintegrale sind vom Gaußschen Typ. Es ergibt sich, daß von den  $f_r$  nur  $f_1$  von Null verschieden ist, daß somit nur sehr wenige Graphen einen Beitrag liefern und daß die im Verfahren auftretenden Reihen sich aufsummieren lassen. Dadurch braucht man nicht zu nähern und erhält keinen Hinweis auf die Güte der von uns durchgeführten Näherung. Der Fall  $p = 4$  wurde bereits be-

handelt<sup>3</sup>, so daß wir uns außer mit  $p = 1$  noch mit  $p = 5$  und  $p = 6$  beschäftigen wollen.

Wir gehen von der Gleichung (I. 15) aus und berechnen für die genannten Fälle die Graphen in I, Fig. 5, nach (I. 17) und (I. 18), was zu dem Ausdruck (I. 23) und zu entsprechenden Ausdrücken für  $\beta$ ,  $\gamma$  und  $\delta$  führt. Gleichung (I. 16) ist dabei durch

$$\alpha_3 = m^3 \alpha^4 + 3 m^3 \alpha^3 \beta + 2 m^3 \alpha^3 \gamma + m^3 \alpha^2 \beta^2 + m^3 \alpha^3 \delta \quad (2)$$

zu ergänzen. Die Reihen für  $\alpha$ ,  $\beta$  und  $\gamma$  haben wir bis  $j = 5$  berechnet, für die bei  $j = 7$  beginnende Reihe für  $\delta$  geben wir das 1. Glied an. Die in I, Fig. 6, angegebenen Graphen reichen dazu natürlich nicht aus, sondern es werden weitere, insgesamt 43 verschiedene Graphen berechnet. Dazu sind die Gleichungen (I. 11) durch

$$\begin{aligned} f_4 &= M_4 - 28 f_1 f_3 - 35 f_2^2 - 210 f_2 f_1^2 - 105 f_1^4, \\ f_5 &= M_5 - 45 f_4 f_1 - 210 f_3 f_2 - 630 f_3 f_1^2 - 1575 f_2^2 f_1 \\ &\quad - 3150 f_2 f_1^3 - 945 f_1^5 \end{aligned} \quad (3)$$

zu ergänzen.

Wie bereits erwähnt, erfolgt die Berechnung der  $\varphi_n$  im Gitterraum. Das für nichtverschwindende Beiträge erforderliche Zusammenfallen von Gitterpunkten wird durch Kronecker-Symbole, z. B.  $\delta_{t_1 t_2}$ , beschrieben. Dabei gilt

$$\sum_i f(t_i) \delta_{t_i, t_j} = f(t_j). \quad (4)$$

Führt man in Analogie zur  $\delta$ -Funktion die Größe

$$\delta^G(t_i - t_j) = \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon} & \text{für } t_i = t_j \\ 0 & \text{für } t_i \neq t_j, \end{cases}$$

$$\text{d. h.} \quad \delta^G(t_i - t_j) = \frac{1}{\varepsilon} \delta_{t_i, t_j} \quad (5)$$

<sup>1</sup> M. HOFFMANN, Z. Naturforsch. **22 a**, 1198 [1967]; im folgenden I genannt.

<sup>2</sup> M. HOFFMANN, Z. Naturforsch. **22 a**, 1465 [1967]; im folgenden II genannt.

<sup>3</sup> G. RÖPKE, Z. Naturforsch. **22 a**, 860 [1967].



ein, so geht Gl. (4) mit  $\varepsilon = \Delta t$  in

$$\sum_i f(t_i) \delta^G(t_i - t_j) \Delta t = f(t_j) \quad (6)$$

über, wofür man formal ein Integral

$$\sum_i f(t_i) \delta^G(t_i - t_j) \Delta t \rightarrow \int f(t_i) \delta(t_i - t_j) dt_i \quad (7)$$

schreiben kann, da  $\delta^G$  im Gitterraum die gleichen Eigenschaften wie die  $\delta$ -Funktion im Kontinuum hat. Formal kann man das Zusammenfallen von Gitterpunkten also durch  $\delta$ -Funktionen und entsprechende  $\varepsilon$ -Potenzen beschreiben, was aber nicht bedeutet, daß man die Rückkehr zum Kontinuum vollzogen hat. Genaugenommen hat die Berechnung des gesamten Funktionalintegrals (I. 3) im Gitterraum zu erfolgen, so daß die Integrationen in (I. 6) eigentlich Summationen sind und in (I. 8)  $\delta^G$  stehen müßte. Formal läßt sich aber die Berechnung von (I. 6) und (I. 7) mit  $\delta$ -Funktionen und Integrationen vornehmen, wobei man aber bei allen auftretenden Schwierigkeiten an den dahinterstehenden Gitterraum denken muß. So muß z. B. bei der Berechnung von  $\delta(0)$ , bei der Berechnung der Projektionen und immer dann, wenn die Rechnung mit  $\delta$ -Funktionen nicht eindeutig ist und etwa von der Reihenfolge der Integrationen abhängt, in den Gitterraum gegangen werden. Der Übergang zum Kontinuum ( $\varepsilon \rightarrow 0$ ) erfolgt dann später. Bei den formalen Rechnungen mit  $\delta$ -Funktionen und ihren Ableitungen gilt

$$\int f(t') \delta(t' - t) dt' = f(t) \quad (8)$$

und

$$\int f(t') \delta'(t' - t) dt' = -f'(t), \quad (9)$$

wobei  $\delta'(t' - t)$  die Ableitung der  $\delta$ -Funktion nach  $t'$ , und  $f'$  die Ableitung von  $f$  darstellt. Im Gitterraum gelten (5) und (6) für  $\delta^G$ , dessen Ableitungen man entsprechend den Formeln

$$\begin{aligned} \text{a) } f'(x) &= \frac{1}{\varepsilon} [f(x + \varepsilon/2) - f(x - \varepsilon/2)], \\ f''(x) &= \frac{1}{\varepsilon^2} [f(x + \varepsilon) - 2f(x) + f(x - \varepsilon)]; \\ \text{b) } f'(x) &= \frac{1}{\varepsilon} [f(x + \varepsilon) - f(x)], \\ f''(x) &= \frac{1}{\varepsilon^2} [f(x + 2\varepsilon) - 2f(x + \varepsilon) + f(x)]; \\ \text{c) } f'(x) &= \frac{1}{2\varepsilon} [f(x + \varepsilon) - f(x - \varepsilon)] \quad (10) \\ f''(x) &= \frac{1}{4\varepsilon^2} [f(x + 2\varepsilon) - 2f(x) + f(x - 2\varepsilon)] \end{aligned}$$

auf verschiedene Weise definieren kann (höhere Ableitungen entsprechend). Man erhält aus (10)

$$\begin{aligned} \text{a) } \frac{\partial^2}{\partial t_j^2} \delta^G(t_i - t_j) &= \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{1}{\varepsilon} (\delta_{t_i-1, t_j} - 2\delta_{t_i, t_j} + \delta_{t_i+1, t_j}), \\ \text{b) } \frac{\partial^2}{\partial t_j^2} \delta^G(t_i - t_j) &= \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{1}{\varepsilon} (\delta_{t_i-2, t_j} - 2\delta_{t_i-1, t_j} + \delta_{t_i, t_j}), \\ \text{c) } \frac{\partial^2}{\partial t_j^2} \delta^G(t_i - t_j) &= \frac{1}{4\varepsilon^2} \frac{1}{\varepsilon} (\delta_{t_i-2, t_j} - 2\delta_{t_i, t_j} + \delta_{t_i+2, t_j}). \end{aligned} \quad (11)$$

Stellt man gewisse Symmetrieforderungen, daß nämlich auch im Gitterraum eine symmetrische Funktion eine antisymmetrische erste Ableitung besitzen soll, so entfällt die Möglichkeit b). Bei der Berechnung der angegebenen Graphen braucht man immer nur die geradzahlgigen Ableitungen der  $\delta$ -Funktionen, nicht also die erste Ableitung. Da man aber die zweite Ableitung nicht von der ersten losgelöst betrachten kann, entfällt eigentlich auch die Möglichkeit a), da dort zur Bildung der ersten Ableitung die Funktion zwischen den Gitterpunkten gebraucht wird, was bei konsequenter Verwendung des Gitterraumes nicht zulässig ist. Neben der nun übrigbleibenden Möglichkeit c), auf die auch Gl. (I. 13) zurückzuführen ist, gibt es noch die Möglichkeiten

$$f''(x) = \frac{1}{(2n)^2 \varepsilon^2} (f(x + 2n\varepsilon) - 2f(x) + f(x - 2n\varepsilon)) \quad n > 0, \text{ ganz.} \quad (12)$$

Diese verschiedenen Möglichkeiten bringen zunächst verschiedene numerische Faktoren  $(2n)^2$  in die Rechnung, nach dem Grenzübergang vom Gitterraum zum Kontinuum sollten jedoch alle Möglichkeiten zum gleichen Resultat führen. Trotz der gemachten Einwände gegen die Möglichkeit a) ist diese schon mit Erfolg verwendet worden, so daß wir bei den numerischen Rechnungen der folgenden Seiten die Möglichkeiten a) und c) berücksichtigen wollen, wobei die Zahlenwerte zur Möglichkeit a) jeweils in Klammern hinter den zu c) gehörenden Zahlenwerten angegeben werden. In Gl. (I. 13) muß man bei der Möglichkeit a) den Faktor  $2^{2k}$  im Nenner weglassen.

Für die  $f_r$  aus (I. 11) und (3) und die Koeffizienten aus (I. 23) und entsprechend für die  $b_j$ ,  $c_j$  und  $d_j$  erhält man schließlich:

$p=1$	$p=5$	$p=6$
$f_1 = 2 (i \varepsilon \lambda)^{-2}$	0,3243831 $(i \varepsilon \lambda)^{-2/5}$	0,3181 $(i \varepsilon \lambda)^{-1/3}$
$f_2 = 12 (i \varepsilon \lambda)^{-4}$	-0,0978483 $(i \varepsilon \lambda)^{-4/5}$	-0,1009 $(i \varepsilon \lambda)^{-2/3}$
$f_3 = 240 (i \varepsilon \lambda)^{-6}$	0,1573776 $(i \varepsilon \lambda)^{-6/5}$	0,1651 $(i \varepsilon \lambda)^{-3/3}$
$f_4 = 10080 (i \varepsilon \lambda)^{-8}$	-0,5620597 $(i \varepsilon \lambda)^{-8/5}$	-0,5969 $(i \varepsilon \lambda)^{-4/3}$
$f_5 = 725760 (i \varepsilon \lambda)^{-10}$	3,4806780 $(i \varepsilon \lambda)^{-10/5}$	3,7164 $(i \varepsilon \lambda)^{-5/3}$
$a_1 = 2 (2)$	0,3243831 ( 0,3243831)	0,3181 ( 0,3181)
$a_2 = -3 (-12)$	0,0244621 ( 0,0978483)	0,0252 ( 0,1009)
$a_3 = 12 (192)$	-0,0010332 (-0,0165321)	-0,0008 (-0,0142)
$a_4 = -\frac{261}{4} (-4176)$	0,0000811 ( 0,0051876)	0,0000 ( 0,0032)
$a_5 = \frac{6831}{16} (109296)$	-0,0000076 (-0,0019652)	0,0002 (-0,0025)
	(13)	
$b_5 = \frac{3}{4} (12)$	0,0003074 ( 0,0049192)	0,0003 ( 0,0053)
$b_4 = -\frac{87}{8} (-696)$	-0,0002840 (-0,0048080)	0,0000 (-0,0044)
$b_3 = \frac{2007}{16} (32112)$	0,0000268 ( 0,0029094)	-0,0003 ( 0,0009)
$c_5 = \frac{63}{32} (504)$	0,0000010 ( 0,0001939)	0,0000 ( 0,0000)
$d_7 = \frac{1323}{8 \cdot 32} (21168)$	0,0000000 ( 0,0000088)	0,0000 ( 0,0000)

Mit (I. 27) ergeben sich daraus die  $A_v$  und analog die  $B_v$ ,  $C_v$  und  $D_v$ :

$p=1$	$p=5$	$p=6$
$A_1 = 3 (3)$	0,2270682 ( 0,2270682)	0,2121 ( 0,2121)
$A_2 = -8 (-35)$	-0,0630680 ( 0,0396726)	-0,0724 ( 0,0284)
$A_3 = 53 (863)$	0,0256345 (-0,0069132)	0,0249 (-0,0019)
$A_4 = -396 (-25050)$	-0,0323565 ( 0,0112960)	-0,0314 ( 0,0023)
$A_5 = 3200 (820000)$	0,0090212 ( 0,0024843)	0,0090 ( 0,0000)
$B_3 = 3,38 (54)$	0,0006455 ( 0,0103303)	0,0006 ( 0,0106)
$B_4 = -65,25 (-4176)$	-0,0007952 (-0,0134624)	0,0000 (-0,0117)
$B_5 = 942 (240840)$	0,0000938 ( 0,0101829)	-0,0010 ( 0,0030)
$C_5 = 14,76 (3780)$	0,0000035 ( 0,0006786)	0,0000 ( 0,0000)
$D_7 = 54,4 (222264)$	0,0000000 ( 0,0000431)	0,0000 ( 0,0000)
	(14)	

Damit sind  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  und  $\delta$  (vgl. I. 28, 30, 31) näherungsweise ermittelt worden. Den Abbruch der Reihen (I. 28, 30, 31) kann man im Hinblick auf die Reihe (I. 23) begründen, denn letztere ist für positive  $p$  eine Entwicklung nach negativen Potenzen von  $\lambda$ , deren Konvergenz man für große  $\lambda$  voraussetzt, so daß man abbrechen kann, was den Abbruch von (I. 28) zur Folge hat, denn die Zahl der bestimmbareren  $A_v$  bzw.  $B_v$  usw. ist nach (I. 27) gleich der Zahl der verwendeten  $a_j$ ,  $b_j$  usw.

Die Bestimmung von  $\omega_{10} = E_1 - E_0$  ( $\hbar$  wurde durchweg gleich 1 gesetzt) wird nun folgendermaßen vorgenommen:

Der Ausdruck (I. 2) wird nach  $\omega$  entwickelt<sup>3</sup>, was

$$\sqrt{2} \pi i \tilde{\chi}(\omega) = 2 \left( \frac{|x_{10}|^2}{\omega_{10}} + \frac{|x_{30}|^2}{\omega_{30}} + \dots \right) + 2 \left( \frac{|x_{10}|^2}{\omega_{10}^3} + \frac{|x_{30}|^2}{\omega_{30}^3} + \dots \right) \omega^2 + \dots \quad (15)$$

mit  $\langle \psi_0 | x | \psi_n \rangle = x_{n0}$  ergibt. Vergleicht man nun (15) mit (I. 15), so stellt man fest, daß die Koeffizienten von  $\omega^{2k}$  in (15) genau den  $\alpha_k$  aus (I. 15) entsprechen, d. h. es gilt

$$\begin{aligned} 2 \left( \frac{|x_{10}|^2}{\omega_{10}} + \frac{|x_{30}|^2}{\omega_{30}} \right) &= \alpha_0, \\ 2 \left( \frac{|x_{10}|^2}{\omega_{10}^3} + \frac{|x_{30}|^2}{\omega_{30}^3} \right) &= \alpha_1, \\ 2 \frac{|x_{10}|^2}{\omega_{10}^5} &= \alpha_2, \\ 2 \frac{|x_{10}|^2}{\omega_{10}^7} &= \alpha_3. \end{aligned} \quad (16)$$

Die als Koeffizienten von  $\omega^{2k}$  auftretenden Reihen in (15) wurden wegen des Anstiegs der  $\omega_{n0}$  und des Abfalls der  $|x_{n0}|$  für wachsendes  $n$  in geeigneter Weise abgebrochen. Durch Elimination von  $|x_{10}|$  und  $|x_{30}|$  kann man aus (16)  $\omega_{10}$  und  $\omega_{30}$  berechnen. Für  $\omega_{10}$  ergibt sich

$$\omega_{10}^2 = \frac{\alpha_2}{\alpha_3} = \frac{1}{m} \cdot \frac{\alpha + 2\beta + \gamma}{\alpha^2 + 3\alpha\beta + 2\alpha\gamma + \beta^2 + \alpha\delta} \quad (17)$$

mit den numerischen Resultaten

$$\begin{aligned} \omega_{10} &= 0,017 (0,001) \sqrt[3]{\lambda^2/m} \quad \text{für } p=1, \\ &= 2,45 (1,89) \sqrt[7]{\lambda^2/m^5} \quad \text{für } p=5, \\ &= 2,65 (2,03) \sqrt[4]{\lambda/m^3} \quad \text{für } p=6. \end{aligned} \quad (18)$$

Näherungsweise wurde somit  $\omega_{10}$  ermittelt, wobei die betrachtete Näherung eine Näherung in zweierlei Hinsicht ist, denn sowohl die  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$  als auch die Koeffizienten von  $\omega^{2k}$  in (15), die ja unendliche Reihen sind, wurden nach endlich vielen Gliedern abgebrochen.

Neben der in (I. 24) betrachteten Umordnung der Reihe (I. 23) kann man eine weitere Umordnung angeben (vgl. <sup>4</sup>), nämlich

$$\alpha = \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{\bar{A}_\nu m^{\nu-1}}{(i\varepsilon)^{(2/p+1)\nu-2} \lambda^{2\nu/p}} \left( 1 + \frac{m}{(i\varepsilon)^{2/p+1} \lambda^{2/p}} \right)^{2/(2/p+1)-\nu} \quad (19)$$

woraus für  $2/p+1 > 0$  der Grenzübergang  $\varepsilon \rightarrow 0$

$$\alpha = \sum_{\nu=1}^{\infty} \bar{A}_\nu \frac{1}{m^{(2-p)/(2+p)} \lambda^{4/(2+p)}} \quad (20)$$

liefert. Die  $\bar{A}_\nu$  sind wieder durch die  $a_j$  durch

$$\sum_{\nu=1}^j \left( \frac{2/(2/p+1)-\nu}{j-\nu} \right) \bar{A}_\nu = a_j \quad (21)$$

gegeben. Analoge Relationen gelten für  $\beta$ ,  $\gamma$  und  $\delta$ . Der Beweis für (19) erfolgt analog zu dem Beweis für (I. 24). Aus (13) und (21) ergibt sich

<sup>4</sup> G. RÖPKE, Z. Naturforsch. **23 a**, 610 [1968].

$p=1$	$p=5$	$p=6$
$\bar{A}_1 = 2 \quad (2)$	$0,3243831 \quad (0,3243831)$	$0,3181 \quad (0,3181)$
$\bar{A}_2 = -2,33 \quad (-11,33)$	$-0,1145592 \quad (-0,0411730)$	$-0,1339 \quad (-0,0582)$
$\bar{A}_3 = 8,44 \quad (176,44)$	$-0,0267752 \quad (-0,0003391)$	$-0,0280 \quad (-0,0035)$
$\bar{A}_4 = -48,14 \quad (-3746,32)$	$-0,0113654 \quad (0,0023346)$	$-0,0117 \quad (-0,0002)$
$\bar{A}_5 = 229,31 \quad (96102,21)$	$-0,0058478 \quad (0,0022534)$	$-0,0060 \quad (-0,0022)$
$\bar{B}_3 = 0,75 \quad (12)$	$0,0003074 \quad (0,0049192)$	$0,0003 \quad (0,0053)$
$\bar{B}_4 = -9,13 \quad (-668)$	$0,0001991 \quad (0,0029222)$	$0,0005 \quad (0,0036)$
$\bar{B}_5 = 92,10 \quad (29838,67)$	$-0,0000823 \quad (0,0004848)$	$0,0003 \quad (0,0000)$
$\bar{C}_5 = 1,97 \quad (504)$	$0,0000010 \quad (0,0001939)$	$0,0000 \quad (0,0000)$
$\bar{D}_7 = 5,17 \quad (21168)$	$0,0000000 \quad (0,0000088)$	$0,0000 \quad (0,0000)$

(22)

und daraus mit (20) und (17)

$$\begin{aligned}\omega_{10} &= 0,06 \quad (0,003) \sqrt[3]{\lambda^2/m} \quad \text{für } p=1, \\ &= 2,45 \quad (1,84) \sqrt[7]{\lambda^2/m^5} \quad \text{für } p=5, \\ &= 2,67 \quad (1,95) \sqrt[4]{\lambda/m^3} \quad \text{für } p=6.\end{aligned}\quad (23)$$

#### Berechnung der Energiedifferenz $\omega_{10}$ nach herkömmlichen Methoden der Quantenmechanik

Für  $p=1$  wird die Schrödinger-Gleichung zunächst nur für  $x>0$  behandelt, die Lösungen werden dann wegen der Symmetrie des Potentials  $\lambda|x|$  symmetrisch oder antisymmetrisch fortgesetzt, was zu den Eigenwertbedingungen

$$\begin{aligned}J_{1/3}(z) + J_{-1/3}(z) &= 0 \\ J_{2/3}(z) - J_{-2/3}(z) &= 0\end{aligned}\quad J_n: \text{ Bessel-Funktionen} \quad (24)$$

$$\text{mit} \quad E = \frac{1}{2} \sqrt[3]{9 z^2 \cdot \lambda^2/m} \quad (25)$$

führt<sup>5</sup>. Daraus erhält man<sup>6</sup>

$$\omega_{10} = 1,04 \sqrt[3]{\lambda^2/m}. \quad (26)$$

Für die Fälle  $p=5$  und  $p=6$  bereitet die Ermittlung exakter Energieeigenwerte erhebliche Schwierigkeiten, so daß wir diese nur näherungsweise bestimmen können. Es werden die Matrixelemente des Hamilton-Operators mit den Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators berechnet und anschließend wird die Matrix  $H_{nm}$  diagonalisiert, was die Energieeigenwerte liefert. Die Näherung besteht darin, daß nicht die gesamte unendliche Matrix berechnet und diagonalisiert werden kann, sondern nur ein endlicher Teil. Es wurde eine Matrix mit 6 Zeilen und 6 Spalten verwendet. Man erhält

$$\begin{aligned}p=5 & & p=6 \\ \omega_{10} &= 1,86 \sqrt[7]{\lambda^2/m^5} & \omega_{10} = 2,12 \sqrt[4]{\lambda/m^3}.\end{aligned}\quad (27)$$

#### Vergleich der Ergebnisse und Diskussion

Es wurde ein Versuch unternommen, mit Hilfe der Methode der funktionalen Integration Energieeigenwerte in der Quantenmechanik zu berechnen, wobei man ohne Renormierungen auszukommen versuchte. Wir beschränkten uns auf eindimensionale Probleme, die Fällen mit einem selbstwechselwirkenden Feld in der Feldtheorie entsprechen, und hier wiederum auf die symmetrischen Potentiale  $V(x) = \lambda|x|^p$ , durch deren Linearkombination man zu allgemeineren Potentialen gelangen kann. Bei der Berechnung der erforderlichen Integrale zeigte sich zunächst<sup>2</sup>, daß für gewisse diskrete negative  $p$ -Werte Divergenzschwierigkeiten auftreten, für deren Vermeidung es zwar durch Verschiebung der Entwicklungszentren bei den erforderlichen Entwicklungen gewisse Möglichkeiten gibt<sup>7</sup>, die aber nicht verfolgt wurden. Von diesen Schwierigkeiten abgesehen gelang es, für  $p < -2$  und  $p > 0$  durch geeignete Umordnungen der auftretenden Reihen den Grenzübergang  $\varepsilon \rightarrow 0$  zu vollziehen und ohne Renormierungen endliche Ausdrücke zu erhalten. Es wurden zwei verschiedene Umordnungen betrachtet, die sich, zumindest in den genauer untersuchten Fällen  $p=5$  und  $p=6$ , als äquivalent erwiesen [vgl. (18) und (23)]. Für  $-2 \leq p \leq 0$  führten die Umordnungen nicht zum gewünschten Ziel.

Die Umordnungen und der Grenzübergang enthalten noch gewisse in I und <sup>4</sup> diskutierte Freiheiten.

Der Vergleich der durch funktionale Integration gewonnenen Übergangsfrequenzen [Gl. (18) und (23)] mit den Ergebnissen herkömmlicher Methoden [Gl. (26) und (27)] zeigt für  $p=5$  und  $p=6$  sowie für  $p=4$ <sup>3</sup> gute Übereinstimmung, wobei es sich ergibt, daß mehrere Möglichkeiten, Ableitungen im Gitterraum zu definieren, wovon hier zwei verwendet wurden (Zahlen und Zahlen in Klammern dahinter), zu annähernd gleichen Ergebnissen führen, wie man es auch erwartet, da ja im Grenzfall  $\varepsilon \rightarrow 0$  beide Möglichkeiten identisch sind. Die noch verbleibenden Unterschiede dürften bei der Verbesserung der Näherung verschwinden.

Weniger günstig fällt das Ergebnis bei  $p=1$  aus, denn hier ergeben sich Differenzen bezüglich der beiden untersuchten Umordnungen, es traten in ge-

<sup>5</sup> S. FLÜGGE u. H. MARSHALL, Rechenmethoden der Quantenmechanik, Springer, Berlin-Göttingen 1947, S. 60.

<sup>6</sup> Tables of Bessel Functions of Fractional Order, Vol. I, Columbia University Press, New York 1948.

<sup>7</sup> G. HEBER, M. HOFFMANN u. G. RÖPKE, Z. Phys. **190**, 191 [1966].

wissen Näherungen imaginäre Energiedifferenzen auf, es ergeben sich Differenzen bezüglich der Definition der zweiten Ableitung, und es ergeben sich starke Differenzen zu den Ergebnissen herkömmlicher Methoden. Diese Schwierigkeiten scheinen durch das Konvergenzverhalten der Ausgangsreihe (I. 23) [vgl. (13)] bedingt zu sein. Damit haben wir die Frage der Konvergenz des Verfahrens berührt, über die wir, wie so oft in der Physik, z. B. bei der Störungstheorie in der Feldtheorie, nichts aussagen können. Die gemachten Entwicklungen, Umordnungen und Grenzübergänge wurden alle unter der Voraussetzung gemacht, daß sie zulässig sind. Einen Hinweis darauf, ob sie nun wirklich zulässig sind, sollte der oben angestellte Vergleich liefern, der ja für  $p = 4, 5, 6$  recht positiv ausgefallen ist. Das negative Ergebnis bei  $p = 1$  ist nur dadurch erklärbar, daß die Struktur der auftretenden Reihen derartig ist, daß die oben erwähnten Manipulationen eben unzulässig sind.

Für die Werte  $p = 7, 8$  usw. ist wie bei  $p = 4, 5, 6$  eine gute Übereinstimmung der durch funktionale Integration gewonnenen Ergebnisse mit denen her-

kömmlicher Methoden zu erwarten, denn die einzelnen Fälle unterscheiden sich nur durch die  $f_r$ , die für  $p = 7, 8$  usw. größenordnungsmäßig mit denen von  $p = 4, 5, 6$  übereinstimmen und nicht so stark anwachsen wie bei  $p = 1$ . Zusammenfassend kann man sagen, daß die Berechnung von Energieeigenwerten durch funktionale Integration in manchen Fällen recht positiv verlaufen ist, so daß dadurch die Methode, auch in der Feldtheorie, eine Rechtfertigung erfährt. Daß die Methode in anderen Fällen weniger erfolgreich ist, scheint mit der Konvergenzfrage zusammenzuhängen, die damit den Anwendungsbereich der Methode festlegt. Über Konvergenzfrage bzw. Anwendungsbereich läßt sich allgemein leider nichts aussagen, so daß die Übereinstimmung mit den Ergebnissen anderer Methoden oder gegebenenfalls mit dem Experiment über die Anwendbarkeit unserer Methode entscheidet. Das ist ein etwas unbefriedigender Zustand, der jedoch in der Physik häufig vorkommt.

Herrn Prof. G. HEBER und den Herren Dr. A. KÜHNEL und Dr. G. RÖPKE bin ich für ihr Interesse und für interessante Diskussionen zu Dank verpflichtet.