Zur Konvergenz der einzeitigen Tamm-Dancoff-Methode beim anharmonischen Oszillator

Von H. STUMPF *, F. WAGNER * und F. WAHL **

(Z. Naturforschg. **19 a**, 1254—1267 [1964]; eingegangen am 13. Mai 1964)

As in the usual quantum field theory, the states, and therefore also the eigenvalue spectrum of an anharmonic oscillator can be characterized by means of the so-called τ-functions, that is the matrix element of the type $\langle 0 \mid q^n \mid j \rangle$. For the calculation of these matrix elements, the equation of motion of the anharmonic oscillator can be used to obtain an infinite set of equations, which define an eigenvalue problem. To solve it a new set of functions, the so-called φ-functions, are introduced by means of a transformation, whose matrix corresponds formally to the WICK rule. An analysis of this infinite system of φ-equations shows that a convergent secular polynomial can be obtained, which exists as a limiting value of the polynomials for the truncated N φ-equation-systems in the limit $N \to \infty$. It is therefore permissible to calculate the eigenvalues of the infinite system in an approximate way from the truncated systems. Such an approximation procedure is the essential content of the so-called TAMM–DANCOFF method. The above mentioned convergence of the determinants therefore provides its justification. The convergence of the eigenvalues of the truncated systems to the exact oscillator values is numerically examined up to $N=20$. The results are satisfactory.

In der neueren Entwicklung der Physik spielen Modellbetrachtungen eine große Rolle: Durch sie werden komplizierte Problemstellungen sowohl physikalischer als auch mathematischer Natur auf gewisse wesentliche Analogievorgänge reduziert und damit einer erfolgreichen Untersuchung zugängig gemacht. So wurde z. B. der harmonische Oszillator von PLANCK, HEISENBERG u. a. als Modell zur Entwicklung der Quantenmechanik und der relativistischen Quantentheorie der freien Felder benutzt. In ähnlicher Weise kann man mit Einschränkung behaupten, daß der anharmonische Oszillator als Modell für die Entwicklung von nichtlinearen Quantenfeldtheorien nützlich ist. Dies wurde von HEISENBERG [1] und von SYMANZIK [2] gezeigt. Auf beide Arbeiten werden wir im Laufe der Untersuchung noch näher eingehen. Um die nötige Aktualität der Untersuchung zu gewährleisten, darf der anharmonische Oszillator *nicht* mit den klassischen Methoden der SCHRÖDINGER-Theorie behandelt werden. Vielmehr muß man der neueren Entwicklung der Feldtheorie gemäß Übergangsmatrixelemente betrachten. Diese werden in der Feldtheorie durch Ausdrücke der Art $\langle \alpha \mid \psi(x_1) \dots \psi(x_n) \mid \beta \rangle$ usw. definiert, wobei $\psi(x)$ der Feldoperator ist, und $\langle \alpha \mid$ bzw. $\mid \beta \rangle$ die Quantenzustände des Feldes charakterisieren. Über die Gründe, die zur Untersuchung derartiger Ausdrücke führen, verweisen wir für den Fall kanonischer Quantisierung auf SYMANZIK [3], für den Fall nichtkanonischer Quantisierung auf STUMPF [4]. Beim anharmonischen Oszillator muß man dann sinngemäß Matrixelemente der Art $\langle \alpha \mid q(t_1) \dots q(t_n) \mid \beta \rangle$ usw. studieren, und aus diesen Matrixelementen physikalische Informationen ableiten. Im Fall eines Systems mit einem Freiheitsgrad, wie es der anharmonische Oszillator darstellt, also das Zustandsspektrum. Das Studium der Übergangsmatrixelemente kann mit verschiedenem Komplikationsgrad ausgeführt werden. Am einfachsten ist die sogenannte einzeitige Theorie. Diese Theorie soll im folgenden für den anharmonischen Oszillator diskutiert und die Ergebnisse dieser Diskussion mit der neuen TAMM–DANCOFF-Methode verglichen werden.

§ 1. Einzeitige τ-Gleichungssysteme

Zur Untersuchung der Quantenzustände des anharmonischen Oszillators gehen wir in Analogie zum feldtheoretischen Verfahren von den Bewegungsgleichungen aus. Diese lauten

$$\dot{q}(t) = p(t), \qquad \dot{p}(t) = -q^3(t). \tag{1}$$

* Max-Planck-Institut für Physik und Astrophysik, München.
** Institut für Theoretische Physik der Universität München.

[1] W. HEISENBERG, Nachr. Gött. Akad. Wiss. **1953**, 111.
[2] K. SYMANZIK, Dissertation, Göttingen 1954.
[3] K. SYMANZIK, Werner Heisenberg und die Physik unserer Zeit, Fr. Vieweg, Braunschweig 1961, 275.
[4] H. STUMPF, Einführung in die Quantenfeldtheorie der Elementarteilchen, Vorlesungsausarbeitung Somm.-Sem. 1963, Universität München.

Bei einer kanonischen Quantisierung werden die $q(t)$ und $p(t)$ als Operatoren betrachtet, die der gleichzeitigen Vertauschungsrelation (mit $\hbar = 1$)

$$i[p(t), q(t)]_{-} = 1 \tag{2}$$

genügen sollen. In diesem Fall folgt unmittelbar durch Integration aus (2) und (1), daß der infinitesimale Operator der Zeittranslation des Systems, die Gesamtenergie H, korrespondenzmäßig dem HAMILTON-Operator der klassischen Theorie entspricht und die Gestalt

$$H(t) \equiv \tfrac{1}{2} p^2(t) + \tfrac{1}{4} q^4(t) + C \equiv H_0(t) + C \tag{3}$$

besitzt, wobei C eine willkürliche Konstante ist. Im Fall einer nichtkanonischen Quantisierung, die hier aber nicht betrachtet werden soll, gilt (3) nicht mehr. Vorläufig beschränken wir uns auf eine Untersuchung mit der kanonischen Vertauschungsrelation (2). Wiederum im Sinne der Feldtheorie soll diese Untersuchung aber nicht im SCHRÖDINGER-Bild, d. h. also mit $H(0)$, sondern im HEISENBERG-Bild, d. h. also mit (1) durchgeführt werden. Es ist aber nützlich, zur Erleichterung der Rechnung im HEISENBERG-Bild gewisse allgemein bekannte Fakten der Quantentheorie des SCHRÖDINGER-Bildes heranzuziehen. Dazu zählt zunächst die Tatsache, daß bei kanonischer Quantisierung die Quantentheorie durch ihr Verhalten auf einem Zeitschnitt völlig festgelegt ist. Dies führt dazu, daß es zunächst ausreicht, im HEISENBERG-Bild einzeitige Matrixelemente der Form

$$\tau_{nm}^{(\alpha,\beta)}(t) = \langle \alpha \,|\, \mathrm{sym}\, q^n(t)\, p^m(t) \,|\, \beta \rangle \begin{pmatrix} n = 0, 1, \dots \\ m = 0, 1, \dots \end{pmatrix} \tag{4}$$

zu betrachten, wobei unter dem Symbol sym die Symmetrisierung des Ausdrucks $q^n p^m$ in den q und p Operatoren zu verstehen ist. Ferner weiß man, daß im SCHRÖDINGER-Bild die Wellenfunktionen des anharmonischen Oszillators allein in der q- oder in der p-Darstellung vollständig beschrieben werden können, und daß es zufolge des HAMILTON-Operators (3), welcher gegen die Paritätsoperation invariant ist, Eigenzustände gerader und ungerader Parität geben muß. Die Eigenzustände gerader Parität z. B. lassen eine Entwicklung der Art

$$|\, 2\gamma \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \sigma_k^{2\gamma}\, q^{2k}(0) \,|\, 0 \rangle \tag{5}$$

in der q-Darstellung zu, jene ungerader Parität eine Entwicklung der Art

$$|\, 2\gamma + 1 \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \sigma_k^{2\gamma+1} q^{2k+1}(0) \,|\, 0 \rangle \,. \tag{6}$$

Analoge Entwicklungen gelten für die p-Darstellung. Selbstverständlich braucht man nur eine der beiden Entwicklungen, um die Eigenzustände zu charakterisieren. Multipliziert man (5) mit $\langle 2\nu \,|$ von links, so folgt

$$\sum_{k=0}^{\infty} \sigma_k^{2\gamma}\, \tau_{2k,0}^{(2\nu,0)}(0) = \delta_{\nu\gamma}\,, \tag{7}$$

woraus abzulesen ist, daß zufolge der Hermitezität der q-Operatoren die Bestimmung der τ-Funktionen

$$\tau_{2k}^{\nu} \equiv \langle 0 \,|\, q^{2k}(0) \,|\, 2\nu \rangle \tag{8}$$

ausreicht, um das Zustandsspektrum der Eigenzustände gerader Parität festzulegen. Entsprechende Überlegungen kann man für die Zustände negativer Parität mit den ungeraden τ-Funktionen τ_{2k+1}^{ν} anstellen. Da aber diese und alle folgenden Betrachtungen keinen Unterschied zum Vorgehen bei Zuständen positiver Parität aufweisen, beschränken wir uns im folgenden auf eine Diskussion der Zustände positiver Parität allein.

Nach diesen Vorbetrachtungen können wir uns der direkten Rechnung im HEISENBERG-Bild zuwenden. Dazu benötigen wir ein Gleichungssystem für die τ-Funktionen (8). Dieses leitet man am zweckmäßigsten mittels einer erzeugenden Operatorfunktion ab. Sie wird durch $e^{x\,q(t)}$ definiert, wobei x ein willkürlicher Parameter ist. Zweimalige Zeitableitung der Operatorfunktion führt auf

$$\frac{d^2}{dt^2}\, e^{x\,q} = x\, e^{x\,q}\, \ddot{q} + \frac{x^2}{2} \left(\dot{q}^2\, e^{x\,q} + e^{x\,q}\, \dot{q}^2 + \frac{x^2}{2}\, e^{x\,q} \right). \tag{9}$$

Da q mit $\ddot{q}$ nicht vertauschbar ist, muß die Ableitung von (9) mittels der sogen. HAUSDORFF-Formel durchgeführt werden, welche das Ergebnis der Differentiationen der einzelnen Koeffizienten der Potenzreihe zusammenfaßt.

Unter Benutzung der Bewegungsgleichungen (1) und des HAMILTON-Operators (3) erhält man aus (9) durch Koeffizientenvergleich nach Potenzen von x die Operatorrelationen ($n = 1, 2, \dots$)

$$\begin{aligned} &- \left[2n + \binom{2n}{2} \right] q^{2n+2} - \frac{d^2}{dt^2}\, q^{2n} \\ &+ 2 \binom{2n}{2} (H_0\, q^{2n-2} + q^{2n-2} H_0) + 6 \binom{2n}{4} q^{2n-4} = 0\,. \end{aligned} \tag{10}$$

Bildet man nun Übergangsmatrixelemente von (10) zwischen den Zuständen $\langle 0 \,|$ und $|\, 2\nu \rangle$, so entsteht bei Berücksichtigung der Relation

$$\tau_{2k}^{\nu}(t) = \tau_{2k}^{\nu} \exp\{-i\,\omega_\nu\, t\} \tag{11}$$

mit $\omega_\nu \equiv E_{2\nu} - E_0$ ein Gleichungssystem für die zur Zustandsdarstellung benötigten τ-Funktionen (8)

$$-\left[2\,n + \binom{2\,n}{2}\right] \tau_{2\,n+2} + \omega^2\,\tau_{2\,n}$$
$$+ 2\binom{2\,n}{2}(\omega + 2\,E_0)\,\tau_{2\,n-2} + 6\binom{2\,n}{4}\tau_{2\,n-4} = 0\,. \quad (12)$$

Der Einfachheit halber wurde der Index ν an den τ-Funktionen und an ω unterdrückt. Wie man sieht, hebt sich aus den τ-Gleichungen die willkürliche Konstante C von (3) heraus, und es verbleibt nur die Nullpunktsenergie E_0 im System, welche dem Operator $H_0 \equiv \frac{1}{2}\,p^2 + \frac{1}{4}\,q^4$ zugeordnet ist[5].

Das Gleichungssystem (12) ist nunmehr jenes System, das an Stelle der klassischen Matrixmechanik das dynamische Verhalten des quantisierten Systems charakterisiert. Aus seiner Analyse müssen alle physikalischen Informationen gezogen werden, in diesem Fall also die verschiedenen Eigenfrequenzen und die zugehörigen Eigenvektoren τ_{2k}^{ν} mit $k = 1, \ldots$.

§ 2. Transformation auf φ-Funktionen

Wie schon erwähnt, muß die gesamte physikalische Information aus (12) gezogen werden. Abkürzend können wir (12) in der Form

$$[\omega^2\,\delta_{nm} + a_{nm}(\omega)]\,\tau_{2\,m} = 0 \qquad (13)$$

schreiben. (13) stellt dann ein verallgemeinertes Säkularproblem dar, bei dem die zu diagonalisierende Matrix $a_{nm}(\omega)$ an den Eigenwert ω rückgekoppelt ist[6]. Sehen wir zunächst von dieser unkonventionellen Rückkopplung ab, indem wir ω in $a_{nm}(\omega)$ als willkürlichen für einen endlichen Wert fixierten Parameter betrachten, so stellt man leicht fest, daß $a_{nm}(\omega)$ eine *unbeschränkte* Matrix ist. Eine solche Feststellung folgt auch unmittelbar aus der physikalischen Betrachtung: Da der anharmonische Oszillator ein nichtbeschränktes Spektrum von Eigenwerten E_n besitzt, welche sich aus der Diagonalisation von $a_{nm}(\omega)$ ergeben müssen, so folgt, daß $a_{nm}(\omega)$ notwendig eine unbeschränkte Matrix sein muß. Ganz allgemein läßt sich in der Funktionalanalysis beweisen, daß bestimmte Klassen von unbeschränkten Matrizen Spektraldarstellungen besitzen müssen, worunter aus physikalischen Gründen offensichtlich auch $a_{nm}(\omega)$ fällt. Es existieren aber gegenwärtig in der Funktionalanalysis keine Methoden, um die Spektren von unbeschränkten Matrizen direkt zu berechnen. Eigenwerttheorien gibt es bis jetzt nur für unbeschränkte Differentialoperatoren. Es ist daher nötig, das System (13) in solcher Weise umzuformen, daß es einer mathematischen Behandlung mit gegenwärtig bekannten Methoden zugängig wird. Der erste Schritt in diesem Prozeß wird durch die Transformation von den τ-Funktionen auf die φ-Funktionen vollzogen.

[5] Die τ-Gleichungssysteme für allgemeinere τ-Funktionen $\tau_{(2k,0)}^{(\alpha,\beta)}$ (0), d. h. für Übergangsmatrixelemente zwischen den Zuständen $\langle\alpha\,|$ und $|\,\beta\rangle$, unterscheiden sich von jenem für τ_{2k}^{ν} nur dadurch, daß an Stelle von E_0 der Wert E_α eingesetzt werden muß. Setzt man $\alpha = \beta$, so entsteht anstatt des homogenen Systems (12) ein inhomogenes System für die Erwartungswerte $\langle\alpha\,|\,q^{2k}(0)\,|\,\alpha\rangle$, auf das wir in unserem Zusammenhang aber nicht einzugehen brauchen.

[6] Die Tatsache, daß man (13) als ein verallgemeinertes Säkularproblem auffassen muß, ist aus physikalischen Gründen naheliegend. Der mathematische Beweis dafür wird im folgenden erbracht werden. Abgesehen aber von dem Problem, ob das spezielle System (13) ein Säkularproblem sein kann oder nicht, besteht die verbreitete Meinung, daß unendliche zeilenfinite Gleichungssysteme grundsätzlich nur Rekursionsformeln darstellen. Dies ist nicht der Fall, wie folgende Betrachtungen zeigen: Am einfachsten sind die Verhältnisse bei zeilenfiniten, unendlichen Matrizen $O_{ik}(\omega)$ zu durchschauen, welche von einem Eigenwertparameter ω abhängen und einer v. Koch-Bedingung genügen. Bei ihnen läßt sich die unendliche Determinante $\det|\,O_{ik}(\omega)\,|$ definieren. Sofern $\det|\,O_{ik}(\omega)\,| = 0$ gilt, hat das zugehörige homogene System $O_{ik}(\omega)\;x_k = 0$ normierbare Lösungen, deren Gesamtheit den Hilbert-Raum aufspannt. Im Gegensatz zu endlichen Gleichungssystemen hat das homogene System $O_{ik}(\omega)\;x_k = 0$ jedoch auch für $\det|\,O_{ik}(\omega)\,| \neq 0$ Lösungen. Man muß $O_{ik}(\omega)\;x_k = 0$ dann als Rekursionsformel interpretieren. Enthält die erste Zeile die unbekannten $x_1, \ldots, x_n$, so bilden in der Rekursionsformel $x_1, \ldots, x_{n-1}$ die willkürlichen Anfangsparameter, welche zusammen mit dem frei variablen ω den Lösungsvektor bestimmen. Dieser liegt dann aber nicht mehr im Hilbert-Raum der Eigenvektoren, sondern ist nicht normierbar. Die Lösungsvektoren sind also divergent. Analoge Verhältnisse bestehen bei zeilenfiniten unbeschränkten Matrizen, welche durch Algebraisierung von Hamilton-Operatoren entstehen, z. B. des anharmonischen Oszillators bei Entwicklung nach harmonischen Oszillatorfunktionen. Obwohl in solchen Fällen keine Determinante mehr existiert, ist von der Konfigurationsraumdarstellung die Existenz von Eigenwerten und normierbaren Eigenvektoren erwiesen. Für Nichteigenwerte kann man, wenn man will, derartige Systeme dann als Rekursionsformeln auffassen, die divergente Lösungsvektoren besitzen.
Ist umgekehrt ein zeilenfiniter Operator vorgegeben, so erhellt aus dem oben Gesagten, daß man nicht von vornherein die Möglichkeit eines Eigenwertproblems ausschließen darf. Vielmehr ist dies ein Problem, das durch Analyse des Operators entschieden werden muß. Das heißt, man muß untersuchen, ob sich ein Säkularproblem ausblenden läßt. Dies geschieht aber nicht durch Forderungen an die Lösungsvektoren, sondern durch Transformation des Operators auf eine Gestalt, welche die Möglichkeit des Säkularproblems evident macht. Dies ist im wesentlichen das in dieser Arbeit zur Verwendung kommende Verfahren.

Man zerlegt dazu die Operatoren $q(0)$ und $p(0)$ in die Operatoren

$$q(0) = 2^{-1/2}[a(0)+a^+(0)]\,,$$
$$p(0) = -i\,2^{-1/2}[a(0)-a^+(0)]\,, \qquad (14)$$

wobei $a(0)$ und $a^+(0)$ die Vertauschungsregel

$$[a(0), a^+(0)]_- = 1 \qquad (15)$$

erfüllen. Dann wird $q^n(0)$ ein gemischtes Produkt aus den nichtvertauschbaren $a(0)$- und $a^+(0)$-Operatoren. Ordnet man ein solches Produkt derart um, daß alle $a^+(0)$-Operatoren links von den $a(0)$-Operatoren stehen, so erhält man das normalgeordnete oder WICK-Produkt, das man gewöhnlich mit $:q^n:$ bezeichnet. Wir weisen darauf hin, daß weder (14) noch (15) noch die Normalordnung auf den harmonischen Oszillator beschränkt sind. Es handelt sich vielmehr um ganz allgemeingültige Operationen für Systeme mit einem Freiheitsgrad. Wir behaupten nun, daß

$$q^{2n} = \sum_{l=0}^{n} \left(\frac{1}{4}\right)^l \frac{(2\,n)!}{l!\,(2\,n-2\,l)!} :q^{2(n-l)}: \qquad (16)$$

$$\text{und } :q^{2n}: = \sum_{l=0}^{n} \left(-\frac{1}{4}\right)^l \frac{(2\,n)!}{l!\,(2\,n-2\,l)!}\, q^{2(n-l)} \qquad (17)$$

gilt. Den Beweis führt man in Analogie zur Ableitung der τ-Gleichungen mittels einer erzeugenden Funktion $e^{x(a^+ + a)}$, für welche sich die Relation

$$e^{x(a^+ + a)} = e^{x^2/2}\, e^{x\,a^+}\, e^{x\,a} \qquad (18)$$

beweisen läßt. Durch Koeffizientenvergleich nach x folgt dann (16), und in ähnlicher Weise beweist man die Umkehrformel (17). Multipliziert man (16) und (17) von links mit $\langle 0|$ und von rechts mit $|2\,\gamma\rangle$ und bezeichnet das normalgeordnete Matrixelement mit

$$\varphi_{2k}^{\gamma} \equiv \langle 0|:q^{2k}:|2\,\gamma\rangle\,, \qquad (19)$$

so geht (16) und (17) in eine lineare Transformation zwischen den τ- und den φ-Funktionen (19) über. Ohne den ursprünglichen Ausgangspunkt der Operatorrelationen (16) und (17) zu berücksichtigen, kann man dann diese Transformation zwischen den τ- und den φ-Funktionen als einen autonomen Vorgang auffassen. Im Hinblick auf die Möglichkeit einer Verallgemeinerung dieser WICK-Regel ist es dabei zweckmäßig, daß man den Faktor $(1/4)^l$ durch $(\varDelta/2)^l$ mit einem willkürlichen $\varDelta$ ersetzt. So entstehen aus (16) und (17) die Relationen

$$\tau_{2n}^{\gamma} = C_{nk}(\varDelta)\, \varphi_{2k}^{\gamma} \qquad (20)$$

und

$$\varphi_{2n}^{\gamma} = C_{nk}(-\varDelta)\, \tau_{2k}^{\gamma} \qquad (21)$$

mit

$$C_{nk}(\varDelta) \equiv \frac{(2\,n)!}{(2\,k)!} \frac{(\varDelta/2)^{n-k}}{(n-k)!}\,. \qquad (22)$$

Für $k>n$ verschwindet (22) per definitionem des Fakultätsausdrucks. Faßt man die τ_{2n}^{γ} $(n=0, 1, \ldots)$ als Lösungsvektor des Zustands $|2\,\gamma\rangle$ auf, so beschreibt (20) und (21) eine lineare Transformation zwischen den τ- und den φ-Vektoren. Diese lineare Transformation ist nicht ausgeartet. Man kann daher das System (13) von der τ-Darstellung auf die φ-Darstellung transformieren, ohne seinen mathematischen Inhalt zu zerstören. Man erhält unter Anwendung von (20) und (21) aus (13) das System

$$[\omega^2\,\delta_{nm} + C_{nl}^{-1}(\varDelta)\, a_{lj}(\omega)\, C_{jm}(\varDelta)]\, \varphi_{2m}^{\gamma} = 0 \qquad (23)$$

und unter Berücksichtigung von

$$C_{ne}^{-1}(\varDelta) = C_{nl}(-\varDelta) \qquad (24)$$

entsteht

$$[\omega^2\,\delta_{nm} + B_{nm}(\omega,\varDelta)]\, \varphi_{2m}^{\gamma} = 0 \qquad (25)$$

mit

$$\begin{aligned} B_{nm}(\omega,\varDelta) \equiv{}& (2\,n+1)\,n\,\delta_{n+1,m} + 2\,\varDelta n(8\,n^2+1)\,\delta_{nm} + \binom{2\,n}{6}\varDelta^4 \frac{6!}{2}\,\delta_{n-3,m} \\ &+ \binom{2\,n}{2}[3\,\varDelta^2(8\,n^2-8\,n+3) - 2(\omega+2\,E_0)]\,\delta_{n-1,m} \\ &+ 4!\binom{2\,n}{4}[4\,\varDelta^3(n-1) - \tfrac{1}{4}]\,\delta_{n-2,m}\,. \end{aligned} \qquad (26)$$

Es fragt sich nunmehr, ob das transformierte System (25) zur mathematischen Behandlung besser geeignet ist als (13). Dieses Problem werden wir im nächsten Paragraphen ausführlich diskutieren. Zunächst soll hier nur noch auf die bisher bekannt gewordenen Lösungsvorschläge eingegangen werden. Diese bestehen einerseits aus der sogen. neuen TAMM–DANCOFF-Methode, andererseits aus der sogen. Funktionalgleichungsmethode. Bei der neuen TAMM–DANCOFF-Methode geht man von der Beobachtung aus, daß beim harmonischen Oszillator, bei dem die τ-Funktionen und die φ-Funktionen direkt berechnet werden können, die τ-Funktionen durch

$$\tau_{2n}^{\gamma} = [(2\,\gamma)!]^{-1/2} \frac{(2\,n)!}{(n-\gamma)!} \left(\frac{1}{4}\right)^{n-\gamma} \text{ (harmon. Osz.)} \qquad (27)$$

gegeben werden, die φ-Funktionen dagegen für den exakten Wert von $\varDelta = 1/2$ nach (21), (22) und (27) durch

$$\varphi_{2n}^{\gamma} = [(2\,\gamma)!]^{1/2}\,\delta_{n\gamma}, \quad \text{(harmon. Osz.)} \qquad (28)$$

Dies bedeutet, daß die τ-Funktionen des harmonischen Oszillators für keinen Eigenwert normierbare Vektoren darstellen, wogegen die φ-Funktionen für alle endlichen Eigenwerte normiert werden können. In Analogie schließt man daraus, daß auch für den anharmonischen Fall ähnliche Verhältnisse vorliegen müßten, d. h. daß es sich bei den anharmonischen τ-Funktionen um nichtnormierbare, bei den φ-Funktionen dagegen um normierbare Vektoren handeln sollte. Da unendliche Gleichungssysteme mit normierbaren Eigenlösungen unter bestimmten Bedingungen abgebrochen und somit durch endliche Gleichungssysteme approximiert werden können, so werden in der neuen TAMM–DANCOFF-Methode die φ-Gleichungen (15) einfach abgebrochen und die φ-Funktionen für ein $k > k_0$ gleich Null gesetzt. Von HEISENBERG [1] wurden die Oszillatoreigenwerte am φ-Gleichungssystem in der p-q-Darstellung in erster, zweiter und dritter Näherung mit gutem Erfolg berechnet. Es ist aber klar, daß ein solches Vorgehen noch einer tieferen Rechtfertigung bedarf, da es auf einer ad hoc Analogie aufgebaut ist. Wir werden darauf im letzten Paragraphen noch genauer eingehen. Von SYMANZIK [2] wurde andererseits ein funktionalanalytischer Weg eingeschlagen. Wie wir gesehen haben, spielen bei der Ableitung der τ- und der φ-Gleichungssysteme die erzeugenden Funktionen $e^{x(a^+ + a)}$ bzw. $e^{x\,q(t)}$ eine bedeutsame (wenn auch mehr technische) Rolle. Es liegt daher nahe, nicht die aus den erzeugenden Funktionen bzw. Funktionalen hervorgehenden τ- bzw. φ-Gleichungen, sondern die Funktionale selbst zu studieren. SYMANZIK betrachtet dazu die Größen

$$f_{\alpha\beta}(x,y) \equiv \langle \alpha \,|\, e^{i\,x\,q + i\,y\,p} \,|\, \beta \rangle\,. \tag{29}$$

Für diese Größen kann man mittels der Bewegungsgleichungen (1) und des HAMILTON-Operators (3), sowie der Vertauschungsrelationen (2) Differentialgleichungen in x und y für (24) aufstellen. Für den Fall des harmonischen Oszillators gelingt die direkte Integration dieser Gleichung, für den Fall des anharmonischen Oszillators versucht SYMANZIK in Analogie zum Übergang vom τ- zum φ-Gleichungssystem aus $f_{\alpha\beta}$ einen konvergenzerzeugenden Faktor abzuspalten. Es ist jedoch bisher nicht möglich gewesen, eine Lösung für die resultierenden Gleichungen anzugeben, da strenge Lösungen nicht bekannt sind und numerische Lösungen von Randbedingungen ausgehen müßten, die ebenfalls unbekannt sind. Bei der nachfolgenden Behandlung des φ-Gleichungssystems werden wir Methoden benutzen, die wahrscheinlich kein Analogon in der funktionalanalytischen Betrachtung aufweisen, so daß der direkten Untersuchung des φ-Gleichungssystems vor dem funktionalanalytischen Verfahren von uns der Vorzug gegeben wird.

§ 3. Reduktion auf Systeme mit konvergenten Säkularpolynomen

Im vorangehenden Paragraphen wurde das τ-Gleichungssystem (13) auf das φ-Gleichungssystem (25) transformiert. Man erkennt aber leicht, daß der Übergang von den τ- zu den φ-Funktionen noch keine mathematische Behandlung des Eigenwertproblems mit den gegenwärtig bekannten Methoden zuläßt. Sieht man zunächst von der ω-Abhängigkeit der Matrix B_{nm} in (26) ab und betrachtet ω in B_{nm} als Parameter, so stellt das transformierte Gleichungssystem (25) genau wie das Ausgangssystem (13) ein Säkularproblem konventioneller Art für den unbeschränkten Operator $\omega_i\,\delta_{ij}$ dar. Daraus folgt, daß auch die Matrix B_{nm} notwendig unbeschränkt sein muß, was unmittelbar aus (26) abgelesen werden kann. Um das Eigenwertproblem trotzdem zu berechnenen, muß man demnach durch eine weitere Operation die konventionelle Form des Säkularproblems (13) bzw. (25) beseitigen. Dies geschieht durch die Abbildung [7]

$$\varphi_{2n} = \frac{(2\,n)\,!}{n\,!}\,\varphi_n' \tag{30}$$

und gleichzeitige Multiplikation der n-ten Gleichung von (25) mit $[2(n!)/(2\,n)!]\,[\Delta n(8\,n^2+1)]^{-1}$. Das Gleichungssystem (25) geht daraufhin über in

$$A_{nm}(\omega,\Delta)\;\varphi_m' = 0 \tag{31}$$

mit
$$A_{nm}(\omega,\Delta) = \sum_{k=1}^{-3} a_k(n,\omega,\Delta)\;\delta_{n+k,\,m}\,, \tag{32}$$

wobei die $a_k(n,\omega,\Delta)$ durch

$$a_1(n,\omega,\Delta) \equiv \frac{4\,(2\,n+1)^2}{\Delta\,(8\,n^2+1)}\,,$$

$$a_0(n,\omega,\Delta) \equiv 4 - \frac{2\,\omega^2}{n\,\Delta\,(8\,n^2+1)}\,,$$

[7] Bei einer Abbildung wird der Vektor allein transformiert, bei einer Transformation dagegen die gesamte Gleichung auf ein anderes Bezugssystem transformiert. Welche der beiden Auffassungen für eine Vektortransformation eingenommen wird, ist, sofern nicht geometrische Invarianzen vorhanden sind, eine Frage der mathematischen Zweckmäßigkeit.

$$a_{-1}(n,\omega,\Delta) \equiv [3\,\Delta(8\,n^2-8\,n+3) - \tfrac{1}{2}\,\Delta^{-1}(\omega+2\,E_0)]\frac{1}{8\,n^2+1},$$

$$a_{-2}(n,\omega,\Delta) \equiv [8\,\Delta^3(n-1)^2-\tfrac{1}{2}(n-1)]\,\frac{1}{(8\,n^2+1)\,\Delta}$$

$$a_{-3}(n,\omega,\Delta) \equiv \frac{\Delta^3(n-1)\,(n-2)}{8\,n^2+1} \qquad (33)$$

definiert werden.

Wie man durch Inspektion von (31) und (33) erkennt, hat man dadurch die konventionelle Form des Säkularproblems für ω, die notwendig auf eine unbeschränkte Matrix führen muß, beseitigt und ein Eigenwertproblem von allgemeinerem Typus geschaffen. Dieses Problem besteht in einer Ausdehnung der allgemeinen Theorie linearer Gleichungssysteme mit endlich vielen Variablen auf solche mit unendlich vielen. Verschwindet für endlich viele Freiheitsgrade die Determinante des Systems, so ist das homogene System lösbar, andernfalls nur das inhomogene. Das Verschwinden der Determinante eines solchen Systems in Abhängigkeit von einem Parameter, z. B. ω, definiert daher ein verallgemeinertes Säkularproblem für diesen Parameter. In diesem Sinne soll (31) nunmehr untersucht werden. Aus (33) folgt unmittelbar, daß $A_{nm}(\omega,\Delta)$ für alle endlichen ω ein *beschränkter Operator* ist. Diese Eigenschaft reicht im allgemeinen jedoch nicht aus, um das unendliche Gleichungssystem (31) einer Behandlung in Analogie zur Theorie endlicher Gleichungssysteme zugängig zu machen. Dazu müssen nach dem gegenwärtigen Stand der Theorie unendlicher Gleichungssysteme die sogen. v. Kochschen Bedingungen erfüllt sein, welche die Existenz der unendlichen Determinante $\det|A_{nm}|$ sicherstellen. Läßt sich nämlich eine derartige Determinante sinnvoll definieren, so ist es mit ihrer Hilfe möglich, die Cramersche Regel und damit die Theorie endlicher Gleichungssysteme auf (31) zu übertragen. Da aber die v. Kochschen Bedingungen nur hinreichende Bedingungen darstellen, so ist nicht ausgeschlossen, daß in Spezialfällen auch unendliche Matrizen, welche keiner v. Kochschen Bedingung genügen, die Definition einer unendlichen Determinante zulassen und sinnvolle Lösungsvektoren besitzen. Wir zeigen im folgenden, daß die Matrix $A_{nm}(\omega,\Delta)$ derartige Eigenschaften besitzt, und daß damit das Eigenwertproblem für ω einen wohldefinierten Sinn erhält. Wir beginnen mit der Determinantendefinition und behandeln die zugehörigen Eigenvektoren im folgenden Paragraphen.

Zur Definition der unendlichen Determinante verwenden wir die klassische Methode der Determinantenfolgen: Das System (31) wird bei N Zeilen und Spalten abgebrochen. Die zugehörige Determinante D_N ist dann als Determinante eines endlichen Systems eindeutig definiert. Sodann untersucht man $\lim_{N\to\infty} D_N$ und definiert den Grenzwert, sofern vorhanden, als Wert der unendlichen Determinante $\det|A_{nm}|$. Das Studium der Folge D_N ist nur möglich, wenn man eine Vorschrift zur Berechnung von D_N angeben kann, welche die viel zu komplizierte direkte Berechnung von D_N aus der Definitionsformel zu umgehen gestattet. Diese Vorschrift besteht in unserem Falle aus einer Rekursionsformel. Die Abschnittsdeterminante D_N wird durch

$$D_N \equiv \det|A_{nm}(\omega,\Delta)| \qquad (n,m=1,\ldots,N) \qquad (34)$$

definiert. Entwickelt man A_{nm} in (34) nach der letzten Spalte und verfährt ebenso mit den dabei auftretenden Unterdeterminanten, so ergibt die Zusammenfassung dieser viermal zu wiederholenden Prozedur die Rekursionsformel

$$\begin{aligned}&-D_N+a_0(N)\,D_{N-1}-a_1(N-1)\,a_{-1}(N)\,D_{N-2}\\&+a_1(N-1)\,a_1(N-2)\,a_{-2}(N)\,D_{N-3} \qquad (35)\\&-a_1(N-1)\,a_1(N-2)\,a_1(N-3)\,a_{-3}(N)\,D_{N-4}=0,\end{aligned}$$

wobei wir zur Abkürzung für $a_k(N,\omega,\Delta)$ nur $a_k(N)$ geschrieben haben. Die Rekursionsformel gilt ab $N \geqq 5$. Die Determinanten $D_1 \ldots D_4$ müssen direkt ausgerechnet werden.

Betrachtet man die Rekursionsformel (35) als ein Gleichungssystem für die Unbekannten $D_5 \ldots D_N$, so kann man $N \to \infty$ gehen lassen und erhält ein unendliches Gleichungssystem, dessen Lösungsvektor D_N ($N=5,6,\ldots$) die gewünschte Folge von Determinanten liefert.

Zur Diskussion der Lösungen dieses Systems kann man sich den ganzzahligen Index N zunächst durch eine reelle Variable x ersetzt denken, wodurch (35) in eine Differenzengleichung vierter Ordnung übergeht. Die Lösungen der Differenzengleichung stimmen dann bei geeignet gewählten Anfangsbedingungen für ganzzahlige x mit den Lösungen der Rekursionsformel (35) überein. Da sämtliche Koeffizienten $a_k(N)$ rationale Funktionen von N und damit auch von x sind, so ist die (35) zugeordnete Differenzengleichung eine Gleichung mit rationalen Koeffizienten[8]. Das sogen. charakteristische Polynom

[8] E. Nörlund, Differenzengleichungen, Verlag Springer, Berlin 1924, Kap. 11–13.

dieser Gleichung besitzt eine vierfache Nullstelle, und die Gleichung weist daher einen Punkt der Unbestimmtheit auf. Diese Eigentümlichkeit, welche ihren Ursprung in der WICK-Regel hat, ist ganz wesentlich: Hätte das charakteristische Polynom einen Punkt der Bestimmtheit, so könnte durch $\lim_{N\to\infty} D_N(\omega)$ kein Säkularproblem für ω definiert werden, weil die zugehörige Asymptotik dies verhindern würde. Andererseits werden für einen Punkt der Unbestimmtheit die Lösungen durch komplizierte NEWTONsche bzw. Fakultätenreihen dargestellt, deren ω-Abhängigkeit schwierig zu analysieren ist. Wir werden daher nicht den Versuch unternehmen, die Lösungen $D_N(\omega)$ explizit darzustellen. Es ist vielmehr zweckmäßig, sich auf funktionentheoretischem Wege Informationen über die ω-Abhängigkeit von $D_N(\omega)$ im limes $N\to\infty$ zu verschaffen, wobei wir dann nur ein einziges, allerdings sehr wesentliches Theorem aus der Theorie der Differenzengleichungen verwenden werden. Für den funktionentheoretischen Ansatz stellt man zunächst mittels der Rekursionsformel (35) fest, daß $D_N(\omega)$ ein Polynom $2N$-ten Grades in ω sein muß. Nach dem Fundamentalsatz der Algebra folgt daraus, daß sich $D_N(\omega)$ in der Form

$$D_N(\omega)=C(N)\prod_{\alpha=1}^{2N}(\omega_\alpha(N)-\omega) \tag{36}$$

schreiben lassen muß, wobei $\omega_\alpha(N)$ $(\alpha=1,\dots,2N)$ die Nullstellen des Polynoms sind. Der Wert $\omega=0$ kann keine Nullstelle des Polyoms sein, da dieser Wert dem inhomogenen System der Vakuumerwartungswerte der τ-Funktionen zugeordnet ist, zu deren eindeutiger Berechnung die $D_N(0)\neq 0$ sein müssen. Im Hinblick auf den Grenzübergang $N\to\infty$ schreiben wir (36) in die Form

$$D_N(\omega)=r(N,\omega)\,\Phi_N(\omega) \tag{37}$$

um, wobei wir nach dem WEIERSTRASSschen Produktsatz $\Phi_N(\omega)$ durch

$$\Phi_N(\omega)=\prod_{\alpha=1}^{2N}\left(1-\frac{\omega}{\omega_\alpha(N)}\right)\exp\{f(N,\alpha,\omega)\} \tag{38}$$

definieren, und $r(N,\omega)$ durch

$$r(N,\omega)=C(N)\prod_{\alpha=1}^{2N}\exp\{-f(N,\alpha,\omega)\}\omega_\alpha(N). \tag{39}$$

Die Funktionen $\exp\{f(N,\alpha,\omega)\}$ werden entsprechend dem WEIERSTRASSschen Theorem als konvergenzerzeugende Faktoren hinzugefügt. Sie tragen zu den Nullstellen von $D_N(\omega)$ nichts bei. Sofern

$$\lim_{N\to\infty}\omega_\alpha(N)=\omega_\alpha \tag{40}$$

für alle α gilt, folgt unmittelbar daraus

$$\lim_{N\to\infty}\Phi_N(\omega)=\Phi(\omega) \tag{41}$$

mit $\Phi(\omega)$ als einer ganzen Funktion, d. h. also einer Funktion, welche für alle endlichen ω einen endlichen Wert annimmt. Damit ist der limes von $D_N(\omega)$ wohldefinierbar als

$$\begin{aligned}\lim_{N\to\infty}D_N(\omega)&=\lim_{N\to\infty}r(N,\omega)\lim_{N\to\infty}\Phi_N(\omega)\\&=\Phi(\omega)\lim_{N\to\infty}r(N,\omega).\end{aligned} \tag{42}$$

Da der Faktor $r(N,\omega)$ stets nullstellenfrei ist, liefert unter der Voraussetzung (40) die Formel (42) also ein wohldefiniertes Säkularproblem in ω. Es verbleibt demnach der Nachweis der Relation (40) als eigentliches Problem. Wie in (40) gefordert, braucht man nur den limes $N\to\infty$ zu betrachten. Für sehr große N genügt $D_N(\omega)$ der aus (35) und (33) ableitbaren asymptotischen Gleichung

$$\begin{aligned}D_N(\omega)-4\,D_{N-1}(\omega)+6\,D_{N-2}(\omega)&\\-4\left(1+k_1\frac{1}{N}\right)D_{N-3}(\omega)+D_{N-4}(\omega)&=0\end{aligned} \tag{43}$$

mit $k_1=-(4\,\Delta)^{-2}$. Diese asymptotische Gleichung benutzen wir nun für den Beweis von (40). Wir demonstrieren das Beweisverfahren zunächst an einer sehr groben Näherung. Wir denken uns die Nullstellen $\omega_\alpha(N)$ nach steigenden Beträgen geordnet, so daß für alle N eine Anordnung der Art

$$|\omega_1(N)|<|\omega_2(N)|<\dots<|\omega_{2N}(N)| \tag{44}$$

gelten möge (der Einfachheit halber nehmen wir nur einfache Nullstellen an). Sodann betrachten wir eine sehr kleine Umgebung des Nullpunktes der ω-Ebene. Dann setzen wir näherungsweise in dieser Umgebung

$$D_N(\omega)\approx r(N,0)\left(1-\frac{\omega}{\omega_1(N)}\right), \tag{45}$$

wobei sich die konvergenzerzeugenden Faktoren im Produkt mit jenen von $r(N,\omega)$ gegenseitig wegheben, so daß nur $r(N,0)$ als Faktor übrigbleibt. Zur Abkürzung setzen wir im folgenden

$$r(N,0)\equiv r(N)\,.$$

Setzen wir ferner $z_\alpha{}^N\equiv 1/\omega_\alpha(N)$, so ist (45) unter der Annahme gültig, daß $z_1{}^N\gg z_\alpha{}^N$ $(\alpha=2,\dots,2N)$

erfüllt ist. Diese Annahme setzen wir zunächst voraus. Substituiert man dann (45) in (43), so ergibt ein Koeffizientenvergleich nach ω die beiden Gleichungen

$$r(N)-4\,r(N-1)+6\,r(N-2)-4\left(1+k_1\frac{1}{N}\right)r(N-3)+r(N-4)=0\,,$$
$$z_1^N\,r(N)-4\,z_1^{N-1}\,r(N-1)+6\,z_1^{N-2}\,r(N-2)-4\left(1+k_1\frac{1}{N}\right)z_1^{N-3}\,r(N-3)+z_1^{N-4}\,r(N-4)=0\,. \tag{46}$$

$r(N)$ muß demnach simultan den beiden Gln. (46) genügen. Faßt man diese Gleichungen als Differenzengleichungen auf, so ist eine notwendige Bedingung für die Existenz einer simultanen Lösung die Übereinstimmung der charakteristischen Polynome der beiden Gleichungen. Diese Übereinstimmung besteht aber nur, wenn

$$z_1^N=z_1^{N-\nu}\qquad(\nu=1,\dots,4) \tag{47}$$

gilt. Da andererseits $r(N)$ nach Ableitung eine simultane Lösung von (46) sein muß, muß auch (47) gelten. Daraus folgt aber unmittelbar

$$\lim_{N\to\infty}\omega_1(N)=\omega_1\,. \tag{48}$$

Nunmehr kann man unter Berücksichtigung von (48) dasselbe Verfahren für $\omega_2(N)$ ausführen usw., bis man schließlich die Gültigkeit von (40) für sämtliche α erwiesen hat. Das geschilderte Verfahren ist nur insofern unvollkommen, als in den Beweis die Voraussetzung $z_1^N\gg z_\alpha^N$ $(\alpha=2,\dots,2\,N)$ usw. eingeht. Diese Voraussetzung ist jedoch nicht wesentlich: Um dies einzusehen, befreien wir uns rekursiv davon. Das heißt, wir nehmen zunächst an, daß $z_1^N,\ z_2^N\gg z_\alpha^N$ $(\alpha=3,\dots,2\,N)$ erfüllt ist. Wir vermindern also unsere Annahme um eine Ungleichung. Unter dieser Voraussetzung erhält man dann für $D_N(\omega)$ in einer kleinen Umgebung des Nullpunktes der ω-Ebene

$$D_N(\omega)\approx r(N)\left[1-\omega(z_1^N+z_2^N)+\omega^2\,z_1^N\,z_2^N\right]. \tag{49}$$

Koeffizientenvergleich in ω ergibt, daß $r(N)$ simultan drei Differenzengleichungen erfüllen muß. Dies ist in Analogie zur vorangehenden Argumentation nur dann möglich, wenn die Relationen

$$z_1^N+z_2^N=z_1^{N-\nu}+z_2^{N-\nu}\,,\qquad z_1^N\,z_2^N=z_1^{N-\nu}\,z_2^{N-\nu} \tag{50}$$

erfüllt sind. Diese Relationen sind aber nur für $z_1^N=z_1^{N-\nu}$ und $z_2^N=z_2^{N-\nu}$ erfüllbar, woraus wiederum die Konvergenz folgt. Analog kann man weitere Ungleichungen aufgeben. Hat man insgesamt ϱ Ungleichungen aufgegeben, d. h. setzt man nur $z_1^N,\dots,z_\varrho^N\gg z_\alpha^N$ $(\alpha=\varrho+1,\dots,2\,N)$ voraus, so erhält man durch Koeffizientenvergleich genau ϱ Gleichungen für die Zahlen $z_1^{N-\nu},\dots,z_\varrho^{N-\nu}$, deren rechte und linke Seiten für verschiedene ν strukturell völlig gleich sind. Wie in (50) folgt daraus unmittelbar $z_1^N=z_1^{N-\nu},\dots,z_\varrho^N=z_\varrho^{N-\nu}$ usw., so daß man erkennt, daß mit dem angegebenen Verfahren die Relation (40) ohne zusätzliche Voraussetzungen bewiesen werden kann. Wir haben demnach hier einen Fall vor uns, bei dem die nur beschränkte Matrix $A_{nm}(\omega,\Delta)$ bis auf einen nullstellenfreien „Renormierungsfaktor" eine wohldefinierte unendliche Determinante besitzt, deren Nullstellen gegen Grenzwerte konvergieren. Zufolge dieser Nullstellenkonvergenz kann man daher das Säkularproblem (31) durch die Folge der abgebrochenen Systeme approximieren, wobei man im limes $N\to\infty$ die Lösung des unendlichen Systems (31) erhält. Daß mit der Nullstellenkonvergenz auch eine Eigenvektorkonvergenz vorhanden ist, werden wir im nächsten Paragraphen zeigen. *Das Problem, das τ-Gleichungssystem in ein mathematisch faßbares Säkularsystem umzuwandeln, ist daher durch die Anwendung der Transformation (20) und der Abbildung (30) sowie durch den Konvergenzbeweis gelöst* [9].

[9] Vermutlich läßt sich der Renormierungsfaktor $r(N)$ auch als Determinante einer unendlichen Matrix K_{nm} definieren, so daß der Zerlegung $D_N=r(N)\ \Phi_N$ im Gleichungssystem (31) die Abspaltung eines konvergenzerzeugenden Matrixfaktors entsprechen würde. Nimmt man die Existenz einer solchen Matrix K_{nm} an, so wäre

$$r(N)=\det|K_{nm}|\qquad(n,m=1,\dots,N)$$

und man könnte zufolge der Zerlegung

$$A_{nm}=K_{nm}+V_{nm}$$

durch die Transformation

$$\varphi_m'=K_{mp}^{-1}\,\varphi_r''$$

das Gleichungssystem (31) in

$$[\delta_{np}+V_{nm}\,K_{mp}^{-1}]\ \varphi_r''=0$$

überführen, wobei

$$\det|\delta_{np}+V_{nm}\,K_{mp}^{-1}|\equiv\Phi_N\qquad(n,m,p=1,\dots,N)$$

sein müßte. Ein solches Gleichungssystem würde dann die Anwendung der FREDHOLM-Theorie gestatten und daher einen weiteren Konvergenzbeweis liefern. Diese Frage soll in weiteren Arbeiten genauer untersucht werden.

§ 4. Abschätzung der Nullstellen- und Eigenvektorkonvergenz

Zusätzlich zum Konvergenzbeweis der Nullstellenfolgen $\omega_a(N)$ im vorangehenden Paragraphen ist eine Abschätzung der Stärke dieser Konvergenz möglich. Wiederum beschränken wir uns auf den Fall sehr großer N. Wir müssen aber, um zusätzliche Informationen zu § 3 zu erhalten, diesmal auch die asymptotischen Glieder zweiter Ordnung in (35) berücksichtigen. Unter Einschluß dieser Glieder lautet dann die zu (35) gehörige asymptotische Gleichung

$$D_N(\omega) - 4\,D_{N-1}(\omega) + 6\left(1 + \frac{k_2}{N^2}\right) D_{N-2}(\omega)$$
$$-4\left(1 + \frac{k_1}{N} + \frac{k_3}{N^2}\right) D_{N-3}(\omega) + \left(1 + \frac{k_4}{N^2}\right) D_{N-4}(\omega) = 0\,. \quad (51)$$

Die Konstanten $k_1 \dots k_4$ kann man direkt numerisch aus (35) berechnen. Wir unterdrücken hier jedoch ihre explizite Angabe, da die speziellen Werte von $k_1 \dots k_4$ für das folgende ohne Belang sind, mit Ausnahme der Tatsache, daß $k_1 \dots k_4 \neq 0$ gilt.

In Gl. (51) setzen wir nun den Wert von $D_N(\omega)$ an der speziellen Stelle $\omega = \omega_a$ ein, wobei ω_a nach (40) der Grenzwert von $\omega_a(N)$ sei. Nach (36) ist $D_N(\omega_a)$ gleich

$$D_N(\omega_a) = C(N) \prod_{\beta=1}^{2N} (\omega_\beta(N) - \omega_a)\,. \quad (52)$$

Um aus dem Ansatz (52) mittels der Gl. (51) Schlüsse über die Art der Nullstellenkonvergenzen ziehen zu können, ist es nötig, die einzelnen Faktoren von (52) in ihrer Abhängigkeit von N näher zu untersuchen. Schreibt man zur Abkürzung

$$\omega_\beta(N) - \omega_a \equiv d_\beta^\alpha\,(N)\,, \quad (53)$$

so sind die Folgen $d_\beta^\alpha(N)$ zufolge der Konvergenz der $\omega_\beta(N)$ gegen die Grenzwerte ω_β ebenfalls konvergent, d. h. es gilt

$$\lim_{N\to\infty} d_\beta^\alpha(N) \equiv d_\beta^\alpha\,. \quad (54)$$

Da die Zahlen $d_\beta^\alpha(N)$ für $\beta \neq \alpha$ gegen Grenzwerte d_β^α streben, welche $\neq 0$ sind, und im allgemeinen sogar sehr große Werte annehmen, wenn man die Eigenwerte ω_a und ω_β mit dem Spektrum des anharmonischen Oszillators identifiziert, so setzen wir wegen der bewiesenen Konvergenz näherungsweise $d_\beta^\alpha(N) \approx d_\beta^\alpha$ in (52) ein. Für $\beta = \alpha$ dagegen kann man eine solche Näherung nicht vornehmen, da die $d_\alpha^\alpha(N)$ eine Nullfolge sind. Wegen der aus (39) folgenden Relation

$$C(N) = r(N)\,[\prod_{\nu=1}^{2N} \omega_\nu(N)]^{-1} \quad (55)$$

läßt sich (52) daher in der Gestalt schreiben

$$D_N(\omega_a) \approx r(N)\; d_\alpha^\alpha\,(N)\,[\prod_{\nu=1}^{2N} \omega_\nu(N)\,]^{-1} \prod_{\substack{\beta=1\\ \neq a}}^{2N} d_\beta^\alpha\,. \quad (56)$$

Setzt man nun entsprechend unserer für die $d_\beta^\alpha(N)$ verwendeten Näherung auch $\omega_\nu(N) \approx \omega_\nu$ und beachtet, daß für große N und festes α zufolge der Anordnung (44) $(\omega_{N+k})^{-1}\,d_{N+k}^\alpha\,(k = 1, \dots, 4)$ gegen 1 strebt, so ergibt Substitution von (56) in (51) bei gleichzeitigem Herauskürzen aller gemeinsamen Faktoren die Gleichung

$$r(N)\; d_\alpha^\alpha(N) \;- 4\,r(N-1)\; d_\alpha^\alpha(N-1)$$
$$+ 6\left(1 + \frac{k_2}{N^2}\right) r(N-2)\; d_\alpha^\alpha(N-2)$$
$$-4\left(1 + \frac{k_1}{N} + \frac{k_3}{N^2}\right)\; r(N-3)\; d_\alpha^\alpha(N-3)$$
$$+ \left(1 + \frac{k_4}{N^2}\right) r(N-4)\; d_\alpha^\alpha(N-4) = 0\,. \quad (57)$$

Zur Konvergenzabschätzung setzen wir nun

$$\omega_a(\varrho) - \omega_a(\varrho+1) = x_\varrho^\alpha\,. \quad (58)$$

Dann gilt zufolge (53) und (58)

$$d_\alpha^\alpha(N+k) = \sum_{\varrho=N+k}^{\infty} x_\varrho^\alpha\,. \quad (59)$$

(59) kann man nun in (57) eintragen und nach den neuen Variablen x_ϱ^α umordnen, wobei man zur Reduktion der entstehenden Ausdrücke die von $r(N)$ erfüllte Gl. (46) benutzt. Wir schreiben das Ergebnis dieser Umformung nicht explizit an, sondern dividieren sogleich die entstandene Gleichung durch $r(N)$. Nun setzen wir als Hypothese voraus, daß der limes $N \to \infty$ von $r(N)/r(N-1)$ existiert[10]. Sofern er existiert, folgt aus der asymptotischen Gl. (46) sofort, daß er gleich 1 sein muß. Die Gl. (57) geht damit in

$$-x_{N-1}^\alpha + 3\,x_{N-2}^\alpha - 3\left(1 + \frac{4}{3}\frac{k_1}{N}\right) x_{N-3}^\alpha + x_{N-4}^\alpha$$
$$= \frac{k_0}{N^2} \sum_{\varrho=N}^{\infty} x_\varrho^\alpha \quad (60)$$

[10] Bei entarteten Wurzeln der charakteristischen Gleichung existiert dieser limes nur unter gewissen Stabilitätsvoraussetzungen, s. Nörlund [8], S. 306.

über, wobei wir auf der linken Seite die Glieder zweiter Ordnung, d. h. die Glieder mit N^{-2}, vernachlässigt haben. Diese Gleichung hat aber die konvergente Lösung

$$x_N^\alpha = \frac{\text{const}}{N^2} + O\left(\frac{1}{N^3}\right), \tag{61}$$

womit eine Abschätzung des Konvergenzgrades der Nullstellen durchgeführt ist. Wie schon in § 3 angekündigt, untersuchen wir schließlich noch das Verhalten der den Eigenwerten $\omega_\alpha(N)$ zugeordneten Eigenvektoren. Auch hier können wir uns für den Konvergenzbeweis bei endlichem α auf das asymptotische Verhalten der Eigenvektoren beschränken. Wir setzen zunächst in (31) den speziellen Eigenwert $\omega = \omega_\alpha$ ein, wobei (31) in

$$A_{nm}(\omega_\alpha, \Delta)\, \varphi_m'^\alpha = 0 \tag{62}$$

übergeht. $\varphi_m'^\alpha$ sei dann der Eigenvektor zum Eigenwert ω_α. Bekanntlich ist ein solcher Eigenvektor nur bis auf eine multiplikative Konstante bestimmt; d. h. mit $\varphi_m'^\alpha$ ist auch $c\,\varphi_m'^\alpha$ ein Eigenvektor. Um diese Willkür zu beseitigen, kann man an Stelle der $\varphi_m'^\alpha$ die Verhältnisse

$$\xi_m^\alpha = \varphi_m'^\alpha / \varphi_1'^\alpha \tag{63}$$

betrachten. Diese sind nunmehr *eindeutig* festgelegte Größen. Zu ihrer Berechnung dividieren wir (62) durch $\varphi_1^{0\alpha}$ und nehmen die Substitution $n \equiv \nu$, $m \equiv \mu + 1$ usw. Damit geht (62) in

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} A_{\nu\mu}(\omega_\alpha, \Delta)\, \xi_\mu^\alpha = -A_{\nu 1}(\omega_\alpha, \Delta) \qquad (\nu = 1, \dots, \infty) \tag{64}$$

über. Um die Indizierung deutlich zu charakterisieren, haben wir ausnahmsweise an Stelle der Summenregel explizit das Summationszeichen verwendet. Man erkennt sofort, daß es sich bei (64) um ein System mit einer beschränkten Matrix handelt. Die Determinante der Matrix $A_{\nu\mu}(\omega_\alpha, \Delta)$ ist ungleich Null, wie man aus der Formel

$$\det | A_{\nu\mu}(\omega_\alpha, \Delta) | = \prod_{\nu=1}^{\infty} \frac{4(2\nu+2)^2}{\Delta(8\nu^2+1)} \tag{65}$$

entnimmt. Die Gln. (64) können daher aufgelöst werden. Es genügt dabei den limes $\mu \to \infty$ zu betrachten. Man erhält dafür aus (64) die asymptotische Relation

$$\xi_{\mu+1}^\alpha + \tfrac{1}{2}\Delta\, \xi_\mu^\alpha + \tfrac{3}{2}\Delta^2\, \xi_{\mu-1}^\alpha + \tfrac{1}{2}\Delta^3\, \xi_{\mu-2}^\alpha + \tfrac{1}{16}\Delta^4\, \xi_{\mu-3}^\alpha = 0\,. \tag{66}$$

Wie schon bei der Determinantenrekursionsformel, so kann man auch (66) als eine Differenzengleichung in μ auffassen, welche für ganzzahlige μ die gewünschten Lösungen liefert. Das charakteristische Polynom dieser Gleichung ist ebenfalls entartet, und zwar hat es die vierfache Wurzel $t = \frac{1}{2}\Delta$. Nach einem Satz von PERRON [11] gilt in diesem Fall

$$\limsup_{\mu\to\infty} \sqrt[\mu]{|\xi_\mu|} = \tfrac{1}{2}\Delta \tag{67}$$

oder

$$|\xi_\mu| \leqq (\tfrac{1}{2}\Delta)^\mu (1+\varepsilon)^\mu, \tag{68}$$

wobei ε beliebig klein ist. Für $\Delta < 2$ ist dieses ξ_μ dann quadratsummabel. Da das physikalische $\Delta = \frac{1}{2}$ ist, so hat man im physikalischen Bereich der WICK-Regel auch die Konvergenz der Eigenvektoren nachgewiesen, womit die Existenz eines Lösungssystems von Eigenwerten und Eigenvektoren für (31) endgültig nachgewiesen ist.

§ 5. Rechtfertigung der N.T.D.-Approximation

Die im vorangehenden durchgeführten Betrachtungen ermöglichen uns nun, die von HEISENBERG benutzte N.T.D.-Approximation für den Fall des anharmonischen Oszillators streng zu rechtfertigen. Wir rekapitulieren dazu nochmals kurz die Methode der N.T.D.-Approximation.

Wir gehen vom Gleichungssystem (25) aus. Für dieses System wird

$$\varphi_{2m} = 0, \qquad m > N \tag{69}$$

gefordert, wobei N eine fixierte ganze Zahl sein soll, und an Stelle von (25) wird das endliche Gleichungssystem

$$\sum_{m=1}^{N} [\omega^2 \delta_{nm} + B_{nm}(\omega, \Delta)]\, \varphi_{2m} = 0 \tag{70}$$

betrachtet. Die Eigenwerte $\tilde{\omega}_\varrho(N)$ folgen dann aus der Determinante von (70) durch die Bedingung

$$\det | \omega^2 \delta_{nm} + B_{nm}(\omega, \Delta) | \equiv \widetilde{D}_N(\omega, \Delta) = 0. \tag{71}$$

Es wird behauptet, daß

$$\lim_{N\to\infty} \tilde{\omega}_\varrho(N) = \omega_\varrho \tag{72}$$

gegen die tatsächlichen Eigenwerte des Systems konvergiert.

Wir betrachten zunächst die Forderung (69). Aus (68) zusammen mit (30) folgt, daß

$$\lim_{m\to\infty} |\varphi_{2m}| = \frac{(2m)!}{m!} \left(-\frac{\Delta}{2}\right)^m (1+\varepsilon)^m \tag{73}$$

[11] loc. cit. [8], S. 309–310.

wird. Die bei der N.T.D.-Approximation vorausgesetzte Relation (69) ist demnach nicht gültig. Dies tut aber der Gültigkeit der N.T.D.-Methode selbst keinen Abbruch, da die Relation (69) völlig überflüssig ist und nicht vorausgesetzt werden muß. Es genügt vielmehr, nur die Folge der abgebrochenen Gleichungssysteme (70) zu betrachten, *ohne* eine Aussage über die Konvergenz der φ-Funktionen hinzuzufügen.

Um diese Aussage zu bekräftigen, ist es wichtig zu bemerken, daß die Forderungen (69) und (70) nicht logisch konsistent sind, da (69) zusätzlich zu (70) noch weitere Gleichungen, nämlich

$$\sum_{m=1}^{N} [\omega^2 \delta_{nm} + B_{nm}(\omega, \Delta)]\, \varphi_{2m} = 0 \qquad (n = N+1, \dots, \infty) \tag{74}$$

impliziert, welche bei innerer Konsistenz von (69) und (70) erfüllt werden müßten. Das bedeutet einen Widerspruch, da die φ_{2m} bereits aus (70) eindeutig bestimmt sind. Beim praktischen Vorgehen werden die Zusatzbedingungen (74) ignoriert, vom theoretischen Standpunkt dürfen derartige Zusatzbedingungen aber überhaupt nicht gestellt werden. Als den eigentlichen Inhalt der N.T.D.-Methode betrachten wir daher nicht die Aussage der Relation (69), sondern die Frage der Konvergenz der Eigenwerte des abgebrochenen Gleichungssystems (70) gegen die Eigenwerte des unendlichen Gleichungssystems (25). Um dieses Problem zu behandeln, untersuchen wir zunächst jene Größe, aus der die Eigenwerte abgeleitet werden. Dies ist $\widetilde{D}_N(\omega, \Delta)$. Der Wert dieser Determinante kann leicht berechnet werden, indem man vom φ-Funktionensystem zum φ'-Funktionensystem übergeht. Unter Berücksichtigung der Determinantenmultiplikationsregeln bei der Abbildung von φ auf φ' folgt unmittelbar

$$\widetilde{D}_N(\omega, \Delta) = \varkappa(N, \omega)\; \Phi_N(\omega) \tag{75}$$

mit
$$\varkappa(N, \omega) \equiv \prod_{n=1}^{N} \frac{2^N (2\,n)!}{\Delta n (8\,n^2+1)}\, r(N, \omega)\,. \tag{76}$$

$\widetilde{D}_N$ und Φ_N sind demnach bis auf eine nullstellenfreie ganze Funktion in ihrem analytischen Verhalten in bezug auf ω gleich. Insbesondere gilt: *die Nullstellen von $\widetilde{D}_N$ und von Φ_N sind dieselben,* d. h. es ist

$$\tilde{\omega}_\varrho(N) = \omega_\varrho(N)\,. \tag{77}$$

Da die Konvergenz der $\omega_\varrho(N)$ für wachsende N in § 3 ausführlich bewiesen wurde, so folgt aus

$$\lim_{N\to\infty} \omega_\varrho(N) = \omega_\varrho \tag{78}$$

wegen (77)
$$\lim_{N\to\infty} \tilde{\omega}_\varrho(N) = \omega_\varrho\,, \tag{79}$$

was zu beweisen war.

Eine gewisse Schwierigkeit entsteht erst dann, wenn man den Grenzübergang $N \to \infty$ nicht im Sinne der numerischen Rechnung auffaßt, sondern an $\widetilde{D}_N$ theoretische Untersuchungen ausführen will. Wegen

$$\lim_{N\to\infty} \varkappa(N, \omega) = \infty \tag{80}$$

ist die Folge der Determinanten $\widetilde{D}_N$ divergent. Die Determinanten $\widetilde{D}_N$ und die Systeme (70) sind daher für theoretische Untersuchungen ungeeignet, für numerische Rechnungen aber brauchbar.

Das Ergebnis läßt sich daher folgendermaßen zusammenfassen:

Obwohl sowohl die Folge der Determinanten der abgebrochenen φ-Gleichungssysteme als auch deren Lösungsvektoren divergieren, konvergiert die Folge der zu den abgebrochenen Gleichungssystemen gehörigen Eigenwerte auf den Grenzwert der Eigenwerte des unendlichen Systems.

Verzichtet man daher auf die logisch inkonsistente Forderung (69) und definiert das N.T.D.-Verfahren allein durch die Folge der abgebrochenen Gleichungssysteme (70), so kann man feststellen: *Die N.T.D.-Approximation liefert beim anharmonischen Oszillator eine Folge von Eigenwerten, welche gegen das tatsächliche Spektrum des τ- bzw. φ-Systems konvergiert.*

In dieser Feststellung ist bemerkenswert, daß zunächst nur von einer Konvergenz des N.T.D.-Spektrums gegen die Eigenwerte des unendlichen τ- bzw. φ-Systems die Rede ist. Daß ferner das Spektrum des τ- bzw. φ-Systems mit dem Eigenwertspektrum der SCHRÖDINGER-Gleichung des anharmonischen Oszillators zusammenfällt, ist aus physikalischen Gründen anzunehmen. In einer strengen Theorie muß ein solcher Nachweis aber auch formal erbracht werden, insbesondere im Hinblick auf die Tatsache, daß die Säkularpolynome der τ- bzw. φ-Systeme auch für negative $\omega = (E - E_0)$, d. h. also für physikalisch sinnvolle Werte Nullstellen besitzen. Die genaue Diskussion des Zusammenhangs zwischen den Eigenwerten der SCHRÖDINGER-Gleichung und jenen der zugeordneten τ- bzw. φ-Systeme verschieben wir jedoch auf weitere Arbeiten, da eine derartige Untersuchung über den Rahmen des hier gestellten Problems hinausgeht. In dieser Arbeit beschränken wir uns auf den numerischen Nachweis; d. h. es wird nicht nur gezeigt, daß die Nullstellenfolgen der abgebrochenen τ- bzw. φ-Determinante gegen Grenzwerte konvergieren, sondern auch, daß *diese Grenzwerte mit den Eigenwerten der* SCHRÖDINGER-*Gleichung übereinstimmen.* Wir verweisen dazu auf die Diskussion der numerischen Ergebnisse im folgenden Paragraphen.

§ 6. Numerische Ergebnisse

Wie schon zu Beginn erwähnt, haben wir uns in der gesamten Darstellung auf die Zustände positiver Parität beschränkt, da die Zustände negativer Parität vollkommen analog behandelt werden können. Auch die nachfolgenden numerischen Ergebnisse beziehen sich daher allein auf die Zustände positiver Parität.

Um die Nullstellen der Determinanten (49) wirklich auszurechnen, benötigen wir die Werte für E_0 und Δ. Das Auftreten von E_0, das der TAMM–DANCOFF-Methode in der Feldtheorie an sich fremd ist, hängt mit dem Umstand zusammen, daß beim anharmonischen Oszillator der Zustandsraum allein in der p- bzw. q-Darstellung aufgebaut werden kann. Wegen der Teilchen-Antiteilchenzustände tritt eine derartige Reduktion der Zustände in der Feldtheorie nicht auf, man ist daher auch nicht, wie in unserem Fall, gezwungen, den HAMILTON-Operator zur Elimination überzähliger Matrixelemente zu verwenden, was gerade auf E_0 führt. E_0 kann im bisherigen Rahmen der Theorie der τ- bzw. φ-Gleichungssysteme nicht bestimmt werden [12]. Wir verwenden einen durch numerische Integration der SCHRÖDINGER-Gleichung bestimmten Wert von $E_0 = 0{,}420806$ (s. Anm. [13]). Was den Faktor Δ betrifft, so ist dieser in der Transformationsmatrix (22) zunächst völlig willkürlich, und die Säkulardeterminante dürfte an sich überhaupt nicht von Δ abhängen, da bei einer Transformation die Säkulardeterminanten invariant bleiben. Allerdings handelt es sich in diesem Fall um unendliche Determinanten, so daß eine gesonderte Untersuchung dieser Behauptung für den Grenzübergang $N \to \infty$ nötig wäre. Bricht man andererseits das unendliche φ-System bei N Gleichungen ab, so wird die Transformationsinvarianz zerstört, und die Determinanten der abgebrochenen Systeme hängen von Δ ab, wobei die Abhängigkeit unter den eben erwähnten Einschränkungen allerdings für $N \to \infty$ wieder herausfallen müßte. Für endliche N wird es daher zunächst einen optimalen Wert von Δ geben, für den die Approximation am günstigsten ausfällt. Nach der einzeitigen WICK-Regel muß bei kanonischer Vertauschung $\Delta = 1/2$ sein. Verwendet man diesen Wert in der Transformationsmatrix (22) und den eben angegebenen Wert für E_0, so erhält man eine ω-Abhängigkeit des Säkularpolynoms, die für eine Auswahl aus den ersten 20 Determinanten in Abb. 1 aufgetragen wurde. Die erste Näherung $\Phi_1(\omega)$ hat eine Nullstelle für positive ω bei 2,89, $\Phi_2(\omega)$ besitzt zwei Nullstellen bei 2,56 und 7,71, $\Phi_3(\omega)$ drei Nullstellen bei 2,52, 6,47 und bei 12,1. Jede weitere Näherung bringt eine zusätzliche Nullstelle und verbessert die bisherigen Eigenwerte. Zum Vergleich wurden die Nullstellen des anharmonischen Oszillators in der ω-Skala durch direkte numerische Integration aus der SCRÖDINGER-Gleichung bestimmt [14], siehe Tab. 1.

In ihr werden die mittels der SCHRÖDINGER-Gleichung bestimmten ω-Werte (erste Spalte) mit den Polynom-Näherungen $N = 3$, $N = 7$ und $N = 10$ aufgeführt. In Abb. 2 und Abb. 3 wird die Güte der Approximation an die tatsächlichen Eigenwerte des anharmonischen Oszillators graphisch dargestellt.

	SCHRÖDINGER-Gl.	$N = 3$	$N = 7$	$N = 10$
$E_0 =$ 0,420806	$\omega_{20} =$ 2,538068	2,527220	2,538080	2,538070
$E_2 =$ 2,958874	$\omega_{40} =$ 6,032747	6,475200	6,028250	6,032810
$E_4 =$ 6,453553	$\omega_{60} =$ 10,107105			
$E_6 =$ 10,527911	$\omega_{42} =$ 3,494679	3,505640	3,496200	3,494620

Tab. 1.

[12] Man benötigt dazu den Summensatz, welcher eine vollständige Quantentheorie voraussetzt.

[13] K. LAGALLY, Privatmitteilung.

[14] Rechnung auf der IBM-Rechenanlage 7090 des Instituts für Plasmaphysik, Garching bei München.

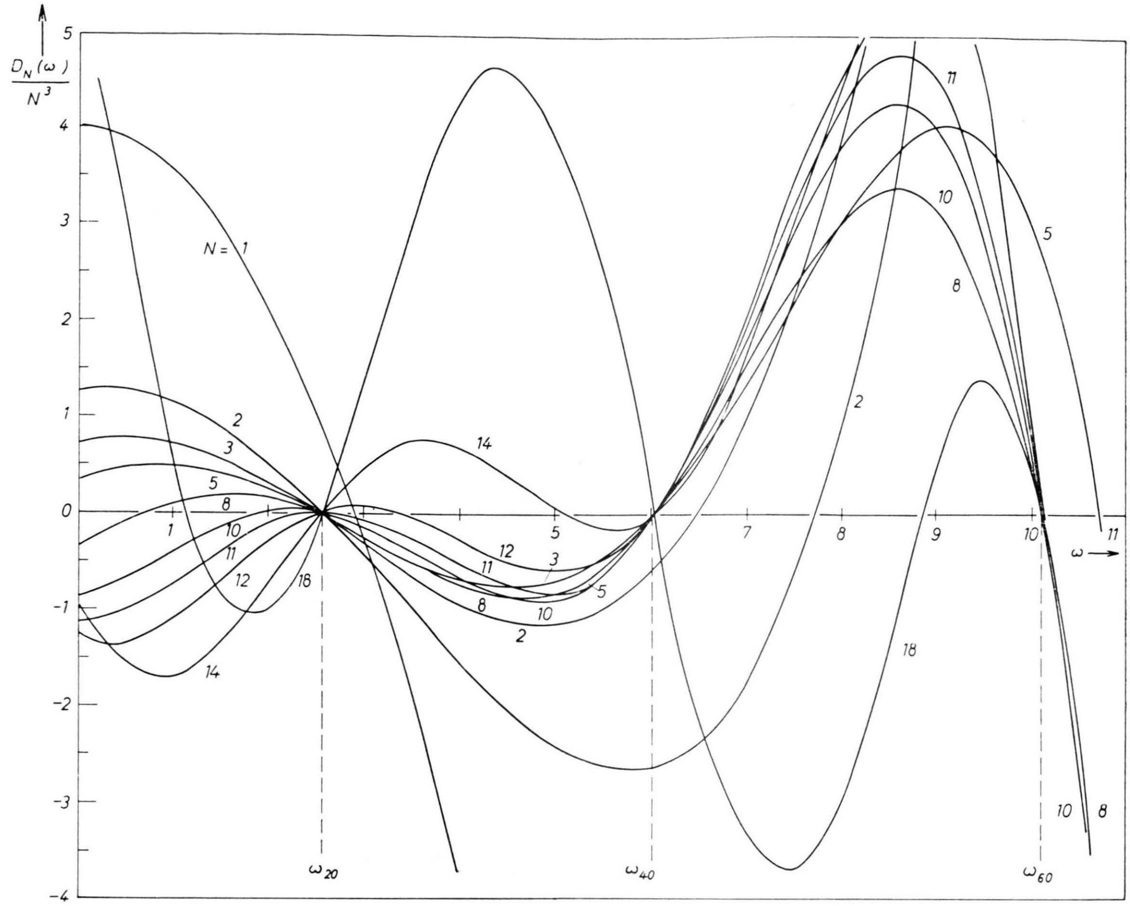

Abb. 1. $D_N(\omega)/N^3$ in Abhängigkeit von ω und N.

Zugleich wurde zusätzlich der Wert von Δ variiert, um festzustellen, welchen Einfluß eine solche Variation auf die Approximationsgüte hat. Die Kurven werden dort abgebrochen, wo die Annäherung an die wirklichen Werte unter die Rechengenauigkeit von $\Delta\omega = 7 \cdot 10^{-5}$ fällt. Wie man sieht, konvergieren die Nullstellen des τ- bzw. φ-Systems ungeheuer rasch auf Grenzwerte, welche mit den Eigenwerten

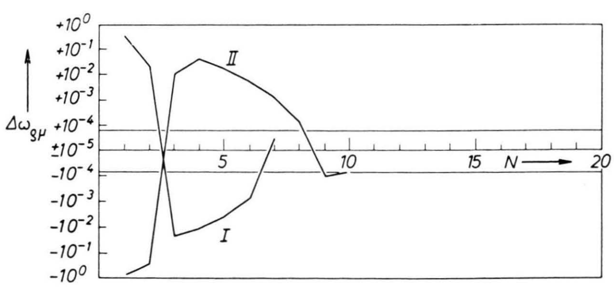

Abb. 2. Fehler $\Delta\omega_{\varrho\varkappa} = (\omega_{\varrho\varkappa}^N - \omega_{\varrho\varkappa})$ in Abhängigkeit von N.

I. Verbesserung des Eigenwertes von ω_{20}^N im Laufe der Näherung $N=1, 2, \ldots$ gegenüber dem exakten Wert ω_{20}. Für $N=7$ ist die Fehlergrenze $7 \cdot 10^{-5}$ der Maschinenrechnung erreicht.

II. Analog wie I, diesmal für ω_{42}^N gegenüber dem exakten Wert $\omega_{42} = (E_4 - E_2)$. Diese Rechnung ist also für höhere Übergangselemente ausgeführt worden, s. Anmerkung [5]! Bei I und II ist $\Delta = \frac{1}{2}$.

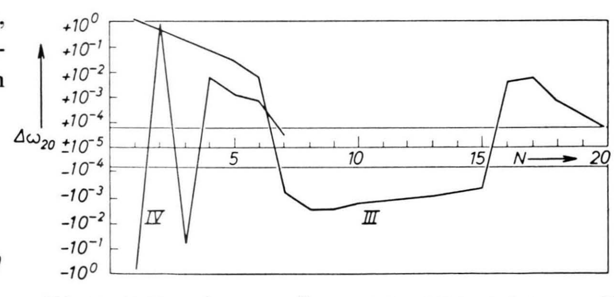

Abb. 3. Fehler $\Delta\omega_{20} = (\omega_{20}^N - \omega_{20})$ in Abhängigkeit von N und Δ. Dieselben Bemerkungen wie bei I und II, hier bezogen auf $\Delta\omega_{20}$. Bei III wurde $\Delta = 0{,}8$, bei IV wurde $\Delta = 0{,}2$ gesetzt. Die Wahl von Δ beeinflußt für niedrige Näherungen die Approximationsgüte merklich.

der SCHRÖDINGER-Gleichung übereinstimmen, wie in § 5 behauptet wurde.

Neben den physikalischen Nullstellen besitzen die Φ_N bzw. die D_N auch unphysikalische Nullstellen. Da der Grad von D_N in ω gleich $2\,N$ ist, wobei aber nur N physikalische Nullstellen auftreten dürfen, muß es also auch N unphysikalische Nullstellen geben. Untersucht man zunächst dieses Problem numerisch, so stellt man fest, daß bei diesen Nullstellen keine Konvergenz auftritt; die „Geister"-Nullstellen laufen vielmehr bei höheren Näherungen vom negativen in den positiven Bereich der ω-Achse hinüber. Ein solches Verhalten steht aber nicht im Widerspruch zum Konvergenzbeweis des § 3. Dort wurde nämlich das Säkularpolynom in der WEIERSTRASSschen Produktdarstellung angeschrieben, wobei nullstellenfreie ganze transzendente Funktionen in (37) als konvergenzerzeugende Faktoren auftreten. Eine solche Darstellung ist aber nur im limes $N \rightarrow \infty$ möglich. Für jedes endliche N können die nullstellenfreien Konvergenzfaktoren nur durch Polynome approximiert werden. Diese Polynome sind aber für endliche N nicht nullstellenfrei. Sie verlieren ihre Nullstellen erst im Grenzübergang $N \rightarrow \infty$. Es ist daher zu vermuten, daß die beobachteten „Geister"-nullstellen mit jenen approximierten Konvergenzfaktoren zusammenhängen, und daß im Grenzübergang $N \rightarrow \infty$ nur noch die physikalischen Nullstellen übrigbleiben. Da es sich um eine naheliegende, aber unbewiesene Vermutung handelt, ist eine weitere Untersuchung dieses Problems nötig.

Herrn Prof. Dr. W. HEISENBERG und Herrn Dr. DÜRR danken wir für das der Themenstellung entgegengebrachte freundliche Interesse und eine Diskussion der Arbeit auf das Beste. Ebenfalls danken wir Herrn K. LAGALLY für eine Diskussion der E_0-Abhängigkeit von (12) und seine Hilfe bei der Programmierung der numerischen Rechnung. Dem Institut für Plasmaphysik in Garching danken wir für die auf der IBM-Rechenanlage 7090 zur Verfügung gestellte Rechenzeit.