Zeitschrift: Helvetica Physica Acta
Band: 20 (1947)
Heft: III

Artikel: Über die falschen Nullstellen der Eigenwerte der S-Matrix
Autor: Jost, Res
DOI: https://doi.org/10.5169/seals-111803

Nutzungsbedingungen
Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Mehr erfahren

Conditions d'utilisation
L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. En savoir plus

Terms of use
The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. Find out more

Download PDF: 15.07.2025

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, https://www.e-periodica.ch

Über die falschen Nullstellen der Eigenwerte der *S*-Matrix

von **Res Jost.**

(20. I. 1947.)

§ 1. Einleitung.

In mehreren Arbeiten hat W. HEISENBERG[1]) versucht, einen Rahmen für eine zukünftige divergenzfreie Theorie der Elementarteilchen zu geben. Dazu wählt er zunächst unter den Begriffen der gewöhnlichen Quantentheorie solche aus, die mit grosser Wahrscheinlichkeit auch in einer zukünftigen Theorie ihren Sinn behalten. Die entsprechenden Grössen nennt er „beobachtbar". Beobachtbar sind *Streuquerschnitte* (im allgemeinsten Sinn) und die *Energiewerte stationärer Zustände* von Systemen. Weiter glaubt HEISENBERG in der *Streumatrix S* eine Grösse gefunden zu haben, aus der sich einerseits nach einfachen Vorschriften die beobachtbaren Grössen herleiten lassen und die andererseits in einer zukünftigen Theorie eine ähnliche Rolle spielen könnte, wie der Hamiltonoperator in der bisherigen Theorie. Eine allgemeine Vorschrift, um für ein bestimmtes System die Streumatrix anzugeben, ist bisher unbekannt.

In der vorliegenden Note beschäftigen wir uns mit der Vorschrift HEISENBERGS zur Bestimmung der stationären Zustände.

Es ist naheliegend, den Heisenbergschen Formalismus zunächst auf einfache Probleme der gewöhnliche nichtrelativistischen Quantenmechanik anzuwenden. Die neuen Vorschriften sollen dann genau dasselbe liefern, wie die alte Theorie, da kein Grund besteht, an der Richtigkeit der letzteren zu zweifeln. MA[2]) hat zuerst gezeigt, dass sich dabei für die Anwendung der Heisenbergschen Vorschrift zur Bestimmung der stationären Zustände Schwierigkeiten ergeben. Diese Schwierigkeiten sollen hier weiter untersucht werden.

Wir legen unseren Überlegungen ein Zweiteilchensystem zugrunde. Die Teilchenzahl soll erhalten bleiben. Zwischen den Teilchen wirke eine Zentralkraft mit dem Potential $V(r)$. Die Schwerpunktsbewegung wird separiert. Im Raum der Relativkoordinaten führt man Polarkoordinaten ein und separiert die Kugelfunktionen.

---

[1]) W. HEISENBERG, Z. S. f. Phys. **120**, 513 und 673 (1943); C. MØLLER, Kgl. Danske Vidensk. Selskab XXIII, Nr. 1 (1945) und XXIV, Nr. 19 (1946).

[2]) S. T. MA, Phys. Rev. **69**, 668 (1946); **71**, 195 (1947); D. TER HAAR, Physica **12**, 501 (1946); R. JOST, Physica **12**, 509 (1946).

Der Radialanteil der Wellenfunktion sei mit $1/r\ \varphi(r)$ bezeichnet. Beschränkt man sich auf Zustände mit dem Impulsmoment $l = 0$, so lautet die Schrödingergleichung (in einem geeigneten Maßsystem):

$$\varphi'' + k^2 \varphi = V(r)\, \varphi\,. \tag{1}$$

Hierbei ist $|k|$ der Betrag des Radialimpulses und k^2 die Energie. Weiter soll $V(r)$ für grosse r mindestens wie $1/r^2$ verschwinden.

Die im Nullpunkt verschwindende Lösung von (1) zeigt für reelles, positives k das asymptotische Verhalten:

$$\varphi(r) \sim C(e^{-ikr} - S(k) \cdot e^{ikr}) \tag{2}$$

wo C eine uninteressante Konstante ist. e^{-ikr} stellt (bei geeigneter Verfügung über den Zeitfaktor) eine einlaufende Kugelwelle, $-S(k)\, e^{ikr}$ die ihr entsprechende auslaufende Streuwelle dar. $S(k)$ ist eindeutig bestimmt und von der Gestalt $e^{2i\eta}$, wobei $\eta(k)$ die Streuphase bedeutet.

Bezieht man in unserem Problem die S-Matrix auf Kugelwellen, so ist sie diagonal und das oben definierte $S(k)$ ist der Eigenwert zu $l = 0$. Nach Heisenberg-Kramers hat man sich $S(k)$ als analytische Funktion von k zu denken. Für nicht reelle k wird $S(k)$ durch analytische Fortsetzung gewonnen. Offenbar wird Gleichung (2) für komplexe k sinnlos, weil die eine Exponentialfunktion gegen die andere asymptotisch verschwindet[1]).

Die Vorschrift lautet nun: man suche die Nullstellen von $S(k)$ auf der $-i$-Axe. Die Quadrate der zugehörigen k-Werte sind die Energiewerte der stationären Zustände. Diese Vorschrift ist nicht hinreichend. Es gibt im allgemeinen Nullstellen von $S(k)$ auf der $-i$-Axe, denen keine Eigenwerte von (1) entsprechen, denen also keine stationären Zustände zugeordnet werden können. Solche Nullstellen bezeichnen wir mit dem Attribut „*falsch*", die übrigen heissen richtige Nullstellen. Nach Kramers[2]) gilt in den richtigen Nullstellen k_0:

$$-i \left.\frac{dS(k)}{dk}\right|_{k=k_0} > 0\,. \tag{3}$$

Wir nehmen jedoch diese Beziehung nur ernst, wenn die Nullstelle k_0 nicht mit einer Singularität der im nächsten Paragraphen definierten Funktion $f(-k, r)$ zusammenfällt.

An den folgenden Beispielen erkennt man leicht, dass (3) zur Unterscheidung der falschen und richtigen Nullstellen nicht verwendet werden kann.

---

[1]) Whittaker-Watson, Modern Analysis, § 8.32.

[2]) H. A. Kramers, Hand- und Jahrbuch der chemischen Physik **1**, 312 (1938).

§ 2. Die Funktion $f(k, r)$, Beispiele.

Ich möchte in diesem Paragraphen zeigen, dass das Auftreten falscher Nullstellen keineswegs als eine Seltenheit betrachtet werden darf.

Bevor wir zur Behandlung des Exponentialpotentials $V(r) = a \cdot e^{-r}$, an welchem Ma die falschen Nullstellen gefunden hat, übergehen, erweist es sich als zweckmässig, eine Lösung $f(k, r)$ von (1) zu definieren, die sich durch ein einfaches asymptotisches Verhalten auszeichnet. $f(k, r)$ sei asymptotisch eine auf die Amplitude 1 normierte „einlaufende Kugelwelle".

$$f(k, r) \sim e^{-ikr}. \tag{4}$$

Durch (4) ist $f(k, r)$ in der Halbebene $J[k] \leqq 0$ der komplexen k-Ebene eindeutig bestimmt und stellt dort für festes r eine analytische Funktion von k dar. In der oberen Halbebene gewinnen wir $f(k, r)$ durch analytische Fortsetzung nach k. Unter einem Regularitätspunkt k von $f(k, r)$ wollen wir einen Punkt verstehen, in welchem $f(k, r)$ für alle r, die nicht Singularitäten von (1) sind, regulär ist. Wir werden in § 3 sehen, dass es dazu genügt, dass für *ein* r_0 $f(k, r_0)$ und $f'(k, r_0)$ regulär sind. In jedem Regularitätspunkt k ist $f(k, r)$ eine Lösung von (1). $f(k, r)$ und $f(-k, r)$ bilden ein Fundamentalsystem, es sei denn, k oder $-k$ seien Singularitäten. Natürlich kann $f(k, 0)$ im allgemeinen nicht verschwinden, da der Nullpunkt eine Senke ist. Diejenige Lösung, die sich asymptotisch wie $e^{-ikr} - S(k) \cdot e^{ikr}$ verhält (und daher im Nullpunkt verschwindet), bezeichnen wir mit $\varphi(k, r)$. Es gilt:

$$\varphi(k, r) = f(k, r) - \frac{f(k)}{f(-k)} \cdot f(-k, r) \tag{5}$$

wobei der Kürze halber $f(k, 0) = f(k)$ gesetzt ist. Weiter ist

$$S(k) = \frac{f(k)}{f(-k)}. \tag{6}$$

In dieser Darstellung sind richtige und falsche Nullstellen leicht zu trennen. Richtige Nullstellen sind Nullstellen des Zählers, falsche Nullstellen Unendlichkeitsstellen des Nenners (diese brauchen nicht Pole zu sein) auf der $-i$-Axe[1]).

---

[1]) Falls $f(-ip) = 0$, $p > 0$ ist, ist $f(-ip, r)$ nach (4) eine Eigenfunktion von (1), und umgekehrt: Jede Eigenfunktion von (1) ist ein Multiplum von $f(-ip', r)$, $p' > 0$ mit $f(-ip') = 0$.

Von nun an wollen wir, sofern nichts anderes gesagt wird, voraussetzen, dass die richtigen Nullstellen nicht zufälligerweise Singularitäten von $f(-k, r)$ sind.

Um die Lösung $f(k, r)$ von

$$\varphi'' + k^2 \varphi = a \cdot e^{-r} \cdot \varphi \tag{7}$$

zu finden, setzen wir eine Reihe an[1]):

$$f(k, r) = e^{-ikr} \sum_{\nu=0}^{\infty} C_\nu(k) \cdot e^{-\nu r}, \qquad C_0 = 1 \tag{8}$$

was für C_ν auf die Rekursion führt:

$$C_\nu(k) = \frac{a \cdot C_{\nu-1}(k)}{\nu(2\,ik + \nu)} \tag{9}$$

oder

$$C_\nu(k) = \frac{a^\nu}{\nu!} \frac{\Gamma(2\,ik+1)}{\Gamma(2\,ik+\nu+1)} \tag{10}$$

woraus man erkennt, dass die Punkte $k = -(\mu/2)\,i$, $\mu = 1, 2 \ldots$ Pole von $f(-k, r)$ und $f(-k)$ sind, also zu falschen Nullstellen führen.

Die Reihe (8) lässt sich aufsummieren und ergibt für $f(k, r)$:

$$f(k, r) = e^{-ik \log(-a)}\, \Gamma(2ik + 1) \cdot J_{2ik}\left[2\sqrt{-a} \cdot e^{-\frac{r}{2}}\right]. \tag{11}$$

Daraus ersieht man nebenbei, dass eine richtige Nullstelle sehr wohl mit einer Singularität von $f(-k, r)$ zusammenfallen kann. Man hat nur a so zu wählen, dass für ganzzahliges n $J_n(2\sqrt{-a}) = 0$ ist.

In den falschen Nullstellen wird zwar $f(-k, r)$ unendlich, aber $\varphi(k, r)$ aus (5) verschwindet identisch. Dies ist typisch für falsche Nullstellen.

Weiter verifiziert man ohne Mühe, dass für $a > 0$ in der Hälfte der falschen Nullstellen (3) erfüllt ist, wodurch die dort gemachte Bemerkung gerechtfertigt ist.

Entsprechend wie beim Exponentialpotential liegen die Verhältnisse bei

$$V(r) = \sum_{\nu=1}^{\infty} a_\nu\, e^{-\nu r} \tag{12}$$

(konvergent für $Re[r] > 0$).

Den Ansatz (8) übernimmt man. An die Stelle von (9) tritt eine etwas verwickeltere Rekursion. Das Typische aber, die Nenner $\nu(2ik + \nu)$, bleiben und erzeugen im allgemeinen falsche Nullstellen in den Punkten $k = -(\mu/2)\,i$, $\mu = 1, 2, 3 \ldots$.

---

[1]) Ince, Ordinary Differential Equations. New York 1944, S. 381.

Zwei elementar behandelbare Beispiele lauten:

$$V(r) = \alpha \cdot \frac{e^{-r}}{1-e^{-r}}$$

mit

$$f(k) = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{n^2 + 2\,ikn + \alpha}{n\,(2\,ik + n)} \tag{13}$$

und

$$V(r) = \frac{2\,\alpha \cdot e^{-r}}{[1-\alpha \cdot e^{-r}]^2}, \qquad \alpha < 1,$$

$$f(k) = 1 + \frac{2\,\alpha}{1-\alpha} \cdot \frac{1}{2\,ik+1}, \tag{14}$$

$$f(k, r) = e^{-ikr}\left[1 + \frac{1}{2\,ik+1} \cdot \frac{2\,\alpha \cdot e^{-r}}{1-\alpha \cdot e^{-r}}\right].$$

Das letzte Beispiel zeigt, dass bei passender Wahl der a_ν in (12) sehr wohl nur endlich viele falsche Nullstellen auftreten können.

Auch für „quasiperiodische Potentiale" kommt man mit Reihenentwicklungen zum Ziel. Es sei z. B.

$$V(r) = \alpha_1 \cdot e^{-\lambda_1 r} + \alpha_2 \cdot e^{-\lambda_2 r} \tag{15}$$

$$\alpha_i \neq 0 \qquad \lambda_1/\lambda_2 \text{ irrational}.$$

In diesem Fall setzt man als Lösung von (1) an:

$$f(k, r) = e^{-ikr} \sum_{\mu_1=0}^{\infty} \sum_{\mu_2=0}^{\infty} C_{\mu_1 \mu_2}(k) \cdot e^{-(\mu_1 \lambda_1 + \mu_2 \lambda_2) r} \tag{16}$$

$$C_{00} = 1$$

was zur Rekursion:

$$C_{\mu_1 \mu_2}(k) = \frac{\alpha_1 C_{\mu_1-1, \mu_2} + \alpha_2 C_{\mu_1, \mu_2-1}}{(\mu_1 \lambda_1 + \mu_2 \lambda_2)(2\,ik + \mu_1 \lambda_1 + \mu_2 \lambda_2)} \tag{17}$$

mit den Randbedingungen:

$$C_{-1, \mu_2} = C_{\mu_1 -1} = 0, \qquad C_{00} = 1 \tag{17'}$$

führt. Die Rekursion ist lösbar und führt auf eine stark konvergente Reihe für $f(k, r)$, sofern in (17) keiner der Nenner verschwindet. Falsche Nullstellen treten auf in

$$k = -\frac{i}{2}(\mu_1 \lambda_1 + \mu_2 \lambda_2), \; \mu_1, \mu_2 = 0, 1, 2 \ldots; \qquad \mu_1^2 + \mu_2^2 > 0.$$

Setzt man etwa $\alpha = 1$, $\lambda_1 = 1$; $\alpha_2 = \varepsilon$, $\lambda_2 = \sqrt{2}$, so ersieht man durch Vergleich mit Beispiel (7), dass die falschen Nullstellen durch das asymptotische Verhalten von $V(r)$ nicht bestimmt sind, denn es ist ja

$$e^{-r} \sim e^{-r} + \varepsilon \cdot e^{-\sqrt{2}\,r} \qquad \text{für } r \to \infty$$

Weiter werden wir im nächsten Paragraphen ein Verfahren der sukzessiven Approximation angeben, mit welchem man $f(k, r)$ z. B. auch für Potentiale der Gestalt

$$V(r) = \mathfrak{P}_n(r) \cdot e^{-r}, \qquad \mathfrak{P}_n(r): \text{ Polynom } n\text{-ten Grades} \tag{18}$$

bestimmen kann. Es treten in $k = -(i/2)\,\mu$, $\mu = 1, 2 \ldots$ falsche Nullstellen höherer Ordnung auf.

Desgleichen lässt sich für das Yuhawapotential plausibel machen, dass $f(k, r)$ in diesem Fall logarithmische Singularitäten besitzt.

Schliesslich sei noch darauf hingewiesen, dass die Gleichung (1) für *jedes* k, auch für solche in welchen $f(k, r)$ singulär ist, eine Lösung besitzt, die sich asymptotisch wie e^{-ikr} verhält[1]). Diese Verhältnisse sind im Beispiel (7) wohlbekannt. Für $k = (\mu/2)\, i$ treten an Stelle von $f(k, r)$ im wesentlichen Besselsche Funktionen zweiter Art.

§ 3. Allgemeine Eigenschaften der Funktionen $f(k, r)$.

In diesem Paragraphen machen wir der Bequemlichkeit halber die Voraussetzung, dass $V(r)$ der Ungleichung genüge:

$$|\, V(r) \,| < \frac{M}{(r+\varepsilon)^{2+\delta}}, \qquad \varepsilon, \delta > 0. \tag{19}$$

Das Auftreten von Singularitäten in $r = 0$ in (1) hängt ja mit den falschen Nullstellen in keiner Weise zusammen[2]). Man verifiziert aber leicht, dass z. B. die Lösung der Gleichung (I) (siehe unten) durch sukzessive Approximation auch noch anwendbar ist, wenn für $V(r)$ nur gilt: $|\, V(r) \,| < \frac{M}{r(r+\varepsilon)^{1+\delta}}$. Wir führen nun neben $f(k, r)$ noch ein neues Fundamentalsystem wie folgt ein:

$\psi_0(k, r)$ ist bestimmt durch: $\psi_0(k, 0) = 0$, $\psi_0'(k, 0) = 1$
$\psi_1(k, r)$ ist bestimmt durch: $\psi_1(k, 0) = 1$, $\psi_1'(k, 0) = 0$.

Für die verschiedenen Funktionen verifiziert man leicht folgende Integralgleichungen:

$$f(k, r) = e^{-ikr} + \frac{1}{k} \int_r^\infty \sin k(r'-r)\; V(r')\; f(k, r')\, dr' \tag{I}$$

$$\psi_0(k, r) = r + \int_0^r (r - r')\, [V(r') - k^2]\; \psi_0(k, r')\, dr' \tag{II}$$

$$\psi_1(k, r) = 1 + \int_0^r (r - r')\, [V(r') - k^2]\; \psi_1(k, r')\, dr' \tag{III}$$

---

[1]) Dies gilt unter der Voraussetzung, dass sich $V(r)$ asymptotisch in eine Reihe nach $1/r$ entwickeln lässt. W. Sternberg, Math. Ann. **81**, 119 (1920).

[2]) Vgl. die Folgerungen aus dem *Satz*.

*

Alle 3 Integralgleichungen lassen sich in bestimmten k-Gebieten durch sukzessive Approximation lösen, und zwar:

(I) in $J[k] \leqq 0$, indem man setzt:

$$f(k, r) = \sum_{\nu=0}^{\infty} f_\nu(k, r); \qquad f_0(k, r) = e^{-ikr}$$

$$f_{\nu+1}(k, r) = \frac{1}{k} \int_r^\infty \sin k(r' - r)\, V(r')\, f_\nu(k, r')\, dr'$$

(II) und (III) in $|k| < \infty$ durch:

$$\psi_i(k, r) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \psi_{i,\nu}(k, r),$$

$$\psi_{0,0}(k, r) = r \qquad \psi_{1,0}(k, r) = 1$$

$$\psi_{i,\nu+1}(k, r) = \int_0^r (r - r')\,[V(r') - k^2]\, \psi_{i,\nu}(k, r')\, dr'.$$

Mit (19) weist man leicht nach, dass die Reihen und die daraus durch einmalige und zweimalige Ableitung nach r entstehenden Reihen in jedem endlichen r-Bereich und in jedem abgeschlossenen k-Bereich in den Gebieten: $J[k] < 0$ für I und $|k| < \infty$ für II und III gleichmässig konvergieren.

Daraus folgt die Lösungseigenschaft der eben konstruierten Lösungen und weiter, dass $f(k, r)$ in $J[k] < 0$ für festes r regulär analytisch in k ist und auf der reellen Axe endliche Randwerte annimmt und dass $\psi_0(k, r)$ und $\psi_1(k, r)$ in k ganze Funktionen sind.

Aus der letzten Aussage wollen wir noch eine Folgerung ziehen. Zunächst ist es klar, dass die Auszeichnung des Punktes $r = 0$ in den Anfangsbedingungen zu (II) und (III) zufällig ist. Ebenso ist an den Anfangsbedingungen nur typisch, dass sie nicht von k abhängen. Wir haben so den

Satz[1]: Ist $\chi(k, r)$ eine Lösung von (1) und ist in einem Punkt r_0 $\chi(k, r_0)$ und $\chi'(k, r_0)$, unabhängig von k, so ist für jedes r $\chi(k, r)$ eine ganze Funktion von k.

Zusatz: Falls $\chi(k, r_0)$ und $\chi'(k, r_0)$ in einem Gebiet G der komplexen k-Ebene regulär sind, so ist $\chi(k, r)$ für jedes r in G regulär in k.

---

[1]) H. Poincaré, Acta Math. **4**, 215 (1884).

Zum Beweis des Zusatzes beachten wir, dass ein Fundamentalsystem

$$\zeta_0(k, r), \ \zeta_1(k, r) \quad \text{mit} \quad \zeta_0(k, r_0) = \zeta_1'(k, r_0) = 0;$$
$$\zeta_0'(k, r_0) = \zeta_1(k, r_0) = 1$$

aus in k ganzen Funktionen besteht. Nun ist

$$\chi(k, r) = \chi(k, r_0)\, \zeta_1(k, r) + \chi'(k, r_0)\, \zeta_0(k, r)$$

woraus die Behauptung folgt.

Falls aber in k_0 für *ein* beliebiges festes r_0 entweder $\chi(k, r_0)$ oder $\chi'(k, r_0)$ singulär ist, so ist in *jedem* Punkt r entweder $\chi(k, r)$ oder $\chi'(k, r)$ in k_0 singulär.

Wenn wir nun wissen, dass $f(k, r_0)$ und $f'(k, r_0)$ für ein beliebig grosses r_0 in der Umgebung der $+i$-Axe regulär sind, so können keine falschen Nullstellen auftreten, da dann auch $f(k)$ in der Umgebung der $+i$-Axe regulär ist. Ist aber für ein k_0 auf der $+i$-Axe $f(k, r_0)$ oder $f'(k, r_0)$ singulär, so gilt dies auch für $f(k)$ oder $f'(k) = f'(k, 0)$. Es tritt dann im allgemeinen in $-k_0$ eine falsche Nullstelle auf. Eine Ausnahme tritt nur dann auf, wenn $-k_0$ zufällig mit einer richtigen Nullstelle koinzidiert, d. h. wenn $f(-k_0) = 0$ ist. (Vergleiche (21)). Für das Auftreten falscher Nullstellen ist von $V(r)$ nur das Verhalten für $r > r_0$, wo r_0 beliebig gross ist, massgebend. [Mit dem asymptotischen Verhalten von $V(r)$ aber haben die falschen Nullstellen nichts zu tun (Beispiel (15) § 2.)]

Daraus erklärt sich der Erfolg von Abschneideverfahren: wenn man für $r > r_0$ das Potential durch Null ersetzt, können keine falschen Nullstellen auftreten.

Es lässt sich sogar zeigen, dass keine falschen Nullstellen auftreten, wenn für $r > r_0$ $V(r)$ eine rationale Funktion der Gestalt

$$\sum_{\nu=0}^{n-2} a_\nu r^\nu \Big/ \sum_{\nu=0}^{n} b_\nu r^\nu, \qquad b_n \neq 0$$

ist. Mit irgend etwas Physikalischem haben aber derartige Manipulationen nichts zu tun. Deshalb übergehe ich auch den etwas umständlichen Beweis für die letzte Behauptung.

Wesentliche Aussagen ergeben sich aus dem Zusammenhang zwischen $f(k, r)$ und den $\psi_i(k, r)$.

Aus (1) folgt, dass die Wronskysche Determinante für irgendein Paar von Lösungen von r unabhängig ist. Dies gilt im besonderen

von $f(k, r)$ und $f(-k, r)$ und man schliesst aus dem asymptotischen Verhalten leicht, dass:

$$f(k, r)\, f'(-k, r) - f'(k, r)\, f(-k, r) = 2ik \tag{20}$$

Daraus aber:

$$f(k)\, f(-k, r) - f(-k)\, f(k, r) = 2\, ik\, \psi_0(k, r) \tag{21}$$

und

$$f'(-k)\, f(k, r) - f'(k)\, f(-k, r) = 2\, ik\, \psi_1(k, r) \tag{22}$$

wie man durch Ableiten nach r mit (20) und der Definition von ψ_0 und ψ_1 leicht erkennt. Nach (5) ist

$$\varphi(k, r) = -\frac{2\, ik}{f(-k)}\, \psi_0(k, r) \tag{23}$$

und das verschwindet wegen der Regularität von $\psi_0(k, r)$ in k, falls $f(-k)$ unendlich wird. Dies ist aber in den falschen Nullstellen der Fall und umgekehrt: wenn $\varphi\,(k, r)$ für ein k auf der $-i$-Axe identisch in r verschwindet, so liegt für dieses k eine falsche Nullstelle vor.

Die falschen Nullstellen sind also gleichwertig mit dem identischen Verschwinden von $\varphi(k, r)$ für gewisse k auf der negativ-imaginären Axe.

In einer falschen Nullstelle k_0 wird zwar $f(-k_0, r)$ unendlich, aber es ist

$$\lim_{k \to k_0} \frac{f(-k, r)}{f(-k)} = \frac{f(k_0, r)}{f(k_0)} \tag{24}$$

falls nicht gerade $f(k_0) = 0$ ist. Dieses Zusammenfallen einer richtigen Nullstelle mit einer Singularität von $f(-k, r)$ haben wir aber ausgenommen.

Ist nämlich $f(k_0) = 0$, k_0 aber eine Singularität von $f(-k, r)$, so hat man (22) heranzuziehen. Sicher ist $f'(k_0) \neq 0$ da $f(k_0, r)$ nicht identisch verschwinden kann. Weiter ist $f'(-k_0)$ unendlich da sonst $f(-k, r)$ in k_0 regulär wäre. Demnach folgt:

$$\lim_{k \to k_0} \frac{f(-k, r)}{f'(-k)} = \frac{f(k_0, r)}{f'(k_0)}\,. \tag{25}$$

Zu einer eindeutigen Charakterisierung der richtigen Nullstellen durch das asymptotische Verhalten einer im Nullpunkt verschwindenden Lösung von (1): $\tilde{\varphi}(k, r)$, kann man nur gelangen, falls sicher $\tilde{\varphi}\,(k, r)$ auf der $-i$-Axe in r nicht identisch verschwinden

kann. Man spaltet für reelle k $\tilde{\varphi}(k, r)$ auf in einlaufende und auslaufende Kugelwellen:

$$\tilde{\varphi}(k, r) \sim a(k) \cdot e^{-ikr} - b(k) \cdot e^{ikr}$$

$$S(k) = \frac{b(k)}{a(k)} \tag{26}$$

$b(k)$ setzt man analytisch fort. Die Nullstellen von $b(k)$ auf der $-i$-Achse geben Anlass zu stationären Zuständen. Das Nichtverschwinden von $\tilde{\varphi}$ (k, r) lässt sich aber nicht durch allgemeine Forderungen über das asymptotische Verhalten von $\tilde{\varphi}$ (k, r) für reelle k erzwingen.

Ich möchte zum Schluss noch kurz auf einige elementare Eigenschaften der Funktion $f(k)$ zu sprechen kommen, die sich einfach aus (1) und (I) ergeben.

Es sei $J[k] \leqq 0$, dann gilt:

a) $f^*(-k^*) = f(k)$;

b) wegen der Realität von $V(r)$ hat (1) nur reelle Eigenwerte, also $f(k)$ nur Nullstellen auf der $-i$-Axe. In einer solchen Nullstelle $k_0 \neq 0$ gilt:

$$f'(k_0) \cdot \left.\frac{df}{dk}\right|_{k=k_0} = -2\, k_0 \int_0^\infty |f(k_0, r)|^2\, dr.$$

Die Nullstellen sind demnach einfach, da $f'(k_0) \neq 0$ ist;

c) es ist $\lim\limits_{k \to \infty} f(k) = 1$.

Durch (6) und die Eigenschaften a) bis c) ist bei bekannten $S(k)$ $f(k)$ nicht eindeutig bestimmt.

Dagegen lässt sich leicht zeigen, dass durch die Kenntnis der Nullstellen von $f(k)$ in $J[k] \leqq 0$ $f(k)$ eindeutig bestimmt ist (dabei ist die Kenntnis einer ev. Nullstelle ein $k = 0$ samt ihrer „Vielfachheit"[1]) auch erforderlich). Wegen a) bestimmt $S(k)$ nämlich auf der reellen Axe nur die Phase von $f(k)$ resp. den Imaginärteil von $\log f(k)$. Es soll nun neben dem $f(k)$ noch eine zweite Funktion $f_1(k)$ geben, die (6), a), b), c) erfüllt und dieselben Nullstellen hat, wie $f(k)$. Dann ist $f_1(k)/f(k)$ in $J[k] \leqq 0$ beschränkt und nirgends Null. $J[\log f_1(k)/f(k)]$ ist also in $J[k] < 0$ eine reguläre Potentialfunktion und in $J[h] \leqq 0$ beschränkt. Ausserdem verschwindet sie auf der reellen Axe. Nach einem bekannten Satz verschwindet sie also in der ganzen untern Halbebene. Daraus aber folgt, dass $Re\,[\log f_1(k)/f(k)]$ konstant ist und, nach c) den Wert Null hat. Es ist also $f_1(k) = f(k)$.

---

[1]) Eine Nullstelle in $k = 0$ kann ein Verzweigungspunkt sein.

Es stellt sich hier nun die folgende, bisher ungelöste Frage: Man leite aus einem Potential $V(r)$ ein $S(k)$ her. Gibt es dann ein anderes Potential $V_1(r) \not\equiv V(r)$, das zu andern stationären Zuständen führt als $V(r)$, zu dem aber dasselbe $S(k)$ gehört? Nach dem oben Gesagten, würden sich die Funktionen $f(k)$ und $f_1(k)$ unterscheiden.

Es ist möglich, dass eine solche Vieldeutigkeit nicht besteht, dass also $S(k)$ die stationären Zustände eindeutig bestimmt. Nichts deutet aber darauf, dass die Bestimmung der stationären Zustände aus $S(k)$ auf einfache Weise erfolgt.

Zum Schluss möchte ich den Herren Professoren W. Pauli in Zürich, C. Møller und Herrn D. ter Haar in Kopenhagen für das freundliche Interesse danken, das sie dieser Arbeit entgegengebracht haben.

Zürich, Physikalisches Institut der ETH.