Die Gel'fand-Levitan-Theorie in der Streutheorie der Quantenmechanik

Diplomarbeit

vorgelegt von

Matthias Vögeler

Münster, 10 März 1999

Thema gestellt von

Prof. Dr. F. Natterer

Westfälische Wilhelms-Universität Münster
Institut für
Numerische und Instrumentelle Mathematik

„. . . und alle sogenannten exakten Naturwissenschaftler sind grundsätzlich immer auf verzerrte und karge Informationen, die ihnen über Sinnesprozesse und Meßinstrumente übermittelt werden, angewiesen."

Paul Tholey

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einführung

1.1 Einleitung

Das Thema dieser Arbeit ist die Lösung des inversen Streuproblems in der nicht relativistischen Quantenmechanik. Um genau zu verstehen, was sich dahinter verbirgt, werden die physikalischen Zusammenhänge im folgendem erläutert.

Gegenstand der Untersuchung wird ein spezieller Streuprozeß sein. Dieser ist ein dynamischer Vorgang, bei dem ein Teilchenstrahl auf ein Target geschossen wird. Der Meßprozeß erstreckt sich nun in der Ermittlung der Anzahl der Teilchen, die pro Sekunde durch das Target in einen bestimmten Raumbereich gestreut worden sind. Diese Meßgröße wird differentieller Wirkungsquerschnitt genannt.

Bei der Behandlung des direkten Streuproblems kennt der Theoretiker die Aufstellung des Experimentes, das heißt, ihm ist die Art der Wechselwirkung zwischen den Teilchen und dem Target bekannt. Dieses Wissen benutzt er, um die Meßergebnisse in dem Experiment vorauszusagen. So ein Vorgehen ermöglicht eine Bestätigung der Theorie durch das Experiment.

Das inverse Streuproblem zeichnet sich nun dadurch aus, daß einerseits die genaue Wechselwirkung zwischen den Teilchen und dem Target unbekannt ist und andererseits experimentelle Daten vorliegen. Das Ziel ist nun eine Theorie, die eine Verbindung zwischen den bekannten experimentellen Daten und der Art der Wechselwirkung zwischen den Teilchen und dem Target herstellt.

In dieser Arbeit hat das physikalische System folgende Gestalt: Betrachtet wird ein Teilchen, beschrieben durch ein Wellenpaket, daß auf ein Zentralpotential zuläuft. Der Streuprozeß ist nun die Wechselwirkung zwischen dem Wellenpaket und dem Potential. Dabei wird vorausgesetzt, daß das Wellenpaket keinen Einfluß auf das Potential hat. Dies ist in der physikalischen Realität natürlich keinesfalls selbstverständlich. Zum Beispiel entstehen „Deformationen“ des Potentials, wenn es durch ein Atom bzw. ein Molekül gebildet wird und das wechselwirkende Teilchen ein Proton mit „hoher“ Energie ist.
Das Teilchen wird ab hier Projektil und das Potential auch Target genannt. Abbildung 1.1 verdeutlicht noch einmal den physikalischen Sachverhalt.

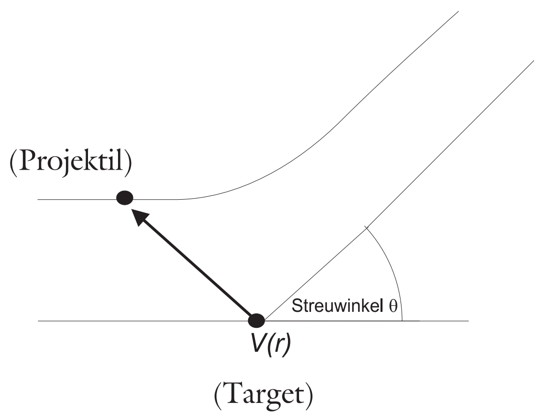

Abbildung 1.1: Der Streuprozeß

Bei der Behandlung des inversen Streuproblems ist dem Theoretiker die quantitative Stärke des Potentials unbekannt. Bekannt ist ihm hingegen, einerseits das qualitative Verhalten des Zentralpotentials im Ursprung und im Unendlichen und andererseits diverse „Meßergebnisse“. Was diese „Meßergebnisse“ genau sind, wird erst später im Text dargestellt.
Die Theorie, die die Verbindung zwischen den „Meßergebnissen“ und dem Potential herstellt, ist die sogenannte Gel'fand-Levitan-Theorie ([Gel'fand,Levitan;1955]).

Wir werden noch sehen, daß die experimentellen Daten, die zur Zeit bei einem realen Streuprozeß gesammelt werden können, nicht genügen, um die erforderlichen Daten für die Gel'fand-Levitan-Theorie bereitzustellen. Deshalb kann hier schon eingestanden werden, daß der Gel'fand-Levitan-Theorie trotz ihrer formalen Eleganz keine besonders große praktische Bedeutung zukommt.

1.2 Grundlagen

Dieser Abschnitt beinhaltet die nötigen mathematischen Sätze und Definitionen für diese Arbeit.

Volterrasche Integralgleichungen

Definition 1.1 *Die* `Volterrasche Integralgleichung` *auf* $L_2[a,b]$ *ist definiert als*

$$\phi(x) = f(x) + \int_a^x \mathrm{d}y \, K(x,y)\phi(y).$$

Dabei sei $f(x) \in L_2[a,b]$*, und für den Kern* K *gelte:* $\int_a^b \mathrm{d}x \int_a^b \mathrm{d}y \, |K(x,y)|^2 < \infty$.

Definition 1.2 *Es gelten die Bezeichnungen von Definition 1.1. Dann ist die* `Neumannsche Reihe` *definiert als* $\sum_{n=0}^{\infty} K^n f$*. Der Operator* K *ist dabei definiert als* $(Kf)(x) := \int_a^x \mathrm{d}y \, K(x,y)f(y)$ *mit* $K^0 f = f$.

Satz 1.3 *Für* $f(x)$ *und* $K(x,y)$ *aus Definition 1.1 existiert eine Lösung* $\phi \in L_2[a,b]$ *der Volterraschen Integralgleichung, nämlich* $\phi = \sum_{n=0}^{\infty} K^n f$*. Die Neumannsche Reihe konvergiert dabei fast überall gleichmäßig. Die Lösung* ϕ *ist im* L_2*-Sinne eindeutig, das heißt zwei Lösungen sind bis auf Nullmengen im Lebesgueschen-Sinne eindeutig.*

Beweis: Siehe [Heuser;1992]. □

Satz 1.4 *Die Volterrasche Integralgleichung*

$$\phi(x) = f(x) + \int_0^x \mathrm{d}y \, K(x,y)\phi(y),$$

mit dem Kern $K(x,y)$ und der Funktion $f(x)$ wie in Definition 1.1, hat eine (bis auf Nullmengen) eindeutige Lösung $\phi(x)$ in L_2. Die Lösung ist gegeben durch die Formel

$$\phi(x) = f(x) - \int_0^x \mathrm{d}y\, H(x,y) f(y),$$

wobei die „Resolvente" H(x,y) gegeben ist durch die Reihe der iterierten Kerne

$$H(x,y) = -\sum_{\nu=0}^{\infty} K_{\nu+1}(x,y), \tag{1.1}$$

mit $K_1(x,y) := K(x,y)$ und $K_{\nu+1}(x,y) := \int_0^x \mathrm{d}z\, K(x,z)K(z,y)$, $n \geq 1$. Die Reihe in (1.1) konvergiert fast überall. Die Resolvente erfüllt die Integralgleichung

$$\begin{aligned} K(x,y) + H(x,y) &= \int_y^x \mathrm{d}z\, K(x,z)H(z,y) \\ &= \int_y^x \mathrm{d}z\, H(x,z)K(z,y). \end{aligned}$$

Beweis: Siehe [Tricomi;1957] Seite 10. □

Fredholmsche Integralgleichung

Definition 1.5 *Sei $f(x) \in L_2[a,b]$ und $K(x,y)$ ein L_2-Kern in $[a,b]$, das heißt*

$$\int_a^b \mathrm{d}x \int_a^b \mathrm{d}y\, |K(x,y)|^2 < \infty.$$

Dann ist

$$\phi(x) = f(x) + \int_a^b \mathrm{d}y\, K(x,y)\phi(y) \tag{1.2}$$

eine `Fredholmsche Integralgleichung` *in $L_2[a,b]$, falls die Lösungen $\phi(x)$ in $L_2[a,b]$ gesucht sind.*

Satz 1.6 (Fredholmscher Alternativsatz) *Es gelten die Bezeichnungen wie in Definition 1.5. Dann hat die Fredholmsche Integralgleichung (1.2) genau dann eine (bis auf Nullmengen) eindeutige Lösung $\phi(x) \in L_2[a,b]$, wenn die zugehörige homogene Integralgleichung*

$$\phi(x) - \int_a^b \mathrm{d}y\, K(x,y)\phi(y) = 0$$

nur die triviale Lösung $\phi \equiv 0$ in $L_2[a,b]$ besitzt.

Beweis: Siehe [Heuser;1992]. □

Integralgleichungen mit symmetrischem Kern

Wir betrachten hier Integralgleichungen der Form

$$\phi(x) = \lambda \int \mathrm{d}y \, K(x,y)\phi(y), \tag{1.3}$$

mit $K(x,y) = K(y,x)$.

Definition 1.7 *Erfüllen λ und $\phi(x) \not\equiv 0$ Gleichung (1.3), dann nennt man λ* `Eigenwert` *und $\phi(x)$* `Eigenfunktion` *zum Kern K(x,y).*

Satz 1.8 *Jeder Eigenwert eines symmetrischen Kerns ist reell, und zwei Eigenfunktionen $\phi_1(x), \phi_2(x)$ zu verschiedenen Eigenwerten sind zueinander orthogonal, das heißt*

$$\int \mathrm{d}x \, \phi_1(x)\phi_2(x) = 0.$$

Beweis: Siehe [Tricomi;1957]. □

Satz 1.9 (Mercers Theorem) *Sei $K(x,y)$ ein stetiger und symmetrischer L_2-Kern mit den Eigenwerten λ_h und den zugehörigen orthonormalen Eigenfunktionen ϕ_h, $h \in \mathbb{N}$. Alle bis auf endlich viele negative Eigenwerte seien positiv. Dann ist die Reihe*

$$\sum_{h=1}^{\infty} \frac{\phi_h(x)\phi_h(y)}{\lambda_h}$$

absolut und gleichmäßig konvergent, und es gilt die Gleichung

$$K(x,y) = \sum_{h=1}^{\infty} \frac{\phi_h(x)\phi_h(y)}{\lambda_h}.$$

Beweis: Siehe [Tricomi;1957].

Wegen der Orthogonalität der Eigenfunktionen ϕ_h folgt leicht das

Korollar 1.10 *Mit den Bezeichnungen und Voraussetzungen von Mercers Theorem gilt*

$$\sum_{h=1}^{\infty} \lambda_h^{-1} = \int \mathrm{d}x \, K(x,x).$$

Gewöhnliche Differentialgleichungen 2. Ordnung

Definition 1.11 *Eine allgemeine* `Differentialgleichung zweiter Ordnung` *ist*

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} + p(x)\frac{df(x)}{dx} + q(x)f(x) = 0, \tag{1.4}$$

wobei die beiden auftretenden Funktionen p, q reelle Funktionen der reellen Variablen x sind.

Einfache Resultate sind:

Satz 1.12 *Die allgemeine Lösung von (1.4) ist eine Linearkombination von zwei beliebigen linear unabhängigen Lösungen dieser Differentialgleichung.*

Beweis: Siehe [Heuser;1989]. □

Satz 1.13 *Für zwei beliebige Lösungen $\varphi(x), \psi(x)$ der Gleichung (1.4) ist die Wronskische Determinante $W(\phi(x), \psi(x)) = \phi(x)\psi'(x) - \phi'(x)\psi(x) = C \neq C(x)$ konstant.*

Beweis: Siehe [Heuser;1989]. □

Satz 1.14 (Existenz und Eindeutigkeit) *Sind die reellen Funktionen $p(x)$ und $q(x)$ auf einem Intervall $J \subset \mathbb{R}$ stetig, so besitzt die gewöhnliche Differentialgleichung (1.4) mit den Anfangswerten*

$$f(x_0) = f_0, \quad f'(x_0) = f_1$$

für willkürlich vorgeschriebene reelle Zahlen $x_0 \in J$ und $f_0, f_1 \in \mathbb{R}$ eine eindeutige, auf ganz J existierende Lösung $f(x)$.

Beweis: Siehe [Heuser;1989]. □

Definition 1.15 *Wenn ein $c \in \mathbb{R}$ existiert, so daß in Gleichung (1.4) $p(x)$ oder $q(x)$ nicht endlich in c sind, dafür aber $\lim_{x\to c}(x-c)p(x)$ und $\lim_{x\to c}(x-c)^2 q(x)$ existiert, dann wird c* `schwach singulärer Punkt` *genannt.*
In diesem Fall heißt eine Lösung der gewöhnlichen Differentialgleichung (1.4) `schwach singuläre Lösung`.

Satz 1.16 *Sei c ein schwach singulärer Punkt, und*

$$\begin{aligned}\lim_{x\to c}(x-c)p(x) &=: p_0,\\ \lim_{x\to c}(x-c)^2q(x) &=: q_0.\end{aligned}$$

Weiter seien ϱ_1 und ϱ_2 die beiden Lösungen der sogenannten Indexgleichung

$$\varrho^2+(p_0-1)\varrho+q_0=0,$$

und ihre Differenz keine ganze Zahl.
Dann ist jede Lösung der Differentialgleichung (1.4) eine Linearkombination von zwei Fundamentallösungen der Form

$$\begin{aligned}\Psi_1(x) &= (x-c)^{\varrho_1}\Phi_1(x),\\ \Psi_2(x) &= (x-c)^{\varrho_2}\Phi_2(x).\end{aligned}$$

Die beiden auftretenden Funktionen Φ_1 und Φ_2 sind bei c endlich. Auf den Fall, daß $\varrho_1-\varrho_2$ eine ganze Zahl ist, wird hier nicht näher eingegangen.

Beweis: Siehe [Heuser;1989] oder [Whittaker,Watson;1927]. □

Ganze Funktionen

Hier wird ein Satz über ganze Funktionen zitiert, der für die Entwicklung der Gel'fand-Levitan-Theorie sehr wichtig sein wird. Zunächst wollen wir allerdings zwei Begriffe klären.

Definition 1.17 *Eine Funktion $f:\mathbb{C}\longrightarrow\mathbb{C}$, $z\mapsto f(z)$, heißt* `ganz`*, wenn sie für alle $z\in\mathbb{C}$ holomorph ist.*

Definition 1.18 *Sei $f(z)$ eine ganze Funktion, und*

$$M(r):=\max_{0\le\theta\le 2\pi}|f(re^{i\theta})|.$$

Dann ist die Funktion $f(z)$ genau dann vom `exponentiellen Typ` *α, wenn und nur wenn*

$$\limsup_{r\to\infty}[(\log r)^{-1}\log\log M(r)]=1$$

und

$$\limsup_{r\to\infty}[r^{-1}\log M(r)]=\alpha.$$

Anschließend formulieren wir den angekündigten Satz:

Satz 1.19 (Paley-Wiener) *Sei $f(z)$ eine ganze Funktion. Sie ist vom exponentiellen Typ α und ihre Einschränkung auf die reelle Achse gehört genau dann und nur dann zu $L_2(-\infty,\infty)$, wenn folgende Darstellung*

$$f(z) = \int_{-\alpha}^{\alpha} \mathrm{d}t \, \tilde{f}(t) \mathrm{e}^{\mathrm{i}tz}$$

möglich ist, wobei $\tilde{f}(t) \in L_2(-\alpha,\alpha)$.

Definition 1.18 und der Beweis zu Satz 1.19 von Paley-Wiener können in [Boas;1954] oder in [Chandrasekharan;1987] nachgelesen werden.

Der Hauptwert (Principal Value)

Definition 1.20 *Sei C eine positiv orientierte unendlich glatte Randkurve eines einfach zusammenhängenden Gebietes $G \subset \mathbb{C}$, $z \in C$, F eine auf $C - \{z\}$ bezüglich des Bogenmaßes $\mathrm{d}\zeta$ lokal integrierbare Funktion, und $C^\epsilon(z) := C - D_\epsilon(z)$, wobei $D_\epsilon(z)$ ein Kreis mit Mittelpunkt z und Radius ϵ ist. Die Grenzwerte*

$$\lim_{\epsilon \to 0} \int_{C^\epsilon(z)} |\mathrm{d}\zeta| \, F(\zeta), \quad \lim_{\epsilon \to 0} \int_{C^\epsilon(z)} \mathrm{d}\zeta \, F(\zeta), \quad \lim_{\epsilon \to 0} \int_{C^\epsilon(z)} \mathrm{d}\bar{\zeta} \, F(\zeta)$$

heißen `Hauptwerte` *der betreffenden Integrale über C und werden, falls sie existieren, mit*

$$\mathcal{P} \int_C |\mathrm{d}\zeta| \, F(\zeta), \quad \mathcal{P} \int_C \mathrm{d}\zeta \, F(\zeta) \quad \textit{und} \quad \mathcal{P} \int_C \mathrm{d}\bar{\zeta} \, F(\zeta)$$

bezeichnet. Neben dem Ausdruck Hauptwert ist auch der Ausdruck `Principal Value` *gebräuchlich.*

Definition 1.21 *Eine Funktion f heißt auf $M \subset \mathbb{R}^n$* `gleichmäßig hölderstetig` *vom Exponenten $\mu > 0$ (kurz: μ-*`hölderstetig`*), wenn es eine Konstante $K \in \mathbb{R}$ gibt, so daß für alle $x, y \in M$*

$$|f(x) - f(y)| \leq K|x-y|^\mu$$

ist.

Für eine beliebige stetige Funktion f wird der Hauptwert von

$$\int_C \mathrm{d}\zeta \frac{f(\zeta)}{\zeta - z}$$

im allgemeinen nicht existieren. Jedoch gilt der Satz

Satz 1.22 *Es sei $0 < \mu < 1$ und C wie in Definition 1.20. Ist f auf C gleichmäßig μ-hölderstetig, so existiert für jedes $z \in C$ der Hauptwert*

$$\mathcal{P}\frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int_C \mathrm{d}\zeta \, \frac{f(\zeta)}{\zeta - z}$$

(gleichmäßig in z) und ist eine auf C gleichmäßig μ-hölderstetige Funktion.

Beweis: Siehe [Fischer;1988] Paragraph 12. □

Außerdem gilt der wichtige Satz:

Satz 1.23 *Sei f eine gleichmäßig μ-hölderstetige Funktion auf C, mit C aus Definition 1.20 und $0 < \mu < 1$. Die Funktionen F^+ und F^- seien durch*

$$\left.\begin{array}{c} F^+(z) \\ F^-(z) \end{array}\right\} = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int_C \mathrm{d}\zeta \, \frac{f(\zeta)}{\zeta - z} \quad \textit{für} \quad \left\{\begin{array}{l} z \in G \\ z \notin \bar{G} \end{array}\right.$$

erklärt. Dann sind beide Funktionen stetig nach $\bar{G}$ bzw. $\mathbb{C} \setminus G$ fortsetzbar, und auf dem gemeinsamen Definitionsbereich C gelten die Beziehungen

$$\begin{aligned} F^+(z) + F^-(z) &= 2\mathcal{P}\frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int_C \mathrm{d}\zeta \, \frac{f(\zeta)}{\zeta - z}, \\ F^+(z) - F^-(z) &= f(z). \end{aligned}$$

Diese beiden Formeln werden auch `Plemeljsche Formeln` *genannt.*

Beweis: Siehe [Fischer;1988] Paragraph 12. □

Eine einfache Folgerung ist

Korollar 1.24 *Sei $C = \partial G$, G wie in Definition 1.20 und f eine in G holomorphe und auf $\bar{G}$ stetige Funktion, die auf dem Rand ∂G gleichmäßig μ-hölderstetig mit $0 < \mu < 1$ ist. Dann ist für alle $z \in \partial G$*

$$f(z) \;=\; \mathcal{P}\frac{1}{\pi \mathrm{i}} \int_{\partial G} \mathrm{d}\zeta \, \frac{f(\zeta)}{\zeta - z}.$$

Beweis: Satz 1.23 und die Cauchysche Integralformel. □

Kapitel 2

Streutheorie

Um das inverse Problem zu studieren, bedarf es zunächst einer ausführlichen Diskussion des direkten Problems. Dieses wird in diesem und im nächsten Kapitel geschehen.

2.1 Hinführung

Ein nicht-relativistisches quantenmechanisches System wird durch die Schrödinger-Gleichung

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta_{\boldsymbol{x}} + V(\boldsymbol{x},t)\right)\Psi(\boldsymbol{x},t) = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{x},t)$$

beschrieben. Hierbei ist $\boldsymbol{x}$ der Koordinatenvektor, $\hbar$ das Plancksche Wirkungsquantum, m die Masse, V das Potential und ψ die gesuchte, das quantenmechanische System beschreibende sogenannte Wellenfunktion. Diese partielle Differentialgleichung kann nicht deduktiv hergeleitet werden, sondern ist, ähnlich wie die Newtonschen Axiome, gegeben.

Hier wird die Streuung eines nicht-relativistischen und spinlosen Teilchens der Masse M an einem zeitunabhängigen Zentralpotential U quantenmechanisch betrachtet. Es ist offensichtlich sinnvoll den Ortskoordinatenursprung in das „Zentrum" unseres Potentials $U = U(r)$, $r = |\boldsymbol{x}|$, zu setzen.

Da wir das Potential U als zeitunabhängig voraussetzen, kann die Schrödinger-Gleichung durch den Separationsansatz mit der Separationskonstanten $\mathcal{E}$ in zwei gewöhnliche Differentialgleichungen getrennt werden. Die Konstante $\mathcal{E}$ wird als die Energie des Systems bezeichnet. Für die Beschreibung des Streuproblems genügt es daher, die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta\Psi(\boldsymbol{x}) + U(r)\Psi(\boldsymbol{x}) = \mathcal{E}\Psi(\boldsymbol{x}) \tag{2.1}$$

zu betrachten. Werden nun die Bezeichnungen

$$E := \frac{2M\mathcal{E}}{\hbar^2},\ V(r) := \frac{2MU(r)}{\hbar^2} \quad \text{und} \quad k^2 := E$$

eingeführt, so schreibt sich Gleichung (2.1) als

$$\Delta\Psi(\boldsymbol{x}) + k^2\Psi(\boldsymbol{x}) - V(r)\Psi(\boldsymbol{x}) = 0. \tag{2.2}$$

Der Term $E = k^2$ ist also die skalierte Energie des Systems und die Funktion $V(r)$ das skalierte zentralsymmetrische Potential. Im folgenden werden wir $E = k^2$ als die Energie des physikalischen Systems und $V(r)$ als Potential bezeichnen.

Das zentralsymmetrische Potential legt es nahe, obige Gleichung in Kugelkoordinaten (r, θ, φ) zu transformieren. Zum Beispiel ist in [Nolting;1993] detailliert nachzulesen, daß sich Gleichung (2.2) durch den Ansatz

$$\Psi(\boldsymbol{x}) = \frac{\psi(r)}{r} Y_l^m(\theta, \varphi) \tag{2.3}$$

in die Gleichung

$$\frac{d^2\psi(r)}{dr^2} + k^2\psi(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\psi(r) - V(r)\psi(r) = 0 \tag{2.4}$$

überführen läßt. Hierbei sind $Y_l^m(\theta, \varphi)$ die Kugelflächenfunktionen, wobei $l \in \mathbb{N}$ und $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$. Die Parameter l und m sind die sogenannten Quantenzahlen des Bahndrehimpulses des Projektils.

Bemerkung: Der Laplace-Operator in Kugelkoordinaten ist für $r = 0$ nicht definiert. Deshalb führt eine Lösung $\psi(r)$ der Gleichung (2.4) nicht unbedingt zu einer Lösung $\Psi(\boldsymbol{x})$ der Gleichung (2.2) für $r = 0$. Daher muß explizit überprüft werden, ob sich $\psi(r)$ im Ursprung hinreichend regulär verhält.

Um eine brauchbare Diskussion der Gleichung (2.4) zu ermöglichen, bedarf es noch einiger Bedingungen für das Potential $V(r)$. Für die Behandlung des direkten Problems genügt es, wenn $V(r)$ fast überall stetig ist und folgende Integrabilitätsbedingungen erfüllt:
Am Ursprung soll $V(r)$ der Bedingung

$$\int_0^a \mathrm{d}r\, r|V(r)| =: N(a) < \infty, \quad a < \infty \tag{2.5}$$

genügen. Im unendlichen wird von ihm gefordert, daß

$$\int_b^\infty \mathrm{d}r\, |V(r)| =: M(b) < \infty, \quad b > 0. \tag{2.6}$$

Wenn vermieden werden soll, daß das System unendlich viele „gebundene Zustände“ ($\psi \in L_2(0,\infty)$) einnehmen kann, so muß sogar gefordert werden, wie später noch gezeigt wird (Abschnitt 3.2.2), daß $r|V(r)|$ im Unendlichen absolut integrierbar ist. Mit der Bedingung (2.5) folgt somit

$$\int_b^\infty \mathrm{d}r\, r|V(r)| < \infty, \quad b \geq 0. \tag{2.7}$$

Diese letzte Bedingung an das Potential besagt, ungenau ausgedrückt, daß es bei Null schwächer ansteigt als r^{-2} und im Unendlichen stärker abfällt als r^{-2}. In der Literatur werden Potentiale, die der Bedingung (2.7) genügen, regulär genannt und die anderen singulär.

Für die Behandlung des inversen Problems müssen wir, wie später deutlich wird, zusätzlich fordern, daß das Potential $V(r)$ bei $r = 0$ integrierbar ist.

Die Integrabilitätsbedingungen erweisen sich in der physikalischen Realität teilweise als sehr streng. Bedingung (2.6) wird beispielsweise von dem Coulomb-Potential verletzt. Die Theorie, die hier dargestellt wird, gilt, wie M.L. Baeteman und K. Chadan in ihrer Arbeit [Baeteman,Chadan;1976] gezeigt haben, ebenso für im Ursprung singuläre und stark oszillierende Potentiale, die die Bedingung (2.5) verletzen. Diese Verallgemeinerung wird hier aus Platzgründen nicht erarbeitet.

2.2 Lösung der Schrödinger-Gleichung mit einer Anfangsbedingung bei $r = 0$

Ausgangspunkt für die folgende mathematische Diskussion ist also die Differentialgleichung 2. Ordnung (2.4). Sie besitzt nach Definition 1.15 eine schwache Singularität bei $r = 0$. Wenn eine Lösung $\psi \in C^2(0, \infty)$ existiert, wird die Menge der Unstetigkeitsstellen von $\psi''(r)$ und von $V(r)$ gleich sein.

Wenn r *sehr klein* ist, kann der Ausdruck $k^2 - V(r)$ wegen Bedingung (2.5) im Vergleich zum sogenannten Zentrifugalpotential $-l(l+1)/r^2$ vernachlässigt werden. Es wird daher ein heuristischer Zugang zu der Lösung der Differentialgleichung (2.4) gewählt, indem der Term $k^2 - V(r)$ vernachlässigt wird. Dies führt zu der Gleichung

$$\psi''(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\psi(r) = 0. \tag{2.8}$$

Diese Gleichung besitzt eine schwache Singularität bei $r = 0$. Weiter kann die Differenz der beiden Lösungen der Indexgleichung wegen der Bedingung an l keine ganze Zahl sein. (Der Fall $l = 0$ bildet eine Ausnahme, aber auch für diesen Fall ändert sich hier nichts an der weiteren Betrachtung.) Deshalb kann nach Satz 1.16 die allgemeine Lösung von Gleichung (2.8) geschrieben werden als

$$\psi(r) = \alpha r^{l+1} + \beta r^{-l}. \tag{2.9}$$

Gleichung (2.9) legt die Einführung von zwei Fundamentallösungen φ, φ_1 der Schrödinger-Gleichung (2.4) nahe, die den Bedingungen

$$\begin{aligned} \varphi(r) &= r^{l+1}(1 + o(1)) \quad \text{für } r \to 0, \\ \varphi_1(r) &= r^{-l}(1 + o(1)) \quad \text{für } r \to 0, \end{aligned} \tag{2.10}$$

genügen. Für die weitere Diskussion wird es vorteilhaft sein, $\lambda := l + 1/2$ in die Schrödinger-Gleichung (2.4) zu substituieren. Wir erhalten somit

$$\psi''(r) + \left[k^2 - \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2} - V(r)\right]\psi(r) = 0. \tag{2.11}$$

Obige Differentialgleichung ist nun gerade in λ. Es bietet sich daher an, $\varphi(\lambda, k, r)$ und $\varphi(-\lambda, k, r)$ anstatt von $\varphi(r)$ und $\varphi_1(r)$ zu verwenden.

Bis hierher ist noch nicht einmal die Existenz der Lösung der Gleichung (2.11) gesichert. Diese wird nun konstruktiv mit Hilfe des Verfahrens der Variation der Konstanten und den Bedingungen (2.10) ermittelt. Dafür wird

$$\varphi(\lambda,k,r) = \alpha(r)r^{\lambda+\frac{1}{2}} + \beta(r)r^{-\lambda+\frac{1}{2}} \tag{2.12}$$

gesetzt. Hierbei sind α und β nicht länger Konstanten und von λ wird im folgenden angenommen, daß es eine beliebige komplexe Zahl ist. Die Bedingung (2.10) ist nun äquivalent mit

$$\begin{aligned} \lim_{r\to 0} \alpha(r) &= 1, \\ \lim_{r\to 0} \beta(r) &= 0. \end{aligned} \tag{2.13}$$

Außerdem fordern wir zusätzlich

$$\alpha'(r)r^{\lambda+\frac{1}{2}} + \beta'(r)r^{-\lambda+\frac{1}{2}} = 0, \tag{2.14}$$

so daß

$$\varphi'(\lambda,k,r) = (\lambda+\tfrac{1}{2})\alpha(r)r^{\lambda-\frac{1}{2}} - (\lambda-\tfrac{1}{2})\beta(r)r^{-\lambda-\frac{1}{2}}$$

und

$$\varphi''(\lambda,k,r) = \frac{1}{r^2}(\lambda^2-\tfrac{1}{4})\varphi(\lambda,k,r)+(\lambda+\tfrac{1}{2})\alpha'(r)r^{\lambda-\frac{1}{2}}-(\lambda-\tfrac{1}{2})\beta'(r)r^{-\lambda-\frac{1}{2}}. \tag{2.15}$$

Wird Gleichung (2.15) nun in die Differentialgleichung (2.11) substituiert, folgt

$$(\lambda+\tfrac{1}{2})\alpha'(r)r^{\lambda-\frac{1}{2}} - (\lambda-\tfrac{1}{2})\beta'(r)r^{-\lambda-\frac{1}{2}} = [V(r)-k^2]\varphi(\lambda,k,r). \tag{2.16}$$

Die Gleichungen (2.14) und (2.16) können nun als ein Gleichungssystem mit den unbekannten Funktionen $\alpha'(r)$ und $\beta'(r)$ aufgefaßt werden. Seine Lösung ergibt sich hier leicht durch Anwendung der Cramerschen Regel und ist

$$\begin{aligned} \alpha'(r) &= \frac{1}{2\lambda}[V(r)-k^2]\varphi(\lambda,k,r)r^{-\lambda+\frac{1}{2}}, \\ \beta'(r) &= -\frac{1}{2\lambda}[V(r)-k^2]\varphi(\lambda,k,r)r^{\lambda+\frac{1}{2}}. \end{aligned} \tag{2.17}$$

Wird nun Bedingung (2.13) zusammen mit (2.17) benutzt, folgen Integraldarstellungen für $\alpha(r)$ und $\beta(r)$

$$\begin{aligned}\alpha(r) &= 1+\frac{1}{2\lambda}\int_0^r \mathrm{d}\rho\,[V(\rho)-k^2]\varphi(\lambda,k,\rho)\rho^{-\lambda+\frac{1}{2}},\\ \beta(r) &= -\frac{1}{2\lambda}\int_0^r \mathrm{d}\rho\,[V(\rho)-k^2]\varphi(\lambda,k,\rho)\rho^{\lambda+\frac{1}{2}}.\end{aligned} \tag{2.18}$$

Benutzung von (2.18) und (2.12) liefert eine Integralgleichung für $\varphi(\lambda,k,r)$

$$\varphi(\lambda,k,r)=r^{\lambda+\frac{1}{2}}+\frac{1}{2\lambda}\int_0^r \mathrm{d}\rho\,\left[\left(\frac{\rho}{r}\right)^{\lambda}-\left(\frac{r}{\rho}\right)^{\lambda}\right]\sqrt{r\rho}[k^2-V(\rho)]\varphi(\lambda,k,\rho). \tag{2.19}$$

Diese Gleichung ist eine Volterrasche Integralgleichung. Sie liefert genau dann eine im Lebesgueschen Sinne eindeutige Lösung, wenn die zugehörige Neumannsche Reihe

$$\varphi(\lambda,k,r)=\sum_{n=0}^{\infty}\varphi^{(n)}(\lambda,k,r), \tag{2.20}$$

die aus dieser Integralgleichung resultiert, gleichmäßig im Sinne der Maximumsnorm auf endliche Intervalle $[a,b]$ konvergiert. Hierbei ist $\varphi^{(0)}(\lambda,k,r):=r^{\lambda+1/2}$ und

$$\varphi^{(n+1)}(\lambda,k,r):=\frac{1}{2\lambda}\int_0^r \mathrm{d}\rho\,\left[\left(\frac{\rho}{r}\right)^{\lambda}-\left(\frac{r}{\rho}\right)^{\lambda}\right]\sqrt{r\rho}[k^2-V(\rho)]\varphi^{(n)}(\lambda,k,\rho) \tag{2.21}$$

für $n\geq 0$.

Um die gleichmäßige Konvergenz der rechten Seite von Gleichung (2.20) zu zeigen, unterscheiden wir zwischen den Fällen $\mu\geq 0$ und $\mu<0$, wobei $\mu := \mathrm{Re}\,(\lambda)$ und $\sigma := \mathrm{Im}\,(\lambda)$.

a) $\mu\geq 0$ und $\lambda\neq 0$.

Es gilt $|r^{\lambda+1/2}|=r^{\mu+1/2}$. Da weiter $0\leq\rho\leq r$ ist, gelten auch folgende Ungleichungen

$$\begin{aligned}\left|\left(\frac{\rho}{r}\right)^{\lambda}\right| &= \left|\frac{\rho}{r}\right|^{\mu}\leq\left|\frac{r}{\rho}\right|^{\mu},\\ \left|\left(\frac{\rho}{r}\right)^{\lambda}-\left(\frac{r}{\rho}\right)^{\lambda}\right| &\leq 2\left|\frac{r}{\rho}\right|^{\mu},\quad \rho\neq 0.\end{aligned} \tag{2.22}$$

Die **Behauptung** ist nun

$$|\varphi^{(n)}(\lambda,k,r)| \leq \frac{r^{\mu+\frac{1}{2}}}{n!|\lambda|^n}[P(r)]^n \tag{2.23}$$

mit

$$\begin{aligned} P(r) &:= \int_0^r \mathrm{d}\rho\,\rho|k^2 - V(\rho)| \leq \int_0^r \mathrm{d}\rho\,\rho|k^2| + \int_0^r \mathrm{d}\rho\,\rho|V(\rho)| \\ &= \frac{1}{2}|k^2|r^2 + N(r) < \infty. \end{aligned}$$

Beweis per Induktion:
Der Induktionsanfang für $n = 0$ ist wegen $\varphi^{(0)}(\lambda,k,r) = r^{\lambda+1/2}$ klar. Sei die Behauptung also für ein $n > 0$ bewiesen. Aus Gleichung (2.21) und den Ungleichungen aus (2.22) ergibt sich

$$\begin{aligned} |\varphi^{(n+1)}(\lambda,k,r)| &\leq \frac{r^{\mu+\frac{1}{2}}}{n!|\lambda|^{n+1}} \int_0^r \mathrm{d}\rho\,\rho|k^2 - V(\rho)|[P(\rho)]^n \\ &= \frac{r^{\mu+\frac{1}{2}}}{n!|\lambda|^{n+1}} \int_0^r \mathrm{d}\rho\,P'(\rho)[P(\rho)]^n \\ &= \frac{r^{\mu+\frac{1}{2}}}{(n+1)!|\lambda|^{n+1}}[P(r)]^{n+1}. \end{aligned}$$

Gleichung (2.23) gilt somit auch für $n + 1$. Damit ist die Behauptung bewiesen. □

Aus Gleichung (2.23) und Gleichung (2.20) folgt eine obere Grenze für die Lösung $\varphi(\lambda,k,r)$

$$|\varphi(\lambda,k,r)| \leq \sum_{n=0}^{\infty} |\varphi^{(n)}(\lambda,k,r)| \leq r^{\mu+\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{P(r)/|\lambda|}. \tag{2.24}$$

Dieses Ergebnis beweist somit die Existenz einer eindeutigen Lösung der Volterraschen Integralgleichung (2.19) für den Fall **a)**. Damit auch die Existenz einer eindeutigen Lösung der Differentialgleichung (2.11) mit der Randbedingung (2.10). Da weiter jede iterierte Funktion $\varphi^{(n)}(\lambda,k,r)$ für festes r und λ eine ganze Funktion bezüglich k^2 und für festes r und k holomorph für $\lambda \neq 0$ ist, ist nach Weierstraß wegen der lokal gleichmäßigen Konvergenz von (2.20) $\varphi(\lambda, k, r)$ holomorph im direkten Produkt $\{k|k \in \mathbb{C}\} \times \{\lambda|\mathrm{Re}\,(\lambda) \geq 0, \lambda \neq 0\}$.

Nun diskutieren wir den Fall

b) $\mu < 0$.

Um für diesen Fall Einsicht zu erlangen, genügt es

$$\varphi^{(1)}(\lambda, k, r) =: I_1 + I_2 + I_3 + I_4$$

zu betrachten, wobei

$$\begin{aligned} I_1 &:= \frac{r^{\lambda+\frac{5}{2}}}{2\lambda(2\lambda+2)}k^2, \quad I_2 := \frac{r^{\lambda+\frac{5}{2}}}{4\lambda}k^2, \\ I_3 &:= \frac{r^{\frac{1}{2}-\lambda}}{2\lambda}\int_0^r \mathrm{d}\rho\, V(\rho)\rho^{2\lambda+1}, \quad I_4 := \frac{r^{\lambda+\frac{1}{2}}}{2\lambda}\int_0^r \mathrm{d}\rho\, \rho V(\rho). \end{aligned}$$

Die k^2-Abhängigkeit von $\varphi^{(1)}(\lambda, k, r)$ und höherer Terme ist wieder polynomial.

Die λ-Abhängigkeit in I_1, I_2, I_4 ist klar, jedoch nicht in I_3. Aus der Potentialbedingung (2.5) läßt sich lediglich schließen, daß $|I_3| < \infty$ ist für $\mu > \mu_0$ und $\lambda \neq 0$, wobei $\mu_0 \leq 0$ ist. Für genauere Aussagen muß mehr über die Struktur des Potentials $V(r)$ bekannt sein. Dabei ist besonders das Verhalten von $V(r)$ für kleine r interessant, weil sich I_3 und damit $\varphi(\lambda, k, r)$ stark ändern kann, wenn sich $V(r)$ für kleine r ändert. Man sagt, daß sich $\varphi(\lambda, k, r)$ unstabil gegenüber kleinen Veränderungen in $V(r)$ verhält, wenn $\mathrm{Re}\,(\lambda) < 0$ ist.

Wir können also feststellen, daß beide Lösungen $\varphi(\lambda, k, r)$ und $\varphi(-\lambda, k, r)$ existieren, wenn $|\mu| \leq |\mu_0|$ und $\lambda \neq 0$ ist. Der Fall $\lambda = 0$ wurde bisher ausgeklammert. Er scheint auch recht problematisch zu sein, denn die rechte Seite der Abschätzung (2.24) wird für $\lambda \to 0$ gegen Unendlich konvergieren. Dennoch ist es möglich zu zeigen, daß eine Lösung auch für $\lambda = 0$ existiert. Da wir aber von diesem Resultat keinen Gebrauch machen werden, wird hier statt dessen auf [De Alfaro,Regge;1965] Kapitel 3.1 verwiesen.

Zum Abschluß dieses Abschnitts werden noch zwei weitere nützliche Gleichungen angegeben:

$$\begin{aligned}
W(\varphi(\lambda,k,r),\varphi(-\lambda,k,r)) &= \varphi(\lambda,k,r)\varphi'(-\lambda,k,r) \\
&\quad -\varphi'(\lambda,k,r)\varphi(-\lambda,k,r) \\
&= -2\lambda, && (2.25) \\
(\varphi(\lambda,k,r))^* &= \varphi(\lambda^*,k^*,r). && (2.26)
\end{aligned}$$

Gleichung (2.25) folgt, weil für kleine r $\varphi(\lambda,k,r)$ asymptotisch durch $r^{\lambda+1/2}$ ersetzt werden kann, da die Wronskische Determinante für zwei linear unabhängige Lösungen einer Differentialgleichung nach Satz 1.13 konstant ist. Die Gültigkeit von Gleichung (2.26) folgt sofort durch Betrachtung der Neumannschen Reihe (2.20) und gilt natürlich nur, wenn wie anfangs gefordert, das Potential $V(r)$ für alle r reell ist.

2.2.1 Eine weitere Integralgleichung für $\varphi(\lambda,k,r)$

Um weitere Abschätzungen für $\varphi(\lambda,k,r)$ zu erhalten, wird noch ein alternatives Vorgehen zum vergangenen Abschnitt aufgezeigt.
Wir suchen wieder eine Lösung der Differentialgleichnung (2.11). Diesmal vernachlässigen wir allerdings nur das Potential. Die resultierende Differentialgleichung

$$y''(r) + \left[k^2 - \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2}\right] y(r) = 0 \qquad (2.27)$$

ist eine *verkleidete* Besselsche Differentialgleichung. Für die physikalisch relevanten Fälle ist $\lambda = l + \frac{1}{2}, l \in \mathbb{N}$, reell und nicht ganzzahlig. Die allgemeine Lösung der Gleichung (2.27) ist daher gegeben durch

$$y(\lambda,k,r) = C_1\sqrt{r}J_\lambda(kr) + C_2\sqrt{r}J_{-\lambda}(kr).$$

Hierbei ist $J_\lambda(z)$ die Besselsche Funktion 1. Ordnung.
Benutzen wir wieder das Verfahren der Variation der Konstanten, so kann die allgemeine Lösung der Differentialgleichung (2.11) geschrieben werden als

$$\varphi(\lambda,k,r) = \alpha(r)\varphi_0(\lambda,k,r) + \beta(r)\varphi_0(-\lambda,k,r), \qquad (2.28)$$

wobei

$$\varphi_0(\lambda, k, r) := 2^\lambda k^{-\lambda}\Gamma(\lambda+1) r^{\frac{1}{2}} J_\lambda(kr) \tag{2.29}$$

eine Lösung der Besselschen Differentialgleichung (2.27) ist. Der Vorfaktor $2^\lambda k^{-\lambda}\Gamma(\lambda+1)$ resultiert aus derselben Anfangsbedingung wie im vorherigen Abschnitt, nämlich $\lim_{r\to 0} r^{-\lambda-1/2}\varphi_0(\lambda, k, r) = 1$, denn die Besselsche Funktion $J_\nu(z)$ weist das asymptotische Verhalten

$$J_\nu(z) \sim \frac{1}{\Gamma(\nu+1)}\left(\frac{z}{2}\right)^\nu, \quad \text{für } |z| \to 0,$$

auf, wobei ν nicht negativ und ganzzahlig sein darf. Wenn dieser Ansatz zu einer eindeutigen Lösung führt, ist sie wegen Satz 1.14 identisch mit der Lösung aus dem letzten Abschnitt.

Um nun wieder eine Integralgleichung für $\varphi(\lambda, k, r)$ zu erhalten, wird analog zur Vorgehensweise aus dem letzten Abschnitt verfahren. Das heißt, es wird wieder gefordert, daß

$$\alpha'(r)\varphi_0(\lambda, k, r) + \beta'(r)\varphi_0(-\lambda, k, r) = 0 \tag{2.30}$$

ist. Dies führt direkt zu den Ableitungen

$$\begin{aligned}
\varphi'(\lambda, k, r) &= \alpha(r){\varphi_0}'(\lambda, k, r) + \beta(r){\varphi_0}'(-\lambda, k, r) \qquad (2.31)\\
\varphi''(\lambda, k, r) &= \alpha'(r){\varphi_0}'(\lambda, k, r) + \beta'(r){\varphi_0}'(-\lambda, k, r)\\
&\quad +\alpha(r){\varphi_0}''(\lambda, k, r) + \beta(r){\varphi_0}''(-\lambda, k, r)\\
&= \left(\frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2} - k^2\right)\varphi(\lambda, k, r)\\
&\quad +\alpha'(r){\varphi_0}'(\lambda, k, r) + \beta'(r){\varphi_0}'(-\lambda, k, r). \qquad (2.32)
\end{aligned}$$

Gleichung (2.31) in die Schrödinger-Gleichung (2.11) eingesetzt, liefert

$$\alpha'(r){\varphi_0}'(\lambda, k, r) + \beta'(r){\varphi_0}'(-\lambda, k, r) = V(r)\varphi(\lambda, k, r) \tag{2.33}$$

Werden die Gleichungen (2.30) und (2.33) zu einem Gleichungssystem mit den Unbekannten $\alpha'(r)$ und $\beta'(r)$, so berechnet sich seine Lösung durch die Cramersche Regel und unter Beachtung von

$$\begin{vmatrix} \varphi_0(\lambda, k, r) & \varphi_0(-\lambda, k, r) \\ {\varphi_0}'(\lambda, k, r) & {\varphi_0}'(-\lambda, k, r) \end{vmatrix} = W(\varphi_0(\lambda, k, r), \varphi_0(-\lambda, k, r)) = -2\lambda$$

als

$$\begin{aligned}\alpha'(r) &= \frac{\varphi_0(-\lambda,k,r)V(r)\varphi(\lambda,k,r)}{2\lambda},\\ \beta'(r) &= -\frac{\varphi_0(\lambda,k,r)V(r)\varphi(\lambda,k,r)}{2\lambda}.\end{aligned}$$

Da $\alpha(r)$ und $\beta(r)$ wieder die Nebenbedingungen aus Gleichung (2.13) erfüllen, folgt

$$\begin{aligned}\alpha(r) &= 1+\frac{1}{2\lambda}\int_0^r \mathrm{d}\rho\,\varphi_0(-\lambda,k,\rho)V(\rho)\varphi(\lambda,k,\rho),\\ \beta(r) &= -\frac{1}{2\lambda}\int_0^r \mathrm{d}\rho\,\varphi_0(\lambda,k,\rho)V(\rho)\varphi(\lambda,k,\rho).\end{aligned} \tag{2.34}$$

Werden die Gleichungen aus (2.34) in die Gleichung (2.28) eingesetzt, so bekommen wir die gewünschte Integralgleichung für $\varphi(\lambda,k,r)$:

$$\varphi(\lambda,k,r)=\varphi_0(\lambda,k,r)+\int_0^r \mathrm{d}\rho\, G(\lambda,k,r,\rho)V(\rho)\varphi(\lambda,k,\rho). \tag{2.35}$$

Dabei ist

$$G(\lambda,k,r,\rho)=\frac{1}{2\lambda}[\varphi_0(\lambda,k,r)\varphi_0(-\lambda,k,\rho)-\varphi_0(-\lambda,k,r)\varphi_0(\lambda,k,\rho)].$$

Im Anhang A wird folgende Abschätzung für den Kern $G(\lambda,k,r,\rho), r\geq\rho, b:=\mathrm{Im}\,(k)\,,\mu:=\mathrm{Re}\,(\lambda)$ angegeben

$$|G(\lambda,k,r,\rho)|<C(\lambda)\mathrm{e}^{|b|(r-\rho)}\left(\frac{r}{1+|k|r}\right)^{|\mu|+\frac{1}{2}}\left(\frac{\rho}{1+|k|\rho}\right)^{-|\mu|+\frac{1}{2}}.$$

Diese Ungleichung liefert eine Abschätzung über die aus der Integralgleichung (2.35) resultierende Neumannsche Reihe

$$\begin{aligned}\varphi(\lambda,k,r) &= \sum_{n=0}^{\infty}\varphi_n(\lambda,k,r),\\ \varphi_n(\lambda,k,r) &:= \int_0^r \mathrm{d}\rho\, G(\lambda,k,r,\rho)V(\rho)\varphi_{n-1}(\lambda,k,r), \quad n>0.\end{aligned}$$

Behauptung: Für alle $n\in\mathbb{N}$ und $\mu>0$ gilt

$$|\varphi_n(\lambda,k,r)|<A\frac{(CP_1(r))^n}{n!}\mathrm{e}^{|b|r}\left(\frac{r}{1+|k|r}\right)^{\mu+\frac{1}{2}},$$

wobei $P_1(r) := \int_0^r \mathrm{d}\rho\, \rho |V(\rho)|/(1+|k|\rho)$.

Beweis per Induktion:

Die Richtigkeit der Behauptung für den Induktionsanfang $n = 0$ fällt bei der Rechnung im Anhang A ab. Gelte also die Behauptung für ein $n \geq 1$. Dann ist

$$
\begin{aligned}
|\varphi_{n+1}(\lambda,k,r)| &= \left| \int_0^r \mathrm{d}\rho\, G(\lambda,k,r,\rho) V(\rho) \varphi_n(\lambda,k,\rho) \right| \\
&< \frac{AC^{n+1}}{n!} \int_0^r \mathrm{d}\rho \left[\mathrm{e}^{|b|(r-\rho)} \left(\frac{r}{1+|k|r} \right)^{|\mu|+\frac{1}{2}} \left(\frac{\rho}{1+|k|\rho} \right)^{-|\mu|+\frac{1}{2}} \right. \\
&\quad \left. (P_1(\rho))^n \mathrm{e}^{|b|\rho} \left(\frac{\rho}{1+|k|\rho} \right)^{\mu+\frac{1}{2}} |V(\rho)| \right] \\
&\overset{\mu\geq 0}{=} \frac{A}{n!} C^{n+1} \mathrm{e}^{|b|r} \left(\frac{r}{1+|k|r} \right)^{\mu+\frac{1}{2}} \int_0^r \mathrm{d}\rho\, (P_1(\rho))^n P_1{}'(\rho) \\
&= A \frac{(CP_1(r))^{n+1}}{(n+1)!} \mathrm{e}^{|b|r} \left(\frac{r}{1+|k|r} \right)^{\mu+\frac{1}{2}} .
\end{aligned}
$$

□

Die Neumannsche Reihe liefert somit

$$
|\varphi(\lambda,k,r) - \varphi_0(\lambda,k,r)| < A\mathrm{e}^{|b|r} \left(\frac{r}{1+|k|r} \right)^{\mu+\frac{1}{2}} (\mathrm{e}^{CP_1(r)} - 1). \tag{2.36}
$$

Asymptotisch für $|k| \to \infty$ gilt sogar

$$
|\varphi(\lambda,k,r) - \varphi_0(\lambda,k,r)| = A\mathrm{e}^{|b|r} \left(\frac{r}{1+|k|r} \right)^{\mu+\frac{1}{2}} \mathrm{o}(1), \tag{2.37}
$$

denn mit folgender Abschätzung

$$
P_1(r) = \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \frac{\rho|V(\rho)|}{1+|k|\rho} < \int_0^a \mathrm{d}\rho\, \rho|V(\rho)| + \frac{1}{|k|} \int_a^\infty \mathrm{d}\rho\, |V(\rho)|
$$

folgt

$$
P_1(r) < \int_0^a \mathrm{d}\rho\, \rho|V(\rho)| + \mathrm{O}(\frac{1}{|k|}), \quad \text{für } |k| \to \infty.
$$

Da weiter $a > 0$ beliebig war, gilt sogar $\lim_{|k|\to\infty} P_1(r) = 0$, woraus letztlich Gleichung (2.37) folgt. Aus dieser Gleichung folgt weiter (physikalisches λ)

$$
\varphi(\lambda,k,r) \sim 2^{\lambda+\frac{1}{2}} \Gamma(\lambda+1) \pi^{-\frac{1}{2}} \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi}{2}(\lambda - \frac{1}{2})\right)}{k^{\lambda+\frac{1}{2}}} + \frac{\mathrm{e}^{|b|r}}{k^{\lambda+\frac{1}{2}}} \mathrm{o}(1) \quad \text{für } |k| \to \infty, \tag{2.38}
$$

denn für die Bessel-Funktion 1. Art gilt

$$J_\nu(z) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \sin\left(z - \frac{\nu\pi}{2} + \frac{\pi}{4}\right) \quad \text{für } |z| \to \infty.$$

Die oben hergeleiteten Abschätzungen für das Verhalten der Funktion $\varphi(\lambda, k, r)$ für sehr großes $|k|$, lassen auch eine physikalische Interpretation zu. Anfangs wurde festgehalten, daß die Größe $E = k^2$ die Energie des einfallenden Projektils darstellt. Wenn nun diese Energie immer größer wird, ist es sehr plausibel anzunehmen, daß das Potential $V(r)$ immer weniger Einfluß auf das immer schneller fliegende Projektil ausüben kann. Der Grund dafür ist die ständig kürzer werdende Zeit für die Wechselwirkung zwischen Target und Projektil, denn das Potential hat nach Voraussetzung eine begrenzte Reichweite.
Die Abschätzung (2.37) spiegelt nun aber gerade diesen Sachverhalt wider, indem sie zeigt, daß die allgemeine Lösung $\varphi(\lambda, k, r)$ für immer größer werdende Energien $|k^2|$ gegen die „freie“ Lösung $\varphi_0(\lambda, k, r)$ strebt, für die das Potential die Nullfunktion ist.

2.3 Lösung der Schrödinger-Gleichung mit einer Anfangsbedingung im Unendlichen

2.3.1 Zwei Integralgleichungen für die Jost-Lösung

Wir betrachten nun die Schrödinger-Gleichung (2.11) für große r. Dies führt unter Vernachlässigung des Zentrifugalpotentials $-(\lambda^2 - 1/4)/r^2$ und des Potentials $V(r)$ auf die Differentialgleichung

$$\psi'' + k^2\psi = 0 \tag{2.39}$$

Die Vernachlässigung des Potentials $V(r)$ ist wegen der Bedingung (2.7) gerechtfertigt. Die allgemeine Lösung von (2.39) lautet

$$\psi(r) = \alpha \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr} + \beta \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}.$$

Diese Lösung fordert für die Lösung $f(\lambda, k, r)$ der Schrödinger-Gleichung (2.11) die physikalische Bedingung

$$\lim_{r\to\infty} \mathrm{e}^{-ikr} f(\lambda, k, r) = 1. \tag{2.40}$$

Diese Anfangsbedingung resultiert aus der physikalisch motivierten Überlegung, daß ein *freies* quantenmechanisches Teilchen durch $\exp(\mathrm{i}k\boldsymbol{x})$ beschrieben werden kann, auf welches das Potential $V(r)$ in unendlicher Entfernung vom Streuzentrum keinen Einfluß hat.
Die Lösung $f(\lambda, k, r)$ der Gleichung (2.11) mit der Nebenbedingung (2.40) wird in der Literatur als **Jost-Lösung** bezeichnet.
Wenn in der Schrödinger-Gleichung (2.11) $V \equiv 0$ gesetzt wird, erhalten wir ihre Lösung als

$$f_0(\lambda, k, r) := (f(\lambda, k, r))_{V\equiv 0} = \left(\frac{1}{2}\pi kr\right)^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{\frac{1}{2}i\pi(\lambda+\frac{1}{2})} H_\lambda^{(1)}(kr), \tag{2.41}$$

wobei $H_\lambda^{(1)}(kr)$ die Hankel-Funktion erster Art bezeichnet, die folgendes asymptotische Verhalten aufweist:

$$H_\nu^{(1)}(z) \sim \left(\frac{2}{\pi z}\right)^{1/2} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(z-\frac{\pi}{2}(\nu+\frac{1}{2}))} \quad \text{für } |z| \to \infty.$$

Außerdem muß hier vorausgesetzt werden, daß λ nicht negativ und ganzzahlig ist.
Wie im letzten Abschnitt wird hier die Methode der Variation der Konstanten benutzt, um die allgemeine Lösung ($V \not\equiv 0$) zu erhalten. Wir starten also wieder mit dem Ansatz

$$f(\lambda, k, r) = \alpha(r) f_0(\lambda, k, r) + \beta(r) f_0(\lambda, -k, r).$$

Das gleiche Vorgehen wie im vorigen Abschnitt, allerdings unter Benutzung der Identität $W(f_0(\lambda, k, r), f_0(\lambda, -k, r)) = -2\mathrm{i}k$, wegen $f_0(\lambda, k, r) \sim \mathrm{e}^{ikr}$ für $r \to \infty$, führt zu der Integralgleichung

$$f(\lambda, k, r) = f_0(\lambda, k, r) + \int_r^\infty \mathrm{d}\rho\, B(\lambda, k, r, \rho) V(\rho) f(\lambda, k, \rho), \tag{2.42}$$

wobei

$$B(\lambda, k, r, \rho) := \frac{\mathrm{i}}{2k}[f_0(\lambda, k, r) f_0(\lambda, -k, \rho) - f_0(\lambda, k, \rho) f_0(\lambda, -k, r)].$$

Um die gleichmäßige Konvergenz der zur Integralgleichung gehörenden Neumannschen Reihe darzulegen, müssen Abschätzungen für $f_0(\lambda, k, r)$ und $B(\lambda, k, r, \rho)$ berechnet werden. Um hier den Lesefluß nicht zu stören, wurde diese Arbeit in den Anhang A verlegt.
Dort kann entnommen werden, daß für $k \neq 0, \mu := \mathrm{Re}\,(\lambda)\,, \sigma := \mathrm{Im}\,(\lambda)\,, \rho > r$ und $b := \mathrm{Im}\,(k)$ gilt

$$\begin{aligned} |f_0(\lambda, k, r)| &< \tilde{C}(\lambda) \left(\frac{|k|r}{1+|k|r} \right)^{-|\mu|+\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{-br}, \\ |B(\lambda, k, r, \rho)| &< C(\lambda) \mathrm{e}^{|b|\rho - br} \left(\frac{\rho}{1+|k|\rho} \right)^{|\mu|+\frac{1}{2}} \left(\frac{r}{1+|k|r} \right)^{-|\mu|+\frac{1}{2}}. \end{aligned} \tag{2.43}$$

Mit Hilfe der Ungleichungen aus (2.43) kann nun eine Abschätzung für die Neumannsche Reihe

$$f(\lambda, k, r) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n(\lambda, k, r),$$

hergeleitet werden, wobei für $n > 0$

$$f_n(\lambda, k, r) := \int_r^\infty \mathrm{d}\rho\, B(\lambda, k, r, \rho) V(\rho) f_{n-1}(\lambda, k, \rho)$$

ist. Per Induktion analog zum vorherigen Abschnitt folgt hieraus

$$\begin{aligned} |f_n(\lambda, k, r)| &< C \frac{[CQ(r)]^n}{n!} \left(\frac{|k|r}{1+|k|r} \right)^{-|\mu|+\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{-br}, \\ Q(r) &:= \int_r^\infty \mathrm{d}\rho\, \mathrm{e}^{(|b|-b)\rho} \frac{\rho|V(\rho)|}{1+|k|\rho}. \end{aligned} \tag{2.44}$$

Dabei sei an Bedingung (2.7) erinnert: $\int_0^\infty \mathrm{d}r\, r|V(r)| < \infty$.
Also ist die Neumannsche Reihe für $f(\lambda, k, r)$ durch eine Exponential Reihe nach oben beschränkt. Deshalb konvergiert die Neumannsche Reihe überall dort gleichmäßig im Sinne der Maximumsnorm auf endliche Intervalle, wo $Q(r)$ endlich ist. Dies ist sicherlich wegen Bedingung (2.7) für $b \geq 0$ der Fall. Weiter wird geschlossen, wenn für $b < 0$ ein $m > 0$ existiert, so daß für alle $\nu < m$

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r\, r|V(r)|\mathrm{e}^{\nu r} < \infty \tag{2.45}$$

ist, $Q(r)$ für $b > -m/2$ endlich sein wird.

Behauptung: Die Jost-Lösung $f(\lambda, k, r)$ ist als Funktion von k für festes r und λ holomorph in $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}_-^*$, $\mathbb{R}_-^* := \{z \in \mathbb{C} \mid z \leq 0 \text{ falls } z \in \mathbb{R}\}$, und stetig für $k \in \mathbb{R}$, $k \neq 0$, wenn $m = 0$.
Beweis: Die Hankel-Funktion 1. Ordnung $H_\lambda^{(1)}(kr)$ ist in $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}_-^*$ holomorph ([Abramowitz,Stegun] Kapitel 9). Damit ist dann sicherlich $f_0(\lambda, k, r)$ bzw. $B(\lambda, k, r, \rho)$ in $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}_-^*$ holomorph. Die Behauptung folgt nun aus der gezeigten Tatsache, daß die Neumannsche Reihe für $f(\lambda, k, r)$ für $\mathrm{Im}\,(k) > -m/2$ lokal gleichmäßig konvergiert (Weierstraß).
Für $z \in \mathbb{C}$ mit $\mathrm{Re}\,(z) < 0$ gilt: $\lim_{\mathrm{Im}(z)\to 0} H_\nu^{(1)}(z) \neq \lim_{\mathrm{Im}(-z)\to 0} H_\nu^{(1)}(z)$. Dennoch können wir $f(\lambda, k, r)$ stetig für alle $k \neq 0$ und $\mathrm{Im}\,(k) \geq 0$ erhalten, wenn wir für $\mathrm{Re}\,(k) < 0$ $H_\lambda^{(1)}(kr) = \lim_{z\to k, \mathrm{Im}(z)\to 0+} H_\lambda^{(1)}(kz)$ setzen. $\square$

Bemerkung: [Abramowitz,Stegun] entnimmt man weiter, daß für $\nu \in \mathbb{N}$ die Hankel-Funktion $H_\nu^{(1)}(z)$ einen Pol der Ordnung ν bei $z = 0$ besitzt. Daher hat die Jost-Lösung $f(\lambda, k, r)$ wegen der Hankel-Funktion in Definition (2.41) bei $k = 0$ einen Pol der Ordnung $\lambda - 1/2$ (Der Kern $B(\lambda, k, r, \rho)$ ist bei $k = 0$ endlich!).
Außerdem ist wegen Gleichung (2.44) klar, daß wenn ein $r_0 \geq 0$ existiert mit $V(r) = 0$ für alle $r > r_0$ die Jost-Lösung $f(\lambda, k, r)$ sogar für alle $k \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}_-^*$ holomorph ist.

Genauso wie im vorherigem Kapitel $P_1(r) \to 0$ für $k \to \infty$ gezeigt wurde, ist es hier möglich $Q(r) \to 0$ für $k \to \infty$ zu beweisen. Aus der Abschätzung (2.44) und der Neumannschen Reihe für $f(\lambda, k, r)$ folgt deshalb das asymptotische Verhalten

$$|f(\lambda, k, r) - f_0(\lambda, k, r)| = \mathrm{e}^{-br} \left(\frac{|k|r}{1 + |k|r} \right)^{-|\mu| + \frac{1}{2}} \mathrm{o}(1) \tag{2.46}$$

für $|k| \to \infty$ und $b > -\frac{1}{2}m$.
Aus obiger Gleichung zusammen mit der ersten Ungleichung aus (2.43) folgt für $k \neq 0$ und $b > -\frac{1}{2}m$

$$|f(\lambda, k, r)| < K(\lambda)\mathrm{e}^{-br} \left(\frac{|k|r}{1 + |k|r} \right)^{-|\mu| + \frac{1}{2}} .$$

Um einzusehen, daß die Jost-Lösung $f(\lambda, k, r)$ in λ ganz ist, ist es sinnvoll, einen alternativen Ansatz zu wählen:

$$f(\lambda, k, r) = \alpha(r)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} + \beta(r)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}.$$

Führt er mit derselben Ranbedingung zu einer eindeutigen Lösung, ist sie wegen Satz 1.14 identisch mit der Lösung aus Integralgleichung (2.42). Obiger Ansatz liefert mit dem Verfahren der Variation der Konstanten und der Nebenbedingung (2.40) die Integralgleichung

$$f(\lambda, k, r) = \mathrm{e}^{ikr} + \frac{1}{k}\int_r^\infty \mathrm{d}\rho\, \sin(k(\rho - r)) \left[V(\rho) + \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{\rho^2}\right] f(\lambda, k, \rho).$$

Ebenso wie bisher führt die Untersuchung obiger Integralgleichung auf

$$\begin{aligned}
f(\lambda, k, r) &= \sum_{n=0}^{\infty} g_n(\lambda, k, r), \\
g_0(\lambda, k, r) &:= \mathrm{e}^{ikr}, \\
g_n(\lambda, k, r) &:= \frac{1}{k}\int_r^\infty \mathrm{d}\rho\, \sin(k(\rho - r)) \left[V(\rho) + \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{\rho^2}\right] g_{n-1}(\lambda, k, \rho), \\
|g_n(\lambda, k, r)| &< \mathrm{e}^{-br}\frac{[Q_1(r)]^n}{n!}, \\
Q_1(r) &:= \int_r^\infty \mathrm{d}\rho \left|V(\rho) + \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{\rho^2}\right| \frac{\rho}{1 + |k|\rho}\mathrm{e}^{(|b|-b)\rho}.
\end{aligned}$$

Für die induktive Abschätzung der $g_n(\lambda, k, r)$ ist zu beachten, daß

$$\begin{aligned}
|\sin k(\rho - r)| &= \frac{1}{2}\left|\mathrm{e}^{ik(\rho-r)} - \mathrm{e}^{-ik(\rho-r)}\right| \\
&< \mathrm{e}^{|b|(\rho-r)} \leq \mathrm{e}^{|b|\rho}, \quad \text{da } \rho \geq r.
\end{aligned}$$

Dieser Zugang zur Jost-Funktion liefert weniger Informationen über die Variable k wie die Gleichungen (2.44). Jedoch wird jetzt deutlich, daß $f(\lambda, k, r)$ eine gleichmäßig konvergente Reihe in Polynomen von λ^2 ist. $f(\lambda, k, r)$ ist deshalb ganz und gerade in λ:

$$f(\lambda, k, r) = f(-\lambda, k, r).$$

Wegen $(\sin(z))^* = \sin(z^*)$ und $(\mathrm{e}^{-iz})^* = \mathrm{e}^{iz^*}$, folgt weiter

$$(f(\lambda, k, r))^* = f(\lambda^*, -k^*, r), \tag{2.47}$$

wenn beachtet wird, daß $V(r)$ für alle r reell ist.

Die physikalische Interpretation obiger Abschätzungen liegt nun wieder auf der Hand: Für immer größer werdende Energien $|E| = |k^2|$ hat das Potential immer weniger Einfluß auf das Projektil. Dies spiegelt sich darin wider, daß die Jost-Lösung $f(\lambda, k, r)$ für zunehmendes $|k|$ gegen die „freie“ Lösung $f_0(\lambda, k, r)$ strebt.

2.3.2 Zusammenfassung der Eigenschaften der Lösungen $\varphi(\lambda, k, r)$ und $f(\lambda, k, r)$

Wir konnten bis hierher eine interessante Analogie zwischen dem Verhalten von $f(\lambda, k, r)$ in λ, k und $\varphi(\lambda, k, r)$ in k, λ feststellen. Untenstehende Tabelle verdeutlicht dies noch einmal.

Lösung	$\varphi(\lambda, k, r)$	$f(\lambda, k, r)$
Ganz in	k	λ
Holomorph in	$\mathrm{Re}\,(\lambda) > 0$	$\mathrm{Im}\,(k) > 0$
Wronskische Determinante	$W(\varphi(\lambda, k, r), \varphi(-\lambda, k, r)) = -2\lambda$	$W(f(\lambda, k, r), f(\lambda, -k, r) = -2ik$
Hermitezität ($V(r)$ reell)	$(\varphi(\lambda, k, r))^* = \varphi(\lambda^*, k^*, r)$	$(f(\lambda, k, r))^* = f(\lambda^*, -k^*, r)$

Kapitel 3

Wichtige Folgerungen

In diesem Abschnitt machen wir uns zunächst mit der sogenannten Jost-Funktion $f(\lambda, k)$, und der wichtigen Phasenverschiebung $\delta(\lambda, k)$ vertraut. Dann folgt eine Darstellung des Zusammenhangs zwischen den gebundenen Zuständen der regulären Lösung $\varphi(\lambda, k, r)$ und den Nullstellen der Jost-Funktion $f(\lambda, k)$ in k. Weitere Inhalte dieses Kapitels sind die Bargmann-Ungleichung, das Levinson-Theorem, eine Integraldarstellung der Jost-Funktion und die Entwicklung nach Eigenfunktionen.

3.1 Die Jost-Funktion $f(\lambda, k)$ und die Phasenverschiebung $\delta(\lambda, k)$

3.1.1 Die Jost-Funktion

Es wurden vier Lösungen der Differentialgleichung (2.11)

$$\psi'' + \left(k^2 - \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2} - V(r)\right)\psi = 0$$

berechnet. Die vier Lösungen $\varphi(\pm\lambda, k, r)$ und $f(\lambda, \pm k, r)$ existieren nicht gleichzeitig für beliebige Werte von λ und k. Der Definitionsbereich dieser vier Funktionen ist

$$\begin{aligned}
\varphi(\pm\lambda, k, r) \quad &: \quad \pm\mathrm{Re}\,(\lambda) \geq 0,\ \lambda \neq 0,\ k \text{ endlich},\\
f(\lambda, \pm k, r) \quad &: \quad \pm\mathrm{Im}\,(k) \geq 0,\ k \neq 0,\ \lambda \text{ endlich}.
\end{aligned}$$

Mit (2.45), kann der Definitionsbereich für die Jost-Funktion $f(\lambda, \pm k, r)$ erweitert werden auf $\pm \mathrm{Im}\,(k) > -m/2$, λ endlich. Alle vier Lösungen existieren somit gleichzeitig, wenn $k \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ und $\lambda = \mathrm{Im}\,(\lambda) \neq 0$ ist.
Da die Differentialgleichung (2.4) von zweiter Ordnung ist, besteht immer ein linearer Zusammenhang zwischen drei beliebigen Lösungen. Von besonderem Interesse sind dabei die Gleichungen

$$f(\lambda, k, r) = A\varphi(\lambda, k, r) + B\varphi(-\lambda, k, r) \tag{3.1}$$

mit $\mathrm{Im}\,(k) \geq 0$, $k \neq 0$ und $\lambda = \mathrm{Im}\,(\lambda) \neq 0$,

$$\varphi(\lambda, k, r) = Cf(\lambda, k, r) + Df(\lambda, -k, r) \tag{3.2}$$

mit $\mathrm{Re}\,(\lambda) \geq 0$, $\lambda \neq 0$ und $k = \mathrm{Re}\,(k) \neq 0$. Die Terme A, B, C und D sind natürlich konstant in r, aber nicht in λ und k. Um A, B, C und D zu bestimmen, wird die sogenannte **Jost-Funktion**

$$\begin{aligned} f(\lambda, k) &:= W(f(\lambda, k, r), \varphi(\lambda, k, r)) \\ &= f(\lambda, k, r)\varphi'(\lambda, k, r) - f'(\lambda, k, r)\varphi(\lambda, k, r) \end{aligned} \tag{3.3}$$

eingeführt. Sie ist für $\mathrm{Re}\,(\lambda), \mathrm{Im}\,(k) \geq 0$, $\lambda, k \neq 0$ definiert. Die Jost-Funktion ist unabhängig von r, weil die Wronskische Determinante von zwei Lösungen einer gewöhnlichen Differentialgleichung in der Variablen x unabhängig von x ist.
Da für $V \equiv 0$ die expliziten Lösungen $f(\lambda, k, r) = f_0(\lambda, k, r)$ und $\varphi(\lambda, k, r) = \varphi_0(\lambda, k, r)$ bekannt sind, kann für diesen Fall die Jost-Funktion explizit berechnet werden. Dabei kann ausgenutzt werden, daß zu ihrer Berechnung das asymptotische Verhalten der Funktionen $\varphi_0(\lambda, k, r)$ und $f_0(\lambda, k, r)$ für $r \to \infty$ benutzt werden darf. Es gilt

$$\begin{aligned} \varphi_0(\lambda, k, r) &\sim \sqrt{\frac{2}{\pi}} k^{-\lambda-\frac{1}{2}} 2^\lambda \Gamma(\lambda+1) \cos\left(kr - \frac{\pi}{4} - \frac{\lambda\pi}{2}\right) \quad \text{für } r \to \infty, \\ f_0(\lambda, k, r) &\sim \mathrm{e}^{ikr} \quad \text{für } r \to \infty. \end{aligned}$$

Damit folgt leicht [Rest $:= \sqrt{2/\pi} k^{-\lambda-1/2} 2^\lambda \Gamma(\lambda+1)$]

$$f_0(\lambda, k) := (f(\lambda, k))_{V(r)=0} = f_0(\lambda, k, r){\varphi_0}'(\lambda, k, r) - {f_0}'(\lambda, k, r)\varphi_0(\lambda, k, r)$$

$$
\begin{aligned}
&= -\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}k\sin(kr-\frac{\pi}{4}-\frac{\lambda\pi}{2})\,\mathrm{Rest}\\
&\quad -\mathrm{i}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\cos(kr-\frac{\pi}{4}-\frac{\lambda\pi}{2})\,\mathrm{Rest}\\
&= -\frac{1}{\mathrm{i}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(\frac{\pi}{4}+\frac{\lambda\pi}{2}\right)}k\,\mathrm{Rest}\\
&= 2^{\lambda}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\Gamma(\lambda+1)k^{-\lambda+\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\mathrm{i}\pi(\lambda-\frac{1}{2})}. \qquad (3.4)
\end{aligned}
$$

Hieraus gewinnen wir die evidente Abschätzung

$$|f_0(\lambda,k)| < C(\lambda)|k|^{-\mu+\frac{1}{2}}. \qquad (3.5)$$

Desweiteren wird hier noch die normalisierte Jost-Funktion definiert:

$$F(\lambda,k) := \frac{f(\lambda,k)}{f_0(\lambda,k)}. \qquad (3.6)$$

Im Spezialfall $\lambda = 1/2$ ist offensichtlich $F(1/2,k) = f(1/2,k)$.
Die normalisierte Jost-Funktion wird bei dem inversen Problem noch eine wichtige Rolle spielen.

Wir sind jetzt in der Lage, die Koeffizienten A, B, C und D in den Gleichungen (3.1) und (3.2) zu bestimmen. Wird die Identität $W(\varphi(\lambda,k,r),\varphi(-\lambda,k,r)) = -2\lambda$ beachtet und die Wronskische Determinante $W(f(\lambda,k,r),\varphi(\lambda,k,r))$ berechnet, wobei Gleichung (3.1) zu substituieren ist, folgt

$$B = \frac{1}{2\lambda}f(\lambda,k). \qquad (3.7)$$

Auf der anderen Seite führt die Berechnung der Wronskischen Determinante $W(f(\lambda,k,r),\varphi(-\lambda,k,r))$ auf

$$A = -\frac{1}{2\lambda}f(-\lambda,k). \qquad (3.8)$$

Aus den Gleichungen (3.7) und (3.8) ergibt sich also für $\mathrm{Im}\,(k) \geq 0, k \neq 0, \lambda = \mathrm{Im}\,(\lambda) \neq 0$

$$f(\lambda,k,r) = \frac{1}{2\lambda}[f(\lambda,k)\varphi(-\lambda,k,r) - f(-\lambda,k)\varphi(\lambda,k,r)]. \qquad (3.9)$$

Wird weiter die Identität $W(f(\lambda,k,r), f(\lambda,-k,r) = -2\mathrm{i}k$ verwendet und sowohl $W(f(\lambda,-k,r),\varphi(\lambda,k,r))$ für C, als auch $W(f(\lambda,k,r),\varphi(\lambda,k,r))$ für D

berechnet, wobei Gleichung (3.2) zu benutzen ist, folgt für $\mathrm{Re}\,(\lambda) \geq 0$, $\lambda \neq 0$, $k = \mathrm{Re}\,(k) \neq 0$

$$\varphi(\lambda, k, r) = \frac{1}{2\mathrm{i}k}(f(\lambda, -k)f(\lambda, k, r) - f(\lambda, k)f(\lambda, -k, r)). \tag{3.10}$$

Analytische Eigenschaften der Jost-Funktion

Die analytischen Eigenschaften der Jost-Funktion $f(\lambda, k)$ resultieren aus den gefundenen analytischen Eigenschaften der Funktionen $\varphi(\lambda, k, r)$ und $f(\lambda, k, r)$.

Es ist einerseits bekannt, daß $\varphi(\lambda, k, r)$ und $\varphi'(\lambda, k, r)$ holomorph in $\mathrm{Re}\,(\lambda) > 0$ sind, und daß $f(\lambda, k, r)$ und $f'(\lambda, k, r)$ ganze Funktionen von λ sind. Andererseits ist bekannt, daß $\varphi(\lambda, k, r)$ und $\varphi'(\lambda, k, r)$ ganz in k sind, und daß $f(\lambda, k, r)$ und $f'(\lambda, k, r)$ holomorph in $\mathrm{Im}\,(k) > 0$ ist. Wenn außerdem die Hermitezitäts-Eigenschaften (2.26) und (2.47) beachtet werden, folgt der

Satz 3.1 *$f(\lambda, k)$ als Funktion der Variablen λ, k ist holomorph im direkten Produkt der Definitionsbereiche $\mathrm{Re}\,(\lambda) > 0$ und $\mathrm{Im}\,(k) > 0$. Wenn sogar Gleichung (2.45) gilt, erweitert sich die Holomorphie auf das direkte Produkt der Definitionsbereiche $\mathrm{Re}\,(\lambda) > 0$ und $\mathrm{Im}\,(k) > -m/2, k \notin \mathbb{R}_-^*$. Desweiteren ist $f(\lambda, k)$ stetig für $\mathrm{Im}\,(k) = 0, k \neq 0$.*
Außerdem gilt die Gleichung

$$(f(\lambda, k))^* = f(\lambda^*, -k^*),$$

wenn $V(r)$ für alle r reell ist.

Bemerkungen:

a) Da $f_0(\lambda, k)$ eine in $\mathrm{Re}\,(\lambda) > 0$ und $\mathrm{Im}\,(k) > 0$ nullstellenfreie holomorphe Funktion ist, gilt der obige Satz 3.1 auch für $F(\lambda, k)$.

b) Die normalisierte Jost-Funktion kann sogar noch stetig nach $k = 0$ fortgesetzt werden: Auf der einen Seite hat wegen Gleichung (2.41) die Jost-Lösung $f(\lambda, k, r)$ bei $k = 0$ einen Pol der Ordnung $\lambda - 1/2$, nach Defintion (3.3) also auch die Jost-Funktion $f(\lambda, k)$. Auf der anderen Seite hat wie oben gezeigt $1/f_0(\lambda, k)$ eine Nullstelle der Ordnung $\lambda - 1/2$ bei $k = 0$.

c) Nun ist auch klar, daß die normalisierte Jost-Funktion als Funktion von k für $\mathrm{Im}\,(k) \geq 0$ stetig ist.

d) Falls ein $r_0 > 0$ existiert mit $V(r) = 0$ für $r > r_0$, so sind $f(\lambda, k)$ und $F(\lambda, k)$ holomorph in $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}_-^*$.

e) Für physikalisches $\lambda = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \ldots$ gilt die Hermitezitäts-Eigenschaft

$$[F(\lambda, k)]^* = F(\lambda, -k^*). \tag{3.11}$$

Asymptotische Eigenschaft der normalisierten Jost-Funktion

Um noch asymptotische Eigenschaften über die normalisierte Jost-Funktion zu gewinnen, wird zunächst eine Integraldarstellung für diese hergeleitet.
Dem vorhergehendem Kapitel entnehmen wir die Gleichungen

$$f_0{}''(\lambda, k, r) + \left(k^2 - \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2}\right) f_0(\lambda, k, r) = 0, \tag{3.12}$$

$$\varphi''(\lambda, k, r) + \left(k^2 - \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2}\right) \varphi(\lambda, k, r) = V(r)\varphi(\lambda, k, r). \tag{3.13}$$

Wird Gleichung (3.13) mit $f_0(\lambda, k, r)$ multipliziert, Gleichung (3.12) ausgenutzt und über r von 0 bis ∞ integriert, folgt

$$\begin{aligned}
&\int_0^\infty \mathrm{d}r\, V(r) f_0(\lambda, k, r)\varphi(\lambda, k, r) = \int_0^\infty \mathrm{d}r\, (\varphi'' f_0 - \varphi f_0{}'') \\
&= [\varphi'(\lambda, k, r) f_0(\lambda, k, r) - \varphi(\lambda, k, r) f_0{}'(\lambda, k, r)]_0^\infty \\
&= f(\lambda, k) - f_0(\lambda, k).
\end{aligned}$$

Dabei sind für die Gültigkeit der letzten Gleichung die Definition Jost-Funktion (3.3) und die Asymptotiken $f(\lambda, k, r) \sim f_0(\lambda, k, r)$ für $r \to \infty$, $\varphi(\lambda, k, r) \sim \varphi_0(\lambda, k, r)$ für $r \to 0$ zu benutzen.
Als Resultat kann also notiert werden, daß

$$f(\lambda, k) = f_0(\lambda, k) + \int_0^\infty \mathrm{d}r\, V(r) f_0(\lambda, k, r)\varphi(\lambda, k, r), \tag{3.14}$$

$$F(\lambda, k) = 1 + \int_0^\infty \mathrm{d}r\, V(r) \frac{f_0(\lambda, k, r)}{f_0(\lambda, k)} \varphi(\lambda, k, r). \tag{3.15}$$

Die Integraldarstellung für die Jost-Funktion (3.14) läßt mit den Abschätzungen (2.37) und (2.43) die Abschätzung

$$|f(\lambda, k)| \leq C(\lambda)|k|^{-\mu + \frac{1}{2}} \tag{3.16}$$

zu. Für die normalisierte Jost-Funktion liefert die Integraldarstellung (3.15) mit den Abschätzungen (2.37), (2.43) und (3.5) für festes λ

$$F(\lambda, k) \quad = \quad 1 + \mathrm{O}(1/k) \quad \text{für } |k| \to \infty. \tag{3.17}$$

3.1.2 Die Definition der Phasenverschiebung

Eine physikalisch wichtige Größe ist die Phasenverschiebung $\delta(\lambda, k)$. Sie wird den Hauptbestandteil der experimentellen Daten bilden, indem sie unmittelbar in das inverse Problem eingeht. Außerdem ist sie, wie noch im Abschnitt 3.5 gezeigt wird, direkt mit den wirklich meßbaren Daten verknüpft.

Definition 3.2 *Die* `Phasenverschiebung` $\delta(\lambda, k)$ *ist definiert als das negative Argument der normalisierten Jost-Funktion:*

$$F(\lambda, k) = |F(\lambda, k)| \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta(\lambda,k)}.$$

$\delta(\lambda, k)$ ist damit eine reelle Funktion in λ und k, die für reelles k stetig gewählt werden kann. Aus dieser Definition ergibt sich eine gewisse Eichfreiheit, denn $\delta(\lambda, k)$ ist durch obige Definition nur bis auf modulo 2π bestimmt.
Diese Willkür wird durch die Forderung

$$\lim_{|k|\to\infty} \delta(\lambda, k) = 0, \quad \mathrm{Im}\,(k) \geq 0, \tag{3.18}$$

aufgehoben (siehe (3.17)). Wegen $[F(\lambda, k)]^* = F(\lambda, -k)$ für $\lambda = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \ldots$ und $k \in \mathbb{R}$ ist außerdem

$$\delta(\lambda, -k) = -\delta(\lambda, k), \quad \text{für } \lambda = \tfrac{1}{2}, \tfrac{3}{2}, \ldots \text{ und } k \in \mathbb{R}. \tag{3.19}$$

Wird die Abschätzung (3.17) beachtet, die aus der Integraldarstellung (3.15) für die normierte Jost-Funktion hergeleitet wurde, so folgt die Integrabilitätsbedingung für $\delta(\lambda, k)$:

$$\int_a^\infty \mathrm{d}k\, \frac{\delta(\lambda, k)}{k} < \infty \quad \text{mit } a > 0. \tag{3.20}$$

.

3.2 Gebundene Zustände

Zunächst wird der Begriff „gebundene Zustände“ definiert:

Definition 3.3 *Sei $l = \lambda - 1/2 \in \mathbb{N}$. Ein* `gebundener Zustand` *des physikalischen Systems ist definiert als eine nicht identisch verschwindende quadratintegrable Lösung der Schrödinger-Gleichung (2.2).*

Damit eine Lösung der Gleichung (2.2) überhaupt einen gebundenen Zustand darstellen kann, muß sie für $r = 0$ und für $r = \infty$ hinreichende Nebenbedingungen erfüllen. Wegen Gleichung (2.3) muß somit gelten

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\boldsymbol{x}\, |\Psi(\boldsymbol{x})|^2 &= \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta\, \sin(\theta) Y_l^m(\theta,\phi) \int_0^\infty \mathrm{d}r\, r^2 \left|\frac{\Psi(r)}{r}\right|^2 \\ &= \int_0^\infty \mathrm{d}r\, |\psi(\lambda,k,r)|^2 < \infty. \end{aligned}$$

Nachstehend soll untersucht werden, unter welchen Umständen ein gebundener Zustand auftreten kann. Dazu sei im folgenden $\lambda \in \mathbb{R}, \lambda > 0$. Wenn nun für ein k_0 mit $\mathrm{Im}\,(k_0) > 0$ die Jost-Funktion $f(\lambda, k_0)$ verschwindet, folgt aus der Definition (3.3) der Jost-Funktion

$$\varphi(\lambda, k_0, r) = \frac{\varphi'(\lambda, k_0, r)}{f'(\lambda, k_0, r)} f(\lambda, k_0, r).$$

Der erste Term auf der rechten Seite obiger Gleichung ist konstant in r, denn Differentiation nach r liefert

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \frac{\varphi'(\lambda,k_0,r)}{f'(\lambda,k_0,r)} &= \frac{\varphi''(\lambda,k_0,r) f'(\lambda,k_0,r) - \varphi'(\lambda,k_0,r) f''(\lambda,k_0,r)}{(f'(\lambda,k,r))^2} \\ &= -\frac{f(\lambda,k_0)}{(f'(\lambda,k_0,r))^2} \left(k_0^2 - \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2} - V(r)\right) = 0. \end{aligned}$$

Also ist die Darstellung

$$\varphi(\lambda, k_0, r) = c(\lambda) f(\lambda, k_0, r) \tag{3.21}$$

möglich. Dabei ist $c(\lambda) = \lim_{r\to 0} r^{\lambda+\frac{1}{2}}/f(\lambda, k_0, r) \neq 0$. Wenn der Definitionsbereich der Jost-Funktion $f(\lambda, \pm k, r)$ mit (2.45) erweitert werden kann auf

$\pm\mathrm{Im}\,(k) > -m/2$, $k \neq 0$, und $|\mathrm{Im}\,(k_0)\,| < m/2$, so folgt aus Gleichung (3.10) die Darstellung

$$c(\lambda) = \frac{f(\lambda, -k_0)}{2\mathrm{i}k_0}. \tag{3.22}$$

Aufgrund der Asymptotik (2.40) verschwindet $\varphi(\lambda, k_0, r)$ exponentiell für $r \to \infty$. Offensichtlich liegt damit ein gebundener Zustand für k_0 vor.
Falls nun aber $f(\lambda, k_0) = 0$ mit $k = \mathrm{Re}\,(k) \neq 0$ gilt, folgt aus Gleichung (3.10) mit $f(\lambda, -k_0) = (f(\lambda, k_0))^*$, daß $\varphi(\lambda, k_0, r) = 0$ für alle r ist. Das hatten wir aber ausgeschlossen. Wir können somit als Zwischenergebnis festhalten, daß aus $f(\lambda, k) = 0$ mit $\mathrm{Im}\,(k) > 0$ ein gebundener Zustand des Systems folgt.

Es wird nun angenommen, daß $\varphi := \varphi(\lambda, k_0, r)$, $\mathrm{Im}\,(k_0) > 0$, einen gebundenen Zustand darstellt. φ also für große r exponentiell verschwindet. Weiter erfüllt φ die beiden Gleichungen

$$\varphi'' + \left[k_0^2 - \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2} - V(r)\right]\varphi = 0 \tag{3.23}$$

$$\varphi^{*\prime\prime} + \left[k_0^{*2} - \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2} - V(r)\right]\varphi^* = 0, \tag{3.24}$$

wobei zu beachten ist, daß $V(r), \lambda \in \mathbb{R}$.
Wird weiter Gleichung (3.23) mit φ^* und Gleichung (3.24) mit φ multipliziert, folgt durch Subtraktion dieser Gleichungen

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}[\varphi^*\varphi' - \varphi^{*\prime}\varphi] = (k_0^2 - k_0^{*2})\varphi^*\varphi = 2\mathrm{i}\,\mathrm{Im}\left(k_0^2\right)\varphi^*\varphi.$$

Wegen $\varphi(r = 0) = \varphi(r = \infty) = 0$, bekommen wir

$$\mathrm{Im}\left(k_0^2\right)\int_0^\infty \mathrm{d}r\,|\varphi|^2 = 0.$$

Da von der trivialen Lösung $\varphi \equiv 0$ abgesehen werden kann, muß somit

$$\mathrm{Im}\left(k_0^2\right) = 2\mathrm{Im}\,(k_0)\,\mathrm{Re}\,(k_0) = 0$$

gelten.
Anfangs wurde aber $\mathrm{Im}\,(k_0) > 0$ gefordert. Deshalb muß $\mathrm{Re}\,(k_0) = 0$ gelten. Damit ist k_0 rein imaginär und $E_0 := k_0^2$ reell und negativ.
Sei nun also $k = \mathrm{i}b$, $b > 0$. Es wurde bereits gezeigt, daß φ eine gerade Funktion

von k ist, deshalb ist ein gebundener Zustand für k immer äquivalent mit einem gebundenen Zustand für $-k$. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit kann somit $b > 0$ angenommen werden. Aus Gleichung (3.21) folgt also die Asymptotik

$$\varphi(\lambda, \mathrm{i}b, r) \sim c(\lambda)\mathrm{e}^{-br} \quad \text{für } r \to \infty.$$

Andersherum gilt es zu zeigen, daß wenn ein gebundener Zustand für ein k_0 auftritt, $f(\lambda, k_0) = 0$ gilt. Dies folgt leicht aus Gleichung (3.21), falls sich alle gebundenen Zustände im Streifen $|\mathrm{Im}\,(k)\,| < m/2, m > 0$, befinden oder sogar $V(r) = 0$ für ein $r > r_0$ ist. Wir haben gesehen, daß dann $\mathrm{Re}\,(k_0) = 0$ gilt. Falls aber k_0 nicht im Definitionsbereich der Funktion $f(\lambda, -k_0)$ liegt, ist eine aufwendigere mathematische Analyse nötig, die hier nicht wiedergegeben werden soll. Siehe dazu [Sabatier,Chadan;1989] Kapitel 2 oder [Newton;1966] Kapitel 12.

Für $\neq 0$ hätten wir anstatt $f(\lambda, k)$ auch $F(\lambda, k)$ betrachten können. Der Fall $F(\lambda, 0) = 0$ ist allerdings ein Sonderfall. Falls $F(1/2, 0) = 0$ gilt, kann gezeigt werden, daß kein gebundener Zustand auftritt. Für $\lambda > 1/2$ folgt aus $F(\lambda, 0) = 0$ allerdings ein gebundener Zustand des Systems. Der Einfachheit halber setzen wir daher $F(\lambda, 0) \neq 0$ voraus, um auch später diesen Sonderfall nicht immer getrennt behandeln zu müssen.

Zusammenfassend erhalten wir den Satz

Satz 3.4 *Ist $F(\lambda, 0) \neq 0$, dann stellt die Wellenfunktion $\Psi(\boldsymbol{x}) = Y_{lm}(\theta, \phi)\varphi(\lambda, k, r)/r$ der Schrödinger-Gleichung (2.2) genau dann einen gebundenen Zustand des physikalischen Systems dar, wenn $f(\lambda, k) = 0$ gilt. Dabei sind die Nullstellen der Jost-Funktion rein imaginäre Zahlen, $k = \mathrm{i}b$, $b \in \mathbb{R}$, $b > 0$.*

3.2.1 Normalisierung der gebundenen Zustände

Die Normalisierungskonstante C einer einen gebundenen Zustand darstellenden Wellenfunktion ist definiert als

$$C^{-1} := \int_0^\infty \mathrm{d}r\, |\varphi(\lambda, k = \mathrm{i}b, r)|^2 = \int_0^\infty \mathrm{d}r\, \varphi^2(\lambda, k = \mathrm{i}b, r) < \infty. \tag{3.25}$$

Für die Gültigkeit des zweiten Gleichheitszeichens ist zu beachten, daß φ eine gerade Funktion in k ist und die Hermitezitätseigenschaft (2.26) erfüllt.
Die Normalisierungskonstante C wird bei der Entwicklung von Funktionen aus $L_2(0,\infty)$ nach Eigenfunktionen der Schrödinger-Gleichung benötigt.
Ziel dieses Abschnitts ist die Herleitung einer numerisch sinnvolleren Darstellung der Normalisierungskonstanten C. Ausgangspunkt der Rechnung ist die Schrödinger-Gleichung für die Jost-Lösung mit $\mathrm{Im}\,(k) > 0$

$$f'' + \left[k^2 - \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2} - V(r)\right] f = 0. \tag{3.26}$$

Differentiation von Gleichung (3.26) nach k liefert mit der Notation $\dot{f} = \mathrm{d}f(\lambda,k,r)/\mathrm{d}k$

$$\dot{f}'' + \left[k^2 - \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2} - V(r)\right] \dot{f} + 2kf = 0. \tag{3.27}$$

Gleichung (3.26) mit $\dot{f}$ und Gleichung (3.27) mit f multipliziert, liefert zwei Gleichungen, die voneinander subtrahiert die Darstellung

$$\dot{f}''f - f''\dot{f} + 2kf^2 = 0$$

erlauben.
Sei nun $k_0 = \mathrm{i}b, b \in \mathbb{R}, b > 0$ ein gebundener Zustand. Die Asymptotik (2.40) zeigt, daß $f(\lambda, k_0, r)$ für $r \to \infty$ exponentiell abfällt. Integration obiger Gleichung über $\mathrm{d}r$ von 0 bis ∞ liefert

$$2k_0 \int_0^\infty \mathrm{d}r\, f^2(\lambda,k_0,r) = \dot{f}'(\lambda,k_0,0)f(\lambda,k_0,0) - f'(\lambda,k_0,0)\dot{f}(\lambda,k_0,0). \tag{3.28}$$

Da weiter für einen gebundenen Zustand wegen Gleichung (3.21) die Relation

$$\varphi(\lambda,k_0,r) = c(\lambda)f(\lambda,k_0,r) \tag{3.29}$$

gilt, folgt mit der Definition (3.25) für die Normalisierungskonstante C

$$\begin{aligned} C^{-1} &= \frac{c(\lambda)^2}{2k_0}\left[\dot{f}'(\lambda,k_0,0)\frac{\varphi(\lambda,k_0,0)}{c(\lambda)} - \frac{\varphi'(\lambda,k_0,0)}{c(\lambda)}\dot{f}(\lambda,k_0,0)\right] \\ &= -\left.\frac{c(\lambda)\frac{\mathrm{d}f(\lambda,k)}{\mathrm{d}k}}{2k}\right|_{k=k_0=\mathrm{i}b}. \end{aligned}$$

Im allgemeinen Fall ist also

$$C^{-1} = -\frac{1}{2k}\frac{\mathrm{d}f(\lambda,k)}{\mathrm{d}k}\bigg|_{k=\mathrm{i}b} \lim_{r\to 0}\frac{r^{\lambda+\frac{1}{2}}}{f(\lambda,\mathrm{i}b,r)}. \tag{3.30}$$

Falls jedoch $b < m/2$ gilt, folgt aus Gleichung (3.22) die Darstellung

$$C^{-1} = -\frac{f(\lambda,-k)\frac{\mathrm{d}f(\lambda,k)}{\mathrm{d}k}}{4\mathrm{i}k^2}\Bigg|_{k=\mathrm{i}b}. \tag{3.31}$$

Wir erhalten noch ein weiteres wichtiges Ergebnis: Die Nullstellen von $f(\lambda,k)$ sind alle einfach, da wegen $\varphi \not\equiv 0$ $C > 0$ ist.

3.2.2 Bargmanns Ungleichung

Die Bedingung (2.7)

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r\, r|V(r)| < \infty \tag{3.32}$$

an das Potential wurde damit begründet, daß unendlich viele gebundene Zustände vermieden werden sollen. Dies ist nun auch leicht einzusehen:
Gleichung (3.17) zeigt, daß $\lim_{|k|\to\infty} F(\lambda,k) = 1$ gilt. Da alle Nullstellen von $F(\lambda,k)$ wegen Satz 3.4 in der oberen k-Halbebene liegen und $F(\lambda,k)$ dort eine holomorphe Funktion von k ist, folgt mit der Bedingung $F(\lambda,0) \neq 0$ aus dem Identitätssatz für holomorphe Funktionen, daß $F(\lambda,k)$ endlich viele Nullstellen haben muß.
Die Asymptotik der normalisierten Jost-Funktion $F(\lambda,k)$ impliziert wegen Gleichung (2.45) die Bedingung (3.32).

V. Bargmann hat in seiner Arbeit [Bargmann;1952] sogar folgende Abschätzung, für die Anzahl p_λ der gebundenen Zustände, zeigen können:

$$p_\lambda \leq \frac{1}{2\lambda}\int_0^\infty \mathrm{d}r\, r|V(r)|, \quad \lambda > 0. \tag{3.33}$$

Diese Ungleichung ist in der Literatur als **Bargmanns Ungleichung** bekannt. Wenn wir also an Bedingung (2.7) festhalten, gilt hier immer $p_\lambda < \infty$. V. Bargmann hat Gleichung (3.33) auf der Basis einer Fredholmschen Integralgleichung für $\varphi(\lambda,k,r)$ hergeleitet. Den folgenden kürzeren Beweis hat J. Schwinger in seiner Arbeit [Schwinger;1961] aufgezeigt:

Das Potential $U(r)$ sei definiert durch

$$U(r) := \begin{cases} -V(r) & : \quad V(r) < 0, \\ 0 & : \quad V(r) \geq 0. \end{cases}$$

Das rein attraktive Potential $-U(r)$ erzeugt mindestens genausoviele gebundene Zustände wie das Potential $V(r)$. Denn eine lokale Verminderung des Potentials hat natürlich eine Verminderung der negativen Bindungsenergieen $E_n = k_n^2$ zur Folge. Daher genügt es, Bargmanns Ungleichung für das Potential $-U(r)$ zu beweisen.
Wir ersetzen nun weiter $U(r)$ durch $\eta U(r)$ mit $0 \leq \eta \leq 1$ und bezeichnen mit $p_\lambda(\eta)$ die Anzahl der gebundenen Zustände, die das Potential $-\eta U(r)$ erzeugt. Offensichtlich ist $p_\lambda(0) = 0$ und ohne Einschränkung $p_\lambda(1) = p_\lambda = p_{\lambda,V(r)}$. Für die n-te Bindungsenergie $E_n = k_n^2$ gilt $[\varphi := \varphi(\lambda, k_n, r)]$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial r}\frac{\partial\varphi}{\partial\eta} - \varphi\frac{\partial^2\varphi}{\partial r\partial\eta}\right) &= \varphi''\frac{\partial\varphi}{\partial\eta} - \varphi\frac{\partial\varphi''}{\partial\eta} \\ &= \varphi''\frac{\partial\varphi}{\partial\eta} - \varphi\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\left[-\eta U - E_n + \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2}\right]\varphi\right) \\ &= \frac{\partial E_n}{\partial\eta}\varphi^2 + U\varphi^2. \end{aligned}$$

Wird dies über dr von 0 bis ∞ integriert, folgt

$$\frac{\partial E_n}{\partial\eta} = \frac{\int_0^\infty \mathrm{d}r\,(-U)\varphi^2}{\int_0^\infty \mathrm{d}r\,\varphi^2} < 0,$$

da φ einen gebundenen Zustand darstellt. Dies macht deutlich, daß $E_n < 0$ eine monoton fallende Funktion von η ist. Das heißt, wenn wir η verkleinern, nähert sich E_n von unten Null an, bis es verschwindet. Somit ist auch klar, daß $p_\lambda(\eta)$ eine monoton steigende Funktion von η ist.
Die Schrödinger-Gleichung für $k^2 = E = 0$ mit dem Potential $-\eta U(r)$ lautet

$$\varphi''(\lambda, 0, r) + \left[-\frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2} + \eta U(r)\right]\varphi(\lambda, 0, r) = 0. \tag{3.34}$$

Tritt für $E = 0$ ein gebundener Zustand auf, so erfüllt $\varphi(\lambda, 0, r)$ die Fredholmsche Integralgleichung

$$\varphi(\lambda, 0, r) = \eta\int_0^\infty \mathrm{d}\rho\, L_\lambda(r, \rho)U(\rho)\varphi(\lambda, 0, \rho). \tag{3.35}$$

Dabei ist

$$L_\lambda(r,\rho) = \frac{1}{2\lambda}\begin{cases} r^{\lambda+\frac{1}{2}}\rho^{-\lambda+\frac{1}{2}} & : \quad r<\rho, \\ r^{-\lambda+\frac{1}{2}}\rho^{\lambda+\frac{1}{2}} & : \quad \rho<r \end{cases}$$

und es gilt

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{\lambda^2-\frac{1}{4}}{r^2}\right) L_\lambda(r,\rho) = \delta(r-\rho).$$

Hierzu vergleiche man die Theorie der Sturm-Liouvilleschen Eigenwertaufgabe in [Heuser;1989].

Die Anzahl p_λ der gebundenen Zustände ist die Anzahl der gebundenen Zustände mit $E=0$ für $0<\eta\leq 1$ und ist deshalb gleich der Anzahl der Eigenwerte η_q, $q=1,\ldots,p_\lambda$ für $\eta_q\in]0,1]$, der Integralgleichung (3.35).

Da $U(r)>0$ ist, sind

$$\begin{aligned} M_\lambda(r,\rho) &:= \sqrt{U(r)}\sqrt{U(\rho)}L_\lambda(r,\rho), \\ \psi(r) &:= \sqrt{U(r)}\varphi(\lambda,0,r), \\ \psi(r) &= \eta_q\int_0^\infty \mathrm{d}\rho\, M_\lambda(r,\rho)\psi(\rho) \end{aligned}$$

wohldefiniert. Der Integralkern $M_\lambda(r,\rho)$ ist symmetrisch, positiv semidefinit und fast überall stetig. Nach Mercers Theorem (Satz 1.9) bzw. Korollar 1.10 gilt somit

$$\sum_{q=1}^\infty \eta_q^{-1} = \int_0^\infty \mathrm{d}r\, M_\lambda(r,r) = \frac{1}{2\lambda}\int_0^\infty \mathrm{d}r\, rU(r).$$

Da aber $\eta_q\leq 1$ falls $q\leq p_\lambda(\eta)$ und $\eta_q>1$ falls $q>p_\lambda(\eta)$, folgt schließlich

$$p_\lambda \leq \sum_{q=1}^{p_\lambda}\eta_q^{-1} \leq \sum_{q=1}^{\infty}\eta_q^{-1} = \frac{1}{2\lambda}\int_0^\infty \mathrm{d}r\, rU(r).$$

Bemerkung: Wegen der Bedingung (3.32) kann hier als interessante Folgerung festgehalten werden:

$$2\lambda > \int_0^\infty \mathrm{d}r\, r|V(r)| \quad \Rightarrow \quad p_\lambda = 0. \tag{3.36}$$

3.2.3 Levinsons Theorem

Ziel dieses Abschnitts ist der Beweis von ([Levinson;1949])

Satz 3.5 *Sei $\lambda \in \mathbb{R}, \lambda > 0$, dann gilt für die Phasenverschiebung $\delta(\lambda, k)$*

$$\lim_{k \to 0^+} \delta(\lambda, k) = p_\lambda \pi, \tag{3.37}$$

wenn $F(\lambda, 0) \neq 0$ ist. Dabei ist p_λ die Anzahl der gebunden Zustände bzw. die Anzahl der Nullstellen der Jost-Funktion $F(\lambda, k)$ für $\mathrm{Im}\,(k) > 0$.

Beweis: Aus Gleichung (3.17) ist bekannt, daß

$$\lim_{|k| \to \infty} F(\lambda, k) = 1, \quad \mathrm{Im}\,(k) \geq 0, \quad \mathrm{Re}\,(\lambda) > 0.$$

Falls die normierte Jost-Funktion $F(\lambda, k)$ keine Nullstellen hat, bildet $F(\lambda, k)$ die oberer Halbebene auf ein beschränktes Gebiet ab, das nicht den Nullpunkt enthält. Wir wollen auf diesem Gebiet die Funktion $\ln F(\lambda, k)$ erklären und entfernen deshalb die negative reelle Achse aus diesem Gebiet. Also existiert der Hauptzweig des Logarithmus ln auf dem Bild von F. Die Funktion $\ln\, F(\lambda, k)$ ist also für $\mathrm{Im}\,(k) > 0$ holomorph und stetig für $\mathrm{Im}\,(k) = 0$ mit Ausnahme der Punkte, die durch F auf die negative reelle Achse abgebildet werden. Falls aber im allgemeinen Fall die normierte Jost-Funktion $F(\lambda, k)$ die p_λ einfachen Nullstellen $k_1, k_2, \ldots, k_{p_\lambda}$ hat (s.Gl. (3.33)), wobei $k_j \in \mathrm{i}\mathbb{R}$, $\mathrm{Im}\,(k_j) > 0$, so sei

$$\tilde{F}(\lambda, k) := \prod_{j=1}^{p_\lambda} \left(\frac{k + k_j}{k - k_j} \right) F(\lambda, k). \tag{3.38}$$

Die Funktion $\ln\, \tilde{F}(\lambda, k)$ kann nun, da $F(\lambda, k)$ nur die einfachen Nullstellen k_j besitzt, für diese k_j holomorph fortgesetzt werden.
Wegen Gleichung (3.17) gilt $\ln\, F(\lambda, k) = \mathrm{O}(1/k)$ für $|k| \to \infty$. Dies führt durch Anwendung von Cauchys Integralsatz über einen Halbkreis in der oberen k-Halbebene auf

$$\ln\, \tilde{F}(\lambda, k) = \frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\kappa \, \frac{\ln\, \tilde{F}(\lambda, \kappa)}{\kappa - k}, \quad \mathrm{Im}\,(k) > 0. \tag{3.39}$$

Die Funktion $F(\lambda, k)$ kann nur endlich viele diskrete Punkte der reellen Achse auf die negative Achse abbilden. Ansonsten wäre $F(\lambda, k)$ wegen Gleichung (3.11) auf einem ganzen Intervall symmetrisch, was der Darstellung aus (3.15) widerspricht, oder könnte die Asymptotik (3.17) nicht erfüllen.

Weiter ist $|\ln F(\lambda,k)|$ auf $\mathbb{R}$ beschränkt. Deshalb kann Korollar 1.24 angewendet werden, so daß aus Gleichung (3.39) im Limes $\mathrm{Im}\,(k) \to 0$ die Darstellung

$$\ln \tilde{F}(\lambda,k) = \mathcal{P}\frac{1}{\pi \mathrm{i}}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\kappa\, \frac{\ln \tilde{F}(\lambda,\kappa)}{\kappa - k}, \quad \mathrm{Im}\,(k) = 0 \tag{3.40}$$

folgt. Andererseits impliziert die Definition (3.38) $\ln \tilde{F}(\lambda,k) = \ln |F(\lambda,k)| - \mathrm{i}\delta(\lambda,k) + \sum \ln[(k+k_j)/(k-k_j)]$. Daraus folgt

$$\begin{aligned}
\delta(\lambda,k) \quad - \quad \mathrm{Im}\left(\sum_{j=1}^{p_\lambda} \ln \frac{k+k_j}{k-k_j}\right) &= -\mathrm{Im}\left(\ln \tilde{F}(\lambda,k)\right) \\
&= \mathcal{P}\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\kappa\, \frac{\ln \tilde{F}(\lambda,\kappa) + \overline{\ln \tilde{F}(\lambda,\kappa)}}{\kappa - k} \\
&= \mathcal{P}\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\kappa\, \frac{(2\mathrm{Re}\left(\ln \tilde{F}(\lambda,\kappa)\right)}{\kappa - k} \\
&= \mathcal{P}\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\kappa\, \frac{\ln |\tilde{F}(\lambda,\kappa)|}{\kappa - k}
\end{aligned}$$

Wegen Gleichung (3.11) verschwindet das Integral auf der rechten Seite obiger Gleichung im Limes $k \to 0$. Damit folgt

$$\begin{aligned}
\lim_{k\to 0^+} \delta(\lambda,k) &= \lim_{k\to 0^+} \mathrm{Im}\left(\sum_{j=1}^{p_\lambda} \ln \frac{k+k_j}{k-k_j}\right) \\
&= p_\lambda \pi.
\end{aligned}$$

□

Bemerkung: Für den Fall $f(\lambda,0) = 0$ und $\lambda > 1/2$ gilt Satz 3.5 unverändert. Falls jedoch $f(\lambda,0) = 0$ und $\lambda = 1/2$ muß das Levinson-Theorem verändert werden zu

$$\lim_{k\to 0^+} \delta(1/2,k) = (p_\lambda + 1/2)k.$$

Siehe dazu [De Alfaro,Regge;1965] Kapitel 5.5 oder [Sabatier,Chadan;1989] Kapitel 2.

3.3 Eine Integraldarstellung für die normalisierte Jost-Funktion

Die Jost-Funktion wird eine bedeutende Rolle in der Formulierung des inversen Problems einnehmen. Sie wird das Verbindungsstück zwischen den experimentellen Daten (Phasenverschiebung, Bindungsenergien der gebundenen Zustände, Normierungskonstanten) und der sogenannten Provzner-Levitan-Darstellung sein (Kapitel 4).
Folgende Integraldarstellung der normalisierten Jost-Funktion ist ein erster Schritt in diese Richtung.
Behauptung: Für $\mathrm{Im}\,(k) > 0$ und $\mathrm{Re}\,(\lambda) > 0$ gilt

$$F(\lambda, k) = \prod_{j=1}^{p_\lambda} \left(1 - \frac{E_j}{E}\right) \exp\left[-\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \mathrm{d}\kappa \, \frac{\delta(\lambda, \kappa)}{\kappa^2 - k^2} \kappa\right], \tag{3.41}$$

wobei die $E_j = k_j^2$ die negativen Bindungsenergien der gebundenen Zustände sind.
Diese Darstellung wird geschlossen, indem genau wie im vorherigen Abschnitt $\tilde{F}(\lambda, k)$ (s.Gl. (3.38)) eingeführt wird. Dort wurde dargestellt, daß $\ln \tilde{F}(\lambda, k)$ eine in $\mathrm{Im}\,(k) > 0$ holomorphe Funktion ist, die sich für $|k| \to \infty$ wie $1/k$ verhält.
Für $\mathrm{Im}\,(k) > 0$ folgt also wieder Gleichung (3.39). Wenn auf der rechten Seite dieser Gleichung k komplex konjugiert wird, erhält man

$$0 = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}\kappa \, \frac{\ln \tilde{F}(\lambda, \kappa)}{\kappa - \overline{k}}. \tag{3.42}$$

Wird nun Gleichung (3.39) mit dem komplex Konjugierten der Gleichung (3.42) addiert, folgt

$$\ln \tilde{F}(\lambda, k) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}\kappa \, \frac{\mathrm{Im}\left(\ln \tilde{F}(\lambda, \kappa)\right)}{\kappa - k}. \tag{3.43}$$

Wird weiter beachtet, daß

$$\mathrm{Im}\left(\ln \tilde{F}(\lambda, \kappa)\right) \quad = \quad -\delta(\lambda, \kappa) + \sum_{j=1}^{p_\lambda} \mathrm{Im}\left(\ln \frac{\kappa + k_j}{\kappa - k_j}\right),$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}\left(\ln\frac{\kappa+k_j}{\kappa-k_j}\right) &= \arg\frac{\kappa+k_j}{\kappa-k_j} = \arctan\frac{2\kappa\gamma_j}{\kappa^2-\gamma_j^2}, \quad (\mathrm{i}\gamma_j := k_j), \\ &= 2\arctan\frac{\gamma_j}{\kappa}, \quad \left(\text{mit } \int\frac{\mathrm{d}u}{1+u^2} = \arctan(u)+C\right)\end{aligned}$$

und daß

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\kappa\,\frac{\arctan\frac{\gamma_j}{\kappa}}{\kappa-k} = \frac{\pi}{2}\left(\mathrm{arctanh}\frac{k_j}{k}+\ln\left(1+\frac{\gamma_j^2}{k^2}\right)\right), \quad k\neq k_j,$$

gilt, so folgt aus Gleichung (3.43) und der aus Gleichung (3.19) bekannten Tatsache, daß $\delta(\lambda,k)$ ungerade in k ist, die gewünschte Integraldarstellung (3.41) für $k\neq k_j$. Für den Fall, daß $k=k_j$, muß $F(\lambda,k=k_j)=0$ gelten. Die letzte Rechnung behält auch für diesen Fall Gültigkeit, falls beachtet wird, daß $\lim_{x\to 1}\exp(\mathrm{arctanh}(x))(x^2-1)=0$ gilt. Also gilt (3.41) für alle k mit $\mathrm{Im}\,(k)>0$. □

Der Fall $\mathrm{Im}\,(k)=0$ wird später der interessantere sein. Es ist aber nicht möglich für diesen Fall eine Integraldarstellung zu erhalten, indem einfach der Hauptwert von dem Integral (3.41) genommen wird, denn für reelles k verliert Gleichung (3.42) seine Gültigkeit.

Allerdings gilt Gleichung (3.40) unverändert. Aus ihr folgt für $\mathrm{Im}\,(k)=0$

$$\mathrm{Re}\left(\ln\,\tilde{F}(\lambda,k)\right) = \ln|F(\lambda,k)| = \mathcal{P}\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\kappa\,\frac{\mathrm{Im}\left(\ln\,\tilde{F}(\lambda,\kappa)\right)}{\kappa-k}.$$

Da nun weiter

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\kappa\,\frac{\arctan\frac{\gamma_j}{\kappa}}{\kappa-k} = \frac{\pi}{2}\ln\left(1+\frac{\gamma_j^2}{k^2}\right), \quad \mathrm{Im}\,(k)=0,$$

gilt, ist schließlich

$$|F(\lambda,k)| = \prod_{j=1}^{p_\lambda}\left(1-\frac{E_j}{E}\right)\exp\left[-\frac{2}{\pi}\mathcal{P}\int_0^{\infty}\mathrm{d}\kappa\,\frac{\delta(\lambda,\kappa)}{\kappa^2-k^2}\kappa\right], \quad \mathrm{Im}\,(k)=0. \quad (3.44)$$

3.4 Entwicklung nach Eigenfunktionen

Das wohl wichtigste Hilfsmittel um die Gel'fand-Levitan-Theorie elegant darzustellen ist die Entwicklung von Funktionen aus $L_2(0,\infty)$ nach Eigenfunktionen der Schrödinger-Gleichung.

Im folgenden werden wir die Menge $\{k|k \in \mathbb{R}$ oder $k = \pm k_j =: \pm \mathrm{i}\gamma_j\}$ als das Spektrum S bezeichnen. Hierbei sind die k_j^2 die reellen Bindungsenergien der gebundenen Zustände.
Desweiteren wird die sogenannte Greensche Funktion

$$G(\lambda, E, r, \rho) = \begin{cases} \varphi(\lambda, k, r)\dfrac{f(\lambda, k, \rho)}{f(\lambda, k)} & : \quad \rho > r \\ \varphi(\lambda, k, \rho)\dfrac{f(\lambda, k, r)}{f(\lambda, k)} & : \quad \rho \leq r \end{cases}$$

benötigt, wobei $r, \rho > 0$, $\mathrm{Re}\,(\lambda) > 0$ und $\arg k \in [0, \pi]$.
Aus den bisherigen Analysen ist bekannt, daß $G(\lambda, E, r, \rho)$ für festes r, ρ eine holomorphe Funktion in E ist, vorausgesetzt E liegt nicht auf dem Spektrum S ($E > 0$ und $E = -\gamma_j^2$).
Als Abschätzung für die Greensche Funktion folgt aus den Gleichungen (2.37), (2.46) und (3.16)

$$|G(\lambda, E, r, \rho)| \leq K \frac{r}{1 + |k|r} \mathrm{e}^{-\mathrm{Im}(k)|r-\rho|}, \quad \mathrm{Im}\,(k) > 0,\ \lambda \text{ fest.} \tag{3.45}$$

Die Greensche Funktion $G(\lambda, E, r, \rho)$ definiert daher einen beschränkten Operator in $L_2(0, \infty)$.

Satz 3.6 *Die Greensche Funktion erfüllt die symbolische Differentialgleichung*

$$\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2} + V(r) - E\right) G(\lambda, E, r, \rho) = \delta(r - \rho), \tag{3.46}$$

hierbei ist $\delta(r - \rho)$ die Diracsche δ-Funktion.

Beweis: Sei $f(t)$ eine für $t \geq 0$ stetige reelle Funktion, dann ist wegen

$$u(r) := \int_0^r \mathrm{d}\rho\, G(\lambda, E, r, \rho) f(\rho) + \int_r^\infty \mathrm{d}\rho\, G(\lambda, E, r, \rho) f(\rho)$$

die erste Ableitung von $u(r)$

$$\begin{aligned} u'(r) &= G(\lambda, E, r, r) f(r) + \int_0^r \mathrm{d}\rho\, G_r(\lambda, E, r, \rho) f(\rho) \\ &\quad -G(\lambda, E, r, r) f(r) + \int_r^\infty \mathrm{d}\rho\, G_r(\lambda, E, r, \rho) f(\rho), \\ \text{also} \quad u'(r) &= \int_0^\infty \mathrm{d}\rho\, G_r(\lambda, E, r, \rho) f(\rho). \end{aligned}$$

Entsprechend folgt

$$\begin{aligned} u''(r) &= G_r(\lambda, E, r-0, r) f(r) + \int_0^r \mathrm{d}\rho\, G_{rr}(\lambda, E, r, \rho) f(\rho) \\ &\quad - G_r(\lambda, E, r+0, r) f(r) + \int_r^\infty \mathrm{d}\rho\, G_{rr}(\lambda, E, r, \rho) f(\rho). \end{aligned}$$

Wegen der Definition der Jost-Funktion $f(\lambda, k)$ folgt hieraus sofort

$$u''(r) = f(r) + \int_0^\infty \mathrm{d}\rho\, G_{rr}(\lambda, E, r, \rho) f(\rho).$$

Mit $q(r) := (\lambda^2 - \frac{1}{4})/r^2 + V(r) - E$ erhalten wir die Identität

$$\begin{aligned} &\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2} - V(r) + E \right) u(r) = \\ &f(r) + \int_0^\infty \mathrm{d}\rho\, \underbrace{\left[G_{rr}(\lambda, E, r, \rho) - q(r) G(\lambda, E, r, \rho) \right]}_{= 0 \text{ falls } \rho \neq r} f(\rho) = f(r). \end{aligned}$$

Das zeigt aber gerade Gleichung (3.46). □

Bemerkung: Werden in obiger Rechnung die Rollen von r und ρ vertauscht, folgt die symbolische Gleichung

$$\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2} + \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{\rho^2} + V(\rho) - E \right) G(\lambda, E, r, \rho) = \delta(r - \rho).$$

Um fortzufahren nehmen wir uns nun eine zweimal stetig differenzierbare Funktion $\psi(r)$, die in einer Umgebung von $r = 0$ und für hinreichend großes r verschwindet. Wird weiter

$$\theta(r) := -\psi''(r) + \left(\frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2} + V(r) \right) \psi(r) \tag{3.47}$$

eingeführt, so verschwindet $\theta(r)$ ebenfalls außerhalb eines endlichen Intervalls, welches nicht den Ursprung enthält.
Gleichungen (3.46) und (3.47) implizieren nun die Identität

$$\int_0^\infty \mathrm{d}\rho\, G(\lambda, E, r, \rho) \psi(\rho) = -\frac{1}{E} \psi(r) + \frac{1}{E} \int_0^\infty \mathrm{d}\rho\, G(\lambda, E, r, \rho) \theta(\rho). \tag{3.48}$$

Als nächstes werden beide Seiten von Gleichung (3.48) über einen „Kreis" $|E| = R$ in der sogenannten Energie-Ebene integriert. Das Integral über den zweiten Term auf der rechten Seite der Gleichung verschwindet aufgrund der Abschätzung (3.45) im Limes $R \to \infty$. Hingegen liefert der erste Term auf der rechten Seite wegen der Cauchyschen Integralformel $-2\pi \mathrm{i}\psi(r)$. Es ist also

$$\psi(r) = -\frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \lim_{R\to\infty} \int_{|E|=R} \mathrm{d}E \int_0^\infty \mathrm{d}\rho\, G(\lambda, E, r, \rho)\psi(\rho). \tag{3.49}$$

Wenn andererseits die linke Seite der Gleichung (3.48) über einen geschlossenen Weg C in der komplexen E-Ebene integriert wird, der das Spektrum S nicht trifft, wie in Abbildung 3.1 angedeutet, so ist nach dem Residuensatz mit $B := \{E \in \mathbb{C} \,|\, |E| = R \text{ oder } |\mathrm{Im}\,(E)\,| > \epsilon \text{ falls } \mathrm{Re}\,(E) > 0\}$.

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int_B \mathrm{d}E \int_0^\infty \mathrm{d}\rho\, G(\lambda, E, r, \rho)\psi(\rho) + \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int_{-\epsilon}^{R} \mathrm{d}E \int_0^\infty \mathrm{d}\rho\, [G(\lambda, E + \mathrm{i}\epsilon, r, \rho) \\
&\quad - G(\lambda, E - \mathrm{i}\epsilon, r, \rho)]\psi(\rho) + \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int_{-\mathrm{i}\epsilon}^{\mathrm{i}\epsilon} \mathrm{d}E \int_0^\infty \mathrm{d}\rho\, G(\lambda, E - \epsilon, r, \rho)\psi(\rho) \\
&\quad - \sum_{E=E_0}^{E_{p_\lambda}} \mathrm{Res}_E \int_0^\infty \mathrm{d}\rho\, G(\lambda, E, r, \rho)\psi(\rho) = 0.
\end{aligned} \tag{3.50}$$

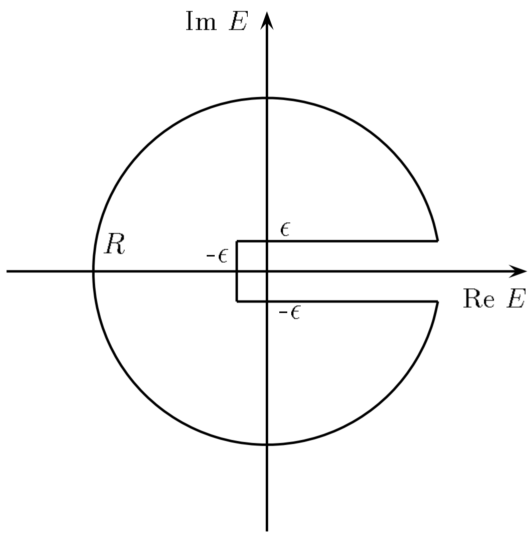

Abbildung 3.1: Integrationsweg C

Die Residuen des dritten Terms auf der linken Seite der Gleichung, sind an den einfachen Polen von $G(\lambda, E, r, \rho)$ zu berechnen. Dabei ist zu beachten, daß

die Pole von $G(\lambda, E, r, \rho)$ die einfachen Nullstellen $k_0, \dots, k_{p_\lambda}$, $E = k^2$, der Jost-Funktion $f(\lambda, k)$ sind.
Aus dem ersten Term der linken Seite der Gleichung (3.50) ergibt sich mit Gleichung (3.49) im Limes $R \to \infty$, $\epsilon \to 0$ $-\psi(r)$. Der zweite Term läßt sich durch eine etwas langwierige Rechnung folgendermaßen umformen:

$$\begin{aligned}
&\int_0^R \mathrm{d}E \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \,[G(\lambda, E+\mathrm{i}\epsilon, r, \rho) - G(\lambda, E-\mathrm{i}\epsilon, r, \rho)]\psi(\rho) \\
&= \int_{-\epsilon}^R \mathrm{d}E \int_0^x \mathrm{d}\rho \left[\tfrac{\varphi(\lambda,\sqrt{E+\mathrm{i}\epsilon},\rho) f(\lambda,\sqrt{E+\mathrm{i}\epsilon},r)}{f(\lambda,\sqrt{E+\mathrm{i}\epsilon})} - \tfrac{\varphi(\lambda,\sqrt{E-\mathrm{i}\epsilon},\rho) f(\lambda,-\sqrt{E-\mathrm{i}\epsilon},r)}{f(\lambda,-\sqrt{E-\mathrm{i}\epsilon})}\right]\psi(\rho) \\
&\quad + \int_{-\epsilon}^R \mathrm{d}E \int_x^\infty \mathrm{d}\rho \left[\tfrac{\varphi(\lambda,\sqrt{E-\mathrm{i}\epsilon},r) f(\lambda,\sqrt{E+\mathrm{i}\epsilon},\rho)}{f(\lambda,\sqrt{E+\mathrm{i}\epsilon})} - \tfrac{\varphi(\lambda,\sqrt{E-\mathrm{i}\epsilon},r) f(\lambda,-\sqrt{E-\mathrm{i}\epsilon},\rho)}{f(\lambda,-\sqrt{E-\mathrm{i}\epsilon})}\right]\psi(\rho).
\end{aligned}$$

Hierbei ist wegen $\arg(k) \in [0, \pi]$ $k = -\sqrt{E - \mathrm{i}\epsilon}$ zu wählen. Wird in obiger Gleichung beispielhaft das erste Integral auf der rechten Seite betrachtet, so liefert der Grenzübergang $R \to \infty$, $\epsilon \to 0$

$$\begin{aligned}
&\int_0^\infty \mathrm{d}k\, 2k \int_0^r \mathrm{d}\rho\, \varphi(\lambda, k, \rho) \left[\frac{f(\lambda, k, r)}{f(\lambda, k)} - \frac{f(\lambda, -k, r)}{f(\lambda, -k)}\right]\psi(\rho) \\
&= \int_0^\infty \mathrm{d}k\, 2k \int_0^r \mathrm{d}\rho\, \varphi(\lambda, k, \rho) \left[\frac{W(f(\lambda, -k, r), \varphi(\lambda, -k, r))}{f(-k)} \frac{f(\lambda, k, r)}{f(\lambda, k)}\right. \\
&\quad \left. - \frac{W(f(\lambda, k, r), \varphi(\lambda, k, r))}{f(k)} \frac{f(\lambda, -k, r)}{f(\lambda, -k)}\right]\psi(\rho) \\
&= \int_0^\infty \mathrm{d}k\, 2k \int_0^r \mathrm{d}\rho\, \varphi(\lambda, k, \rho)\varphi(\lambda, k, r) \frac{-W(f(\lambda, k, r), f(\lambda, -k, r))}{f(\lambda, k) f(\lambda, -k)}\psi(\rho) \\
&= \int_0^\infty \mathrm{d}k\, \varphi(\lambda, k, r) \frac{4\mathrm{i}k^2}{f(\lambda, k) f(\lambda, -k)} \int_0^r \mathrm{d}\rho\, \varphi(\lambda, k, \rho)\psi(\rho).
\end{aligned}$$

Bei dieser Rechnung sei an die bekannten Tatsachen $W(f(\lambda, k, r), f(\lambda, -k, r) = -2\mathrm{i}k$, $\varphi(\lambda, -k, r) = \varphi(\lambda, k, r)$ und $\varphi'(\lambda, -k, r) = \varphi'(\lambda, k, r)$ erinnert.
Eine analoge Rechnung läßt sich für das zweite Integral ausführen. Der dritte Term aus Gleichung (3.50) verschwindet im Limes $\epsilon \to 0$. Das Integral des vierten Terms schreibt sich als:

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty \mathrm{d}\rho\, G(\lambda, E, R, \rho)\psi(\rho) &= \int_0^r \mathrm{d}\rho\, \varphi(\lambda, k, \rho) \frac{f(\lambda, k, r)}{f(\lambda, k)}\psi(\rho) \\
&\quad + \int_r^\infty \mathrm{d}\rho\, \varphi(\lambda, k, r) \frac{f(\lambda, k, \rho)}{f(\lambda, k)}\psi(\rho).
\end{aligned}$$

Wird nun für das erste Integral auf der rechten Seite obiger Gleichung das Residuum an der Stelle $E = k_j^2$, $j = 1, \dots, p_\lambda$, berechnet und Gleichung (3.21) beachtet, folgt

$$\begin{aligned}
&\mathrm{Res}_{E=k_j^2} \int_0^r \mathrm{d}\rho\, \varphi(\lambda,k,\rho) \frac{f(\lambda,k,r)}{f(\lambda,k)} \psi(\rho) \\
&= \mathrm{Res}_{E=k_j^2} \int_0^r \mathrm{d}\rho\, \varphi(\lambda,k,\rho) \varphi(\lambda,k,r) \frac{1}{c(\lambda) f(\lambda,k)} \psi(\rho) \\
&= \left. \frac{2k}{c(\lambda) \dfrac{\mathrm{d}f(\lambda,k)}{\mathrm{d}k}} \right|_{k=k_j} \varphi(\lambda,k_j,r) \int_0^r \mathrm{d}\rho\, \varphi(\lambda,k_j,\rho) \psi(\rho).
\end{aligned}$$

Dabei ist zu beachten, daß

$$\mathrm{Res}_{z_0} \frac{g}{h} = \frac{g}{h'(z_0)}$$

für in einer Umgebung von z_0 holomorphe Funktionen g, h, wobei h in z_0 eine Nullstelle erster Ordnung hat. Analog kann für das Integral $\int_r^\infty \mathrm{d}\rho \ldots$ verfahren werden.

Sammeln wir unsere Resultate, so folgt

$$\begin{aligned}
\psi(r) &= \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \mathrm{d}k\, \varphi(\lambda,k,r) \frac{k^2}{f(\lambda,k) f(\lambda,-k)} \int_0^\infty \mathrm{d}\rho\, \varphi(\lambda,k,\rho) \psi(\rho) \\
&\quad + \sum_{j=1}^{p_\lambda} C_j \varphi(\lambda,k_j,r) \int_0^\infty \mathrm{d}\rho\, \varphi(\lambda,k_j,\rho) \psi(\rho),
\end{aligned}$$

wobei im allgemeinen wegen Gleichung (3.30) gilt

$$C_j = - \left. \frac{2k}{\dfrac{\mathrm{d}f(\lambda,k)}{\mathrm{d}k}} \right|_{k=k_j} \lim_{r\to 0} \frac{r^{\lambda+\frac{1}{2}}}{f(\lambda,k_j,r)}, \tag{3.51}$$

bzw. wenn Gleichung (3.31) gilt ($|k_j| < m/2$)

$$C_j = - \left. \frac{4\mathrm{i}k^2}{f(\lambda,-k) \dfrac{\mathrm{d}f(\lambda,k)}{\mathrm{d}k}} \right|_{k=k_j}.$$

Da die Menge aller zweimal stetig differenzierbaren Funktionen $\psi(r)$, die in einer Umgebung des Nullpunktes und für hinreichend großes r verschwinden, dicht in $L_2(0,\infty)$ ist ([Chandrasekharan;1987]), gilt obige Rechnung sogar für alle $\psi \in L_2(0,\infty)$.

Als Ergebnis dieses Abschnitts erhalten wir den für die Gel'fand-Levitan-Theorie sehr wertvollen Satz

Satz 3.7 *Für* $\mathrm{Re}\,(\lambda) > 0$ *bilden die Funktionen* $\varphi(\lambda, k, r)$, $k \geq 0$, *und* $\varphi(\lambda, k_j, r)$, $k_j \in \mathrm{i}\mathbb{R}$, $\mathrm{Im}\,(k_j) > 0$, *ein vollständiges orthogonales System in* $L_2(0, \infty)$. *Die Vollständigkeitsrelation läßt sich symbolisch schreiben als*

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varrho(E)_\lambda\, \varphi(\lambda, k, r)\varphi(\lambda, k, \rho) = \delta(r - \rho), \tag{3.52}$$

wobei

$$\frac{\mathrm{d}\varrho(E)_\lambda}{\mathrm{d}E} = \begin{cases} \frac{\sqrt{E}}{\pi} \frac{1}{|f(\lambda, \sqrt{E})|^2} & : \quad E \geq 0, \\ \sum_{j=1}^{p_\lambda} C_j \delta(E - E_j) & : \quad E < 0. \end{cases} \tag{3.53}$$

Hierbei sind die C_j *durch (3.51) gegeben.*
Wenn $V \equiv 0$ *ist, folgt*

$$\frac{\mathrm{d}\varrho(E)_{\lambda,0}}{\mathrm{d}E} := \frac{\mathrm{d}\varrho(E)_{\lambda,V\equiv 0}}{\mathrm{d}E} = \begin{cases} \frac{\sqrt{E}}{\pi} \frac{1}{|f_0(\lambda, \sqrt{E})|^2} & : \quad E \geq 0, \\ 0 & : \quad E < 0. \end{cases} \tag{3.54}$$

Werden ausschließlich „S-Wellen“ $(\lambda = 1/2)$ *betrachtet, so ist*

$$\frac{\mathrm{d}\varrho(E)_{1/2,0}}{\mathrm{d}E} = \begin{cases} \frac{\sqrt{E}}{\pi} & : \quad E \geq 0, \\ 0 & : \quad E < 0. \end{cases} \tag{3.55}$$

3.5 Die Verbindung zwischen der Phasenverschiebung und der Streuamplitude

In diesem Abschnitt wird eine Verbindung zwischen den in einem physikalischen Experiment wirklich meßbaren Daten und der Phasenverschiebung $\delta(\lambda, k)$ hergestellt. Es wird gezeigt, daß die Phasenverschiebung, die für die Gel'fand-Levitan-Theorie zu den experimentellen Daten gehört, aus den wirklich meßbaren Daten nicht rekonstruiert werden kann. Dadurch verliert die Gel'fand-Levitan-Theorie an praktischer Bedeutung.

Es sei daran erinnert, daß der Ausgangspunkt der Analyse die Schrödinger-Gleichung (2.2) war:

$$\Delta\Psi(\boldsymbol{r}) + k^2\Psi(\boldsymbol{r}) - V(r)\Psi(\boldsymbol{r}) = 0. \tag{3.56}$$

Am Streuzentrum erzeugt die einfallende Welle $\Psi_0(\boldsymbol{r})$ eine Streuwelle $\Psi_s(\boldsymbol{r})$. Da diese dort erst erzeugt wird, darf sie natürlich nur auslaufende Anteile enthalten. Wird beachtet, daß für $r \to \infty$ wieder eine kräftefreie Bewegung einsetzt, so rechtfertigt sich der Ansatz

$$\Psi(\boldsymbol{r}) \sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}k*r} + F(k, \cos\vartheta)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}, \quad \text{für } r \to \infty, \tag{3.57}$$

wobei $\cos(\vartheta) := \boldsymbol{k} * \boldsymbol{r}/kr$, $\boldsymbol{k}$ der Impulsvektor des Teilchens ist und $|\boldsymbol{k}| = k$ (siehe auch Abbildung 3.2).

In Gleichung (3.57) steht der erste Term auf der rechten Seite für die einlau-

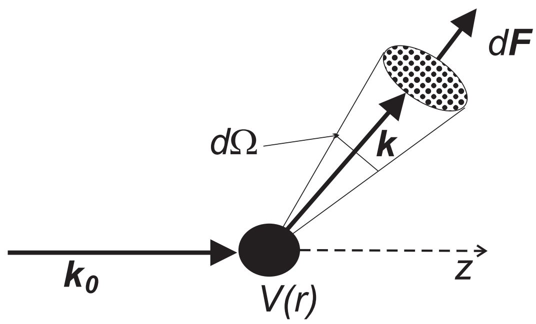

Abbildung 3.2:

fende Ebene Welle und der zweite Term für die am Streuzentrum gestreute Welle $\Psi_s(r)$. Für Details, die zu Gleichung (3.57) führen, siehe [Nolting;1993] Kapitel 9 oder [Dawydow;1981] Kapitel 14.

Die Funktion $F(k, \cos\vartheta)$ ist die sogenannte Streuamplitude. Sie spielt in der Streutheorie eine sehr wichtige Rolle, weil sie nämlich direkt mit dem differentiellen Wirkungsquerschnitt $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$ durch

$$\mathrm{d}\sigma = |F(k, \cos\vartheta)|^2 \mathrm{d}\Omega$$

verbunden ist. Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist dem Experimentator direkt zugänglich. Seine physikalische Bedeutung ist die Anzahl der Teilchen, die pro Sekunde in dem Raumwinkelelement $\mathrm{d}\Omega$ durch $\mathrm{d}\boldsymbol{F}$ hindurchtreten, bezogen auf die gesamte, am Streuprozeß teilnehmende, Teilchenzahl (Abbildung

3.2).
Im folgenden sei $l = \lambda - 1/2$ physikalisch, also $l \in \mathbb{N}$.
Es wird nun eine Verbindung zwischen der Streuamplitude $F(k, \cos\vartheta)$, also den meßbaren Daten, und der Phasenverschiebung $\delta(\lambda, k)$ hergestellt.
In [Nolting;1993] Seite 299 ist nachzulesen, daß folgende Identität gilt:

$$e^{ik*r\cos(\vartheta)} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l j_l(kr)P_l(\cos(\vartheta)), \tag{3.58}$$

wobei

$$\begin{aligned} j_l(kr) &= \sqrt{\frac{\pi}{2kr}}J_\lambda(kr), \quad \lambda = l + \tfrac{1}{2}, \\ &= \sqrt{\pi}2^{-\lambda-\frac{1}{2}}k^{\lambda-\frac{1}{2}}[\Gamma(\lambda+1)]^{-1}r^{-1}\varphi_0(\lambda, k, r), \end{aligned}$$

die sphärische Bessel-Funktion und $P_l(\cos\vartheta)$ das Legendre-Polynom ist. Bekanntlich ist das asymptotische Verhalten von $j_l(z)$

$$j_l(z) \sim z^{-1}\sin\left(z - \frac{1}{2}(\lambda - \frac{1}{2})\pi\right), \quad \text{für } |z| \to \infty. \tag{3.59}$$

Man kann nun weiter nachrechnen, daß die Reihe

$$\Psi(\boldsymbol{r}) := \frac{1}{r}\sum_{l=0}^{\infty}(-1)^l(2l+1)\frac{\varphi(\lambda, k, r)}{f(\lambda, k)}P_l(\cos\vartheta)$$

eine Lösung der Schrödinger-Gleichung (3.56) ist und sich für $V \equiv 0$ auf (3.58) reduziert. $\Psi(\boldsymbol{r})$ besitzt wegen Gleichung (2.38) und (3.4) das asymptotische Verhalten

$$\Psi(r) \;\sim\; \frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{\infty} i^l(2l+1)P_l(\cos(\vartheta))e^{i\delta(\lambda,k)}\sin\left(kr + \delta(\lambda, k) - \frac{1}{2}l\pi\right), \quad r \to \infty.$$

Aus der Identität

$$e^{i\delta}\sin\left(kr + \delta - \frac{1}{2}l\pi\right) = \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi\right) + \frac{1}{2i}e^{i(kr-\frac{1}{2}l\pi)}(e^{2i\delta} - 1)$$

und Gleichung (3.59) folgt weiter

$$\Psi(\boldsymbol{r}) \sim e^{ik*r} + \frac{e^{ikr}}{2ikr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\vartheta)[e^{2i\delta(\lambda,k)} - 1].$$

Wird dieses Resultat mit Gleichung (3.57) verglichen, liefert es

$$F(k, \cos\vartheta) = \frac{1}{2\mathrm{i}k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)[\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta(\lambda,k)} - 1] P_l(\cos\vartheta).$$

Diese berühmte Formel wurde schon 1894 von Rayleigh hergeleitet und stellt die Streuamplitude $F(k, \cos\vartheta)$ als Zerlegung in sogenannte Partialwellen dar. Mit der Orthogonalitäts Eigenschaft $\int_{-1}^{1} \mathrm{d}z\, P_l(z) P_k(z) = 2\delta_{kl}/(2l+1)$ der Legendre Polynome folgt umgehend

$$\delta(\lambda, k) = \frac{1}{2\mathrm{i}} \ln\left(\mathrm{i}k \int_{-1}^{1} \mathrm{d}z\, P_l(z) F(k, z) + 1\right).$$

Im Kapitel 4 wird noch gezeigt, daß für die Lösung des inversen Problems die Phasenverschiebung $\delta(\lambda, k)$ benötigt wird, während experimentell nur der Betrag der Streuamplitude $F(k, \cos\vartheta)$ zur Verfügung steht. Desweiteren liefert der differentielle Wirkungsquerschnitt auch nicht die für die Gel'fand-Levitan-Theorie notwendigen Energien für die gebundenen Zustände und die damit verbundenen Normierungskonstanten.

Kapitel 4

Die Gel'fand-Levitan-Theorie

Es gibt zwei zueinander äquivalente Möglichkeiten das inverse Problem für einen festen Drehimpuls zu lösen. Die erste, die hier besprochen wird, benutzt die reguläre Lösung $\varphi(\lambda, k, r)$ und wurde sowohl von Gel'fand und Levitan [Gel'fand,Levitan;1955] als auch von Jost und Kohn entwickelt. Die zweite Möglichkeit benutzt die Jost-Lösung $f(\lambda, k, r)$ und wurde von Marchenko hergeleitet.

Hier wird die Theorie nur explizit für S-Streuung ($\lambda = 1/2$) erarbeitet, weil dieser Fall deutlich leichter handhabbar ist. Die Unterschiede für allgemeines $\lambda \geq 3/2$ werden hier lediglich beschreibend in einem Abschnitt am Ende des Kapitels besprochen (siehe dazu auch [Sabatier,Chadan;1989]).
Der kürzeren Schreibweise wegen, werden wir die Notationen $\varphi(k, r) := \varphi(1/2, k, r)$ usw. benutzen.

Den Zugang zur Gel'fand-Levitan-Theorie eröffnet eine Integraldarstellung der regulären Lösung $\varphi(k, r)$. Diese Darstellung ist die sogenannte Provzner-Levitan-Darstellung:

4.1 Die Provzner-Levitan-Darstellung

Zunächst wird die Funktion

$$\psi(k, r) \ := \ \varphi(k, r) - \varphi_0(k, r),$$

mit

$$\varphi_0(k,r) \quad = \quad \frac{\sin kr}{k},$$

eingeführt. Wegen den Abschätzungen (2.36), (2.37) und $(\exp(k^{-1})-1)^2 \sim k^{-2}$ für große k ist $k\psi(k,r) \in L_2(-\infty,\infty)$ als Funktion von k und $k\psi(k,r)$ nach Definition 1.18 vom exponentiellen Typ r. Dann sind die Voraussetzungen des Satzes 1.19 (Paley-Wiener) für die Funktion $k\psi(k,r)$ erfüllt. Wenn außerdem noch beachtet wird, daß $k\psi(k,r)$ eine ungerade Funktion von k ist ($\lambda = 1/2$), folgt insgesamt die Integralgleichung

$$\varphi(k,r) = \frac{\sin kr}{k} + \int_0^r \mathrm{d}t\, K(r,t)\frac{\sin kt}{k}, \tag{4.1}$$

wobei nach Satz 1.19 der Kern $K(r,t) \in L_2(0,r)$ in der Variablen t ist. Die Integralgleichung (4.1) ist die sogenannte **Provzner-Levitan-Darstellung** und $K(r,t)$ wird auch Provzner-Levitan-Kern genannt. Die Darstellung 4.1 ist der Schlüssel zur Lösung des inversen Problems.

Als nächstes wird gezeigt, daß der Kern $K(r,t)$ endlich für alle $0 \leq t \leq r$ ist. Der erste Schritt in diese Richtung ist, Gleichung (4.1) in die Integralgleichung (2.35) einzusetzen:

$$\begin{aligned}
&\int_0^r \mathrm{d}t\, K(r,t)\frac{\sin kt}{k} \\
&\quad = \int_0^r \mathrm{d}\rho\, \frac{\sin k(r-\rho)}{k} V(\rho) \left[\frac{\sin k\rho}{k} + \int_0^\rho \mathrm{d}t\, K(\rho,t)\varphi(k,\rho)\right].
\end{aligned}$$

Wird nun vorausgesetzt, daß $V(r)$ bei $r = 0$ integrierbar ist, so können die trigonometrischen Funktionen, wie im Anhang B im Detail beschrieben, eliminiert werden. Es folgt für $0 \leq t \leq r$ die Integralgleichung

$$\begin{aligned}
K(r,t) \quad = \quad & \frac{1}{2}\int_{(r-t)/2}^{(r+t)/2} \mathrm{d}s\, V(s) \\
& + \int_{(r-t)/2}^{(r+t)/2} \mathrm{d}s \int_0^{(r-t)/2} \mathrm{d}u\, V(s+u)K(s+u,s-u).
\end{aligned} \tag{4.2}$$

Obige Gleichung kann durch Iteration gelöst werden. Im Anhang B ist dieses genau ausgeführt. Dort wird für $K(r,t)$ die Abschätzung

$$|K(r,t)| \leq \frac{1}{2}\int_{(r-t)/2}^{(r+t)/2} \mathrm{d}s\, |V(s)| \exp\left[\int_0^{(r+t)/2} \mathrm{d}u\, u|V(u)|\right] \tag{4.3}$$

gezeigt. Gleichung (4.3) zeigt, daß $K(r,t)$ für alle $0 \le t \le r$ endlich ist. Wenn außerdem in Gleichung (4.2) $t = r$ gesetzt wird, reduziert sie sich auf

$$K(r,r) = \frac{1}{2}\int_0^r \mathrm{d}t\, V(t). \tag{4.4}$$

Falls das Potential eine gewöhnlich stetige Funktion ist, liefert obige Gleichung offenbar eine Möglichkeit das Potential $V(r)$ aus dem Kern $K(r,r)$ zu berechnen:

$$V(r) = 2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}K(r,r). \tag{4.5}$$

Ein Weg zur Rekonstruktion des Potentials könnte also sein, den Kern $K(r,r)$ bereitzustellen. Genau dies erreicht die Gel'fand-Levitan-Integralgleichung.

Für den Fall, daß $V(r)$ bei $r = 0$ nicht integrierbar ist, also wie vorher im allgemeinen $r|V(r)| \in L_1[0,\infty]$ gilt, so gelten (4.2) und (4.3) zumindest für $t < r$. Desweiteren kann für diesen Fall die Rechnung im Anhang B so modifiziert werden, daß zumindest noch die Darstellung

$$K(R,R) - K(r,r) = \frac{1}{2}\int_r^R \mathrm{d}t\, V(t)$$

gilt.

Dieser Abschnitt wird beendet, indem noch die Inverse zu Gleichung (4.1) angeben wird:

$$\frac{\sin kr}{k} = \varphi(k,r) + \int_0^r \mathrm{d}t\, \tilde{K}(r,t)\varphi(k,t). \tag{4.6}$$

Diese Gleichung folgt, wenn Gleichung (4.1) als Volterrasche Integralgleichung in $\sin kr/k$ mit dem inhomogenen Term $\varphi(k,r)$ aufgefaßt wird und dabei Satz 1.4 angewendet wird. Dies ist möglich, da wir wissen, daß $K(r,t)$ für alle $0 \le t \le r$ endlich ist. Der zitierte Satz garantiert dann weiter die Gültigkeit von

$$K(r,t) + \tilde{K}(r,t) + \int_t^r \mathrm{d}s\, \tilde{K}(r,s)K(s,t) = 0.$$

4.2 Die Gel'fand-Levitan-Integralgleichung

Die mathematische Analyse der Streutheorie reicht inzwischen so weit, daß es nicht mehr schwierig sein wird, die Gel'fand-Levitan-Integralgleichung herzuleiten.

Die Vollständigkeitsrelation (3.52) und (3.53) für $\varphi(k,r)$ lautet:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varrho(E)\, \varphi(k,r)\varphi(k,t) = \delta(r-t), \tag{4.7}$$

$$\frac{\mathrm{d}\varrho(E)}{\mathrm{d}E} = \begin{cases} \frac{\sqrt{E}}{\pi}\frac{1}{|f(\sqrt{E})|^2}, & E \geq 0, \\ \sum_{j=0}^{p_\lambda} C_j \delta(E-E_j), & E < 0. \end{cases} \tag{4.8}$$

Wegen Gleichung (4.7) gilt offenbar

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varrho(E)\, \varphi(\sqrt{E},r)\varphi(\sqrt{E},r') = 0, \quad r \neq r'. \tag{4.9}$$

Werden beide Seiten von Gleichung (4.6) mit $\varphi(\sqrt{E},r_1)$, $0 \leq r < r_1$, multipliziert und diese anschließend nach $\varrho(E)$ von $-\infty$ bis ∞ integriert, folgt wegen (4.9)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varrho(E)\, \frac{\sin kr}{k}\varphi(\sqrt{E},r_1) = 0.$$

Wenn nun beide Seiten von Gleichung (4.1) mit $\sin kt/k$ multipliziert werden, nach $\varrho(E)$ von $-\infty$ bis ∞ integriert werden und die Notation ein wenig geändert wird ($t \to s$), folgt für $t < r$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varrho(E)\, \frac{\sin kr}{k}\frac{\sin kt}{k} + \int_0^r \mathrm{d}s\, K(r,s) \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varrho(E)\, \frac{\sin ks}{k}\frac{\sin kt}{k} = 0. \tag{4.10}$$

Als nächstes ist es sinnvoll

$$\begin{aligned} \mathrm{d}\sigma &:= \mathrm{d}\varrho - \mathrm{d}\varrho_0 = \begin{cases} \mathrm{d}\varrho(E) - \mathrm{d}\left(\frac{2E^{3/2}}{3\pi}\right), & E \geq 0, \\ \mathrm{d}\varrho(E), & E < 0, \end{cases} \\ \text{und} \quad G(r,t) &:= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\sigma\, \frac{\sin kr}{k}\frac{sin\, kt}{k} \\ &= \frac{2}{\pi}\int_0^{\infty} \mathrm{d}k\, \sin(kr)\sin(kt)\left[\frac{1}{|f(k)|^2} - 1\right] \\ &\quad + \sum_{j=1}^{p_{1/2}} \frac{C_j}{\gamma_j^2}\sinh(\gamma_j r)\sinh(\gamma_j t) \end{aligned} \tag{4.11}$$

zu definieren. Außerdem sei daran erinnert, daß, symbolisch geschrieben, die Relation

$$\frac{2}{\pi}\int_0^{\infty} \mathrm{d}k\, \sin(kr)\sin(kt) = \delta(r-t) \tag{4.12}$$

gilt. Wenn mit diesen Informationen Gleichung (4.10) betrachtet wird, folgt

$$K(r,t) + G(r,t) + \int_0^r \mathrm{d}s\, K(r,s)G(s,t) = 0, \quad t < r. \tag{4.13}$$

Diese Gleichung ist die sogenannte **Gel'fand-Levitan-Integralgleichung**, das eigentliche Ergebnis dieses Abschnitts.

Daß die Funktion $G(r,t)$ für $0 \leq t \leq r$ eine endliche Funktion ist, ist nicht unmittelbar klar. Für $t < r$ folgt dies sofort daraus, daß der Integrand oszilliert und nach (3.17) $\lim_{k\to\infty} 1/|f(k)|^2 = 1$ gilt. Für $t = r$ ist die Abschätzung (3.17) zu grob. Stattdessen ist es vorteilhafter die Darstellung (3.15) zu verwenden. Dann gilt nämlich wegen $f_0(k) = 1$ und $f_0(k,r) = \exp(\mathrm{i}kr)$

$$|f(k)|^2 = 1 + \int_0^\infty \mathrm{d}r\, 2\cos(kr)V(r)\varphi(k,r) + |f(k)-1|^2.$$

Da $f(k) = 1$ für $k \to \infty$, erhalten wir für große k die Asymptotik

$$|f(k)|^2 - 1 \sim \int_0^\infty \mathrm{d}r\, 2\cos(kr)V(r)\varphi(k,r).$$

Der Fehler den wir dabei für große k machen, ist $\mathrm{O}(k^{-2})$. Nehmen wir der kürzeren Schreibweise wegen $p_{1/2} = 0$ an und beachten, daß in Gleichung (4.11) bei dem k-Integral das Verhalten des Integranden im Unendlichen von Interesse ist, so genügt es näherungsweise

$$G(r,t) \approx \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}k \int_0^\infty \mathrm{d}u\, \sin(kr)\sin(kt) 2\cos(ku)V(u)\varphi(k,u)$$

zu betrachten. Wird nun das Additionstheorem $2\sin(kr)\sin(kt) = \cos(k(r-t)) - \cos(k(r+t))$ angewendet, die Asymptotik $\varphi(k,r) \sim \sin(kr)/k$ für große k und die Defintion $W(r) := -\int_r^\infty \mathrm{d}\rho\, V(\rho)$ verwendet, so folgt bei partieller Integration des u-Integrals unter Beachtung von $rW(r) = 0$ für $r = 0$ und $r = \infty$

$$\begin{aligned}
G(r,t) &\approx \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}k \int_0^\infty \mathrm{d}u\,[\cos(k(r-t)) - \cos(k(r+t))]\cos(ku)\frac{\sin(ku)}{k}W'(u) \\
&= \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}k \int_0^\infty \mathrm{d}u\,[\cos(k(r-t)) - \cos(k(r+t))]\cos(2ku)W(u) \\
&= \int_0^\infty \mathrm{d}u\, W(u)\frac{2}{\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}k\,[\cos(k(r-t)) - \cos(k(r+t))]\cos(2ku) \\
&= \int_0^\infty \mathrm{d}u\, W(u)[\delta(u-(r-t)/2) - \delta(u-(r+t)/2)] \\
&= W\left(\frac{r-t}{2}\right) - W\left(\frac{r+t}{2}\right).
\end{aligned}$$

Da wir $V(r)$ als integrierbar bei $r = 0$ vorausgesetzt haben, ist somit klar, daß $G(r,t) < \infty$ für alle $0 \leq t \leq r$.

4.2.1 Eindeutigkeit der Lösung der Gel'fand-Levitan-Integralgleichung

Die Gel'fand-Levitan-Integralgleichung (4.13) ist für festes r eine Fredholmsche Integralgleichung in der Variablen t. Um später zum Beispiel mit Gleichung (4.5) aus dem Kern $K(r,t)$ das Potential eindeutig zu gewinnen, muß dargestellt werden, daß die Gel'fand-Levitan-Gleichung eine im L_2-Sinne eindeutige Lösung $K(r,t)$ besitzt.

Satz 4.1 *Die Gel'fand-Levitan-Gleichung (4.13) besitzt eine eindeutige Lösung $K(r,t)$ für festes $r > 0$.*

Beweis: Wir nehmen im folgenden an, daß $\mathrm{d}\sigma$ gegeben ist. Nach Satz 1.6 ist die Fredholmsche Integralgleichung für die unbekannte Funktion $K(r,t)$ genau dann eindeutig lösbar, wenn die zugehörige homogene Integralgleichung

$$\bar{K}(r,t) + \int_0^r \mathrm{d}s\, \bar{K}(r,s)G(s,t) = 0 \tag{4.14}$$

nur die triviale L_2-Lösung besitzt. Das heißt die Lösung muß fast überall verschwinden. Um dies einzusehen wird Gleichung (4.14) mit $\bar{K}(r,t)$ multipliziert, um sie anschließend über t von 0 bis r zu integrieren:

$$J := \int_0^r \mathrm{d}t\, \bar{K}^2(r,t) + \int_0^r \mathrm{d}s \int_0^r \mathrm{d}t\, G(s,t)\bar{K}(r,s)\bar{K}(r,t) = 0.$$

Unter Beachtung von Gleichung (4.12) folgt, daß Gleichung (4.11) geschrieben werden kann als

$$\begin{aligned} G(r,t) &= \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varrho(E)\, \frac{\sin kr}{k}\frac{\sin kt}{k}}_{=:\bar{G}(r,t)} - \delta(r-t) \\ &= \bar{G}(r,t) - \delta(r-t). \end{aligned}$$

Damit folgt für J:

$$\begin{aligned} J &= \int_0^r \mathrm{d}s \int_0^r \mathrm{d}t\, \bar{K}(r,t)\bar{K}(r,s)\bar{G}(s,t) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varrho(E) \left[\int_0^r \mathrm{d}t\, \bar{K}(r,t)\frac{\sin kt}{k}\right]^2 = 0. \end{aligned}$$

Da wegen Gleichung (4.8) die Spektraldichte $\mathrm{d}\varrho$ positiv ist, folgt schließlich

$$\int_0^r \mathrm{d}t\, \bar{K}(r,t) \sin kt = 0, \quad \text{für fast alle } k.$$

Somit ist im L_2-Sinne $\bar{K}(r,t) = 0$ für $t \in [0,r]$ und $r > 0$. □

Im nächsten Unterabschnitt wird eine Bedingung angegeben, die bei gegebener Phasenverschiebung $\delta(\lambda, k)$ die Überprüfung zuläßt, ob das Potential $V(r)$ der für unsere Zwecke notwendigen Bedingung (2.7) genügt, ob also gilt

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r\, r|V(r)| < \infty.$$

4.2.2 Regularität der experimentellen Daten

Die sogenannten Marchenko-Methode liefert folgenden Satz

Satz 4.2 *Wenn die Phasenverschiebung $\delta(\lambda, k)$ für einen festen Drehimpuls $l = \lambda - 1/2$ eine stetige Funktion von k ist und außerdem mit der Definition*

$$A_0(t) := \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \, \left[\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta(\lambda,k)} - 1\right] \mathrm{e}^{\mathrm{i}kt}$$

gilt:

$$\int_0^\infty \mathrm{d}t\, t|A_0{}'(t)| < \infty.$$

Dann erfüllt das Potential die Bedingung (2.7)

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r\, r|V(r)| < \infty.$$

Beweis: Siehe dazu [Sabatier,Chadan;1989] Kapitel 3 und 5. □

4.3 Resultate für Teilchen mit einem Drehimpuls $l > 0$

Wir werden uns hier lediglich Resultate der Gel'fand-Levitan-Theorie für Streuexperimente mit einem Drehimpuls von $l = \lambda - 1/2 > 0$ aus der Literatur vergegenwärtigen (Siehe dazu [Sabatier,Chadan;1989].).

Es wurde gezeigt, daß die Jost-Funktion $F(\lambda, k)$ und die Phasenverschiebung

$\delta(\lambda, k)$ für beliebiges $\lambda > 0$ im wesentlichen dieselben analytischen Eigenschaften haben. Der wesentliche Unterschied in der Behandlung der Gel'fand-Levitan-Theorie für beliebiges $\lambda > 0$ besteht in folgenden Punkten:

- Der Satz von Paley-Wiener 1.19 reicht nun nicht mehr aus, um die Provzner-Levitan-Darstellung (4.1) herzuleiten. Abhilfe schafft hier die Arbeit [Levin;1956], in der der Autor den Satz von Paley-Wiener und ähnliche Sätze verallgemeinert, indem er Hankel-Funktionen anstatt der Exponential-Funktion verwendet. Die dortigen Resultate führen direkt zu der allgemeineren Provzner-Levitan-Darstellung

  $$\varphi(\lambda, k, r) = \varphi_0(\lambda, k, r) + \int_0^r \mathrm{d}t\, K(\lambda, r, t)\varphi_0(\lambda, k, t), \tag{4.15}$$

  wobei $\varphi_0(\lambda, k, r)$ in (2.29) definiert ist.

- Die nächste Schwierigkeit besteht darin, Gleichung (4.2) herzuleiten. Hierbei werden nun anstatt Sinus-Fourier-Transformationen Integraltransformationen in Termen von Bessel- und Hankel-Funktionen verwendet. Dies gestaltet sich ungleich schwieriger, weil nun Integrale zu verarbeiten sind, in denen ein Produkt von vier Bessel-Funktionen auftritt. Ist dies aber bewältigt, folgt analog zu (4.5)

  $$V(r) = 2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}K(\lambda, r, r). \tag{4.16}$$

Wird die allgemeine Provzner-Levitan-Darstellung mit $\varphi(\lambda, k, r')$, $r' > r$ multipliziert und über $\varrho(E)_\lambda$ von 0 bis ∞ integriert, folgt mit Hilfe der Vollständigkeitsrelation (3.52)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varrho(E)_\lambda\, \varphi_0(\lambda, k, r)\varphi(\lambda, k, r') = 0.$$

Benutzt man dies, wenn die allgemeine Provzner-Levitan-Darstellung mit $\varphi_0(\lambda, k, t)$, $t < r$, multipliziert wird und anschließend auf beiden Seiten nach $\varrho(E)_\lambda$ von $-\infty$ bis ∞ integriert wird, folgt die allgemeine Gel'fand-Levitan-Integralgleichung

$$K(\lambda, r, t) + G(\lambda, r, t) + \int_0^r \mathrm{d}s\, K(\lambda, r, s)G(\lambda, s, t) = 0. \tag{4.17}$$

Hierbei ist zu beachten, daß

$$\begin{aligned} G(\lambda, r, t) &:= \int_{-\infty}^{\infty} (\mathrm{d}\varrho(E)_\lambda - \mathrm{d}\varrho(E)_{\lambda,0})\, \varphi_0(\lambda, k, r)\varphi_0(\lambda, k, r) \\ &= \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}k\, 2k^2 \varphi_0(\lambda, k, r)\varphi_0(\lambda, k, t) \left(\frac{1}{|f(\lambda, k)|^2} - \frac{1}{|f_0(\lambda, k)|^2}\right) \\ &\quad + \sum_{j=0}^{p_\lambda} C_j \varphi_0(\lambda, k_j, r)\varphi_0(\lambda, k_j, t). \end{aligned} \tag{4.18}$$

4.4 Zusammenfassung der Methode

Annahmen: Gegeben sei zum einen die Phasenverschiebung $\delta(\lambda, k)$ für einen festen Drehimpuls $l = \lambda - 1/2 \in \mathbb{N}$ und für alle $E = k^2 \geq 0$. Desweiteren fordern wir, daß die Phasenverschiebung $\delta(\lambda, k)$ eine stetige Funktion von k ist, die den Bedingungen (3.18) und (3.20) genügt:

$$\delta(\lambda, \infty) = 0, \qquad \int_0^\infty \mathrm{d}k\, \frac{|\delta(\lambda, k)|}{k} < \infty.$$

Weiter sei eine endliche Anzahl von gebundenen Zuständen mit den zugehörigen Energien $0 > E_1 > \ldots > E_{p_\lambda}$ gegeben, wobei das Levinson-Theorem 3.37 gelten soll.

Problemstellung: Es soll das Potential $V(r)$ aus den gegebenen Daten bestimmt werden, das die Phasenverschiebung $\delta(\lambda, k)$, $k \geq 0$, und die gebundenen Zustände mit den Energieen E_j, $j = 1, 2, \ldots, p_\lambda$, erzeugt. Außerdem wird für das Potential gefordert: $r|V(r)| \in L_1(b, \infty)$, $b \geq 0$. Die letzte Bedingung kann vor der Rekonstruktion des Potentials aus den gegebenen Daten mit Satz 4.2 überprüft werden.

Lösung:

1. Überprüfung ob $r|V(r)| \in L_1(0, \infty)$ mit Hilfe von Satz 4.2.

2. Konstruktion der normalisierten Jost Funktion $|F(\lambda, k)|$ mit Formel (3.44).

3. Berechnung der Normalisierungskonstanten C_j, $j = 1, \ldots, p_\lambda$ mit Hilfe von Formel (3.31).

4. Konstruktion der Spektralfunktion $\mathrm{d}\varrho(E)_\lambda/\mathrm{d}E$ mit (4.8) für $l = 0$ und mit (3.53) für $l > 0$.

5. Benutzung des Ergebnisses um den Kern $G(\lambda, r, t)$ mit Formel (4.11) bzw. Formel (4.18) zu berechnen.

6. Lösung der Gel'fand-Levitan-Integralgleichung (4.13) für $l = 0$ und (4.17) für $l > 0$.

7. Berechnung des Potentials mit Formel (4.5) für $l = 0$ bzw. mit Formel (4.16) für $l > 0$.

Kapitel 5

Numerische Umsetzung

Dieses Kapitel behandelt die numerische Implementierung der Gel'fand-Levitan-Theorie auf dem Rechner. Dabei werden wir uns auf den Fall $\lambda = 1/2$ beschränken, also auf Projektile ohne Drehimpuls.
Hier werden die dafür verwendeten Methoden und auftretenden Schwierigkeiten aufgezeigt. Abschließend folgt die Vorstellung und Diskussion von berechneten Beispielen.

5.1 Die Rechnungen

5.1.1 Erzeugung der experimentellen Daten

Wie oben dargestellt stehen für die Gel'fand-Levitan-Theorie keine realen experimentellen Daten zur Verfügung. Aus diesem Grund sind künstlich erzeugte Daten zu verwenden. Diese können mit hoher Genauigkeit erzeugt werden. Um daher eine realistischere Simulation durchzuführen, ist es erforderlich, die künstlich erzeugten experimentellen Daten mit einem „Meßfehler" zu versehen. Das heißt, für jeden experimentellen Wert β wird zu einem vorgegebenen $q \in [0, 1]$ eine Zufallszahl $p_\beta \in [-1, 1]$ bestimmt, so daß sich ein modifizierter Meßwert $\tilde{\beta}$ ergibt:

$$\tilde{\beta} := \beta(1 + qp_\beta). \tag{5.1}$$

Die Zufallszahl p_β ist dabei gleichverteilt über $[-1, 1]$.

Die experimentellen Daten setzen sich wie folgt zusammen:

1. Die Phasenverschiebung $\delta(k)$ für endlich viele $k \geq 0$.

2. Die p Nullstellen $k_1 \ldots k_p$ der Jost-Funktion $f(k)$, $k = \mathrm{i}b, b > 0$.

3. Die p Normierungskonstanten $C_1, \ldots C_p$ für die p gebundenen Zustände (s. Gl. (3.31)).

Zu 1.): Die Forderung, die Phasenverschiebung für alle $k \geq 0$ zu bekommen, ist natürlich unerfüllbar. Es ist allerdings bekannt (s. Gl. (3.18)), daß $\lim_{k\to\infty} \delta(k) = 0$. Da die Phasenverschiebung $\delta(k)$ als stetige Funktion „unproblematisch“ durch Gleichung (3.44) in das inverse Problem einfließt, genügt es offenbar, $\delta(k)$ bis zu einem endlichen $k_{\max}$ vorzugeben, so daß $\delta(k) \approx 0$ für alle $k \geq k_{\max}$. Das unendliche Integrationsintervall in Gleichung (3.44) kann somit auch approximativ durch ein endliches ersetzt werden.
Die Berechnung der Phasenverschiebung $\delta(k)$ gestaltet sich leider nicht völlig trivial. Denn die Phasenverschiebung ist definiert als negatives Argument der Jost-Funktion $f(k) = W(\varphi(k,r), f(k,r))$. Es sind also die im allgemeinen komplexen Funktionen $\varphi(k,r)$ und $f(k,r)$ für variables k und beliebiges r zu bestimmen. Der von mir dafür gewählte Weg gestaltet sich so: Die Funktion $\varphi(k,r)$ wird als Lösung der gewöhnlichen Differentialgleichung (2.11) zweiten Grades mit den Anfangswerten $\varphi(k,0) = 0$ und $\varphi'(k,0) = 1$ mittels Differenzenverfahren bis zu einem $r_{\max}$ berechnet, so daß gilt $V(r) \approx 0$ für alle $r \geq r_{\max}$. Dieses Vorgehen ist wegen der angenehmen Anfangswerte und der Asymptotik (Sinus-Schwingung) von $\varphi(k,r)$ für großes r bzw. k sinnvoll. Der dafür verwendete Algorithmus ist in [Engelen-Müllges,Reuter;1987] auf Seite 538 dargestellt. Wegen der Bedingung $V(r_{\max}) \approx 0$ ist wegen Gleichung (2.41) und Gleichung (2.46) $f(k, r_{\max}) \approx \exp(\mathrm{i}kr_{\max})$. Das ist eine sehr gute Approximation für die Jost-Funktion $f(k)$.
Eine weitere Schwierigkeit besteht nun darin, daß $f(k)$ die Phasenverschiebung $\delta(k)$ nur bis auf modulo 2π bestimmt. Wenn wir also $\delta(k)$ als stetige Funktion erhalten wollen, die das Levinson-Theorem erfüllt, muß die Rechnung für ein genügend großes $k = k_{\max}$ beginnen, so daß $\delta(k) \approx 0$ ist. Nun dürfen im Inter-

vall $[0, k_{\text{max}}]$ auch nicht „zu wenig“ k berechnet werden, damit jeweils $m \in \mathbb{Z}$ in $\delta(k) = -arg(f(k)) + 2m\pi$, relativ eindeutig bestimmt werden kann.

Zu 2.): Weiter sind noch alle rein imaginären Nullstellen der Jost-Funktion $f(k)$ zu bestimmen. Da nun die Funktion $\varphi(k, r)$ für zunehmendes r ein exponentielles Wachstum aufweist, erweist es sich als numerisch stabiler, den obigen Weg zur Berechnung der Jost-Funktion $f(k)$ zu modifizieren. Deshalb wurde hier der umgekehrte Weg gewählt und die Lösung der Differentialgleichung (2.11) $f(k, r = 0)$ mit Anfangswerten bei r_{max} berechnet.
An dieser Stelle läßt sich nun auch mit Hilfe des Levinson-Theorems überprüfen, ob die Phasenverschiebung $\delta(k)$ korrekt bestimmt worden ist. Es müssen nämlich die Anzahl der rein imaginären Nullstellen der Jost-Funktion mit dem Wert $\delta(0)/\pi$ übereinstimmen. Falls diese beiden Werte nicht gleich sind, muß die Anzahl der Datenpunkte $(k, \delta(k))$ im Intervall $[0, k_{\text{max}}]$ erhöht werden.

Zu 3.): Für die Bestimmung der Normierungskonstanten ist im wesentlichen nicht mehr viel Neues zu tun. Sie werden einfach mit Hilfe von Formel (3.31) bestimmt.

5.1.2 Rekonstruktion des Betrags der Jost-Funktion

Für die Rekonstruktion des Betrags der Jost-Funktion $f(k)$ wird auf Formel (3.44) zurückgegriffen.
Die Interpolation der Phasenverschiebung $\delta(k)$ geschieht hier einfach linear zwischen zwei bekannten Punkten. Diese einfache und schnelle Art der Interpolation ist hier gerechtfertigt, da die Phasenverschiebung an relativ vielen Punkten vorgegeben wird. Für die Berechnung des Hauptwertes in Formel (3.44) ist auf den Algorithmus „D01AQF“ aus der NAG-Bibliothek [NAG] zurückgegriffen worden.
Die Funktion $|f(k)|$ wird an endlich vielen Stellen berechnet, wobei der größte Wert $k = k_{\text{max}}$ wegen der Asymptotik (3.17) so zu wählen ist, daß $|f(k)| \approx 1$ für alle $k \geq k_{\text{max}}$ ist.

5.1.3 Berechnung von $G(r, t)$

Nachdem die Funktion $|f(k)|$ an einigen Punkten im Intervall $[0, k_{\max}]$ bestimmt worden ist, kann ihre Interpolation (Spline-Interpolation) nun dazu benutzt werden, eine Interpolationstabelle für die Funktion $G(r, t)$ zu berechnen. Dabei ist $0 \leq t \leq r$. Hierfür ist Formel (4.11) maßgebend. Um für die Erstellung der Interpolationstabelle nicht wirklich n^2 Auswertungen vornehmen zu müssen, kann die Formel $2\sin(kr)\sin(kt) = \cos(k(r-t)) - \cos(k(r+t))$ benutzt werden. Der Integrand in Formel (4.11) kann nun so modifiziert werden, daß $G(r, t) = \tilde{G}(r-t, r+t)$ geschrieben werden kann. Die Anzahl der Auswertungen für die Interpolationstabelle hat sich somit auf $2n$ reduziert.
Der für die Berechnung des Integrals (4.11) verwendete Algorithmus ist „D01AKF“ aus der NAG-Bibliothek [NAG], der besonders für die Berechnung von periodischen Integranden geeignet ist. Im übrigen kann auch hier das unendliche Integrationsintervall aus Formel (4.11) approximativ durch ein endliches ersetzt werden, da der Integrand für $k \geq k_{\max}$ ungefähr Null ist.

5.1.4 Lösung der Gel'fand-Levitan-Gleichung

Die Gel'fand-Levitan-Gleichung ist eine Fredholmsche Integralgleichung. Die Funktion $G(r, t)$ wird durch Spline-Interpolation zur Verfügung gestellt. Um die Lösung $K(r, r)$ zu berechnen ist hier wieder auf einen Algorithmus der NAG-Bibliothek [NAG] zurückgegriffen worden, nämlich auf „D05ABF“.

5.1.5 Berechnung des Potentials $V(r)$

Das Potential wird durch die Gleichung $V(r) = 2K''(r, r)$ bestimmt. Die Funktion $K(r, r)$ wird dafür an endlich vielen Stellen bereitgestellt und zwischen diesen durch einen kubischen Spline interpoliert. Hier hat die Spline Interpolation den großen Vorteil, daß sie auch gleich die Ableitung der zu interpolierenden Funktion liefert. Eine Approximation der Ableitung durch den Differenzenquotienten wäre hier sicherlich ungeeignet, da Rechenfehler die Funktion $K(r, r)$ kaum noch stetig erscheinen lassen würden.

5.2 Das Programm

Um bequem die für die Rechnungen notwendigen Parameter (Genauigkeit, Anzahl der zu berechnenden Datenpunkte, Potential, ...) einstellen zu können, wurden die numerischen Algorithmen in eine Oberfläche eingebettet.
Dies macht die berechneten Resultate nachvollziehbarer und leichter reproduzierbar.
Nichtsdestotrotz existiert für die numerische Berechnung auch noch ein Programm, das keine graphische Ein- und Ausgabe kennt und seine Parameter durch die Eingabezeile erhält.

Die numerischen Algorithmen wurden in der Programmiersprache C geschrieben. Dort eingebunden sind die NAG-Algorithmen, die in FORTRAN vorliegen.
Die C-Quellcodedateien wurden auf dem Rechnersystem des Instituts für Mathematik mit dem Befehl

```
cc -fast -xO5 -I/u/vogeler/sunos5/include -I/share/numeric/
sparc-sun-solaris2/include -I/usr/urz/sparc-sun-solaris2/
include -c Datei.c -o Datei.o
```

compiliert und schließlich durch den Befehl

```
cc -L/u/vogeler/sunos5/lib -L/share/numeric/sparc-sun-solaris2/
lib -L/usr/urz/sparc-sun-solaris2/lib -G DirekteProblem.o
 InvProAbsJost.o InvProPot.o GelfandLevitan.o NumerikC.o
 -lnag -lF77 -lV77 -lM77 -lsunmath -lm -ldrecipes
 -o libNumerikC.so
```

zu der dynamischen Bibliothek „libNumerikC.so“ gelinkt.

Die Oberfläche, die das gesamte Programm abrundet, wurde von mir in der Programmiersprache Java (jdk1.1.5) geschrieben. Der Java-Code ließt zu Beginn die dynamische Bibliothek „libNumerikC.so“ ein und führt je nach Bedarf die notwendigen numerischen Algorithmen aus.
Die Implementation der Schnittstelle Java—C ist zum Beispiel in [Lemay,Perkins;1996] erläutert.

Um die Daten, die durch das Programm erzeugt worden sind, auch noch mit anderer Software bearbeiten zu können, werden diese als Text-Dateien abgelegt. So heißt die Datei, die die Daten der Phasenverschiebung $\delta(k)$ enthält „[Projektname]delta.dat". Desweiteren existieren die Dateien „[Projektname]AbsJost.dat", „[Projektname]TabG.dat" und „[Projektname]Potential.dat", dabei beinhaltet die erste die Daten für den Betrag der Jost-Funktion $f(k)$, die zweite die Tabelle um die Funktion $G(r,t)$ zu rekonstruieren und die dritte die Daten des rekonstruierten Potentials. Der Präfix „[Projektname]" deutet hierbei an, daß verschiedene Berechnungen (Projekte) unter einem beliebigen Dateinamen abgespeichert werden können. Übrigens werden alle notwendigen Optionen und Programmeinstellungen in der Datei „[Projektname].glq" abgelegt.

Hier folgt nun eine kurze Beschreibung der Oberfläche. Für genauere Angaben stellt das Programm im Menüpunkt „Hilfe" Informationen bereit. Die erste Seite der Oberfläche gestaltet sich wie in Abbildung 5.1 gezeigt. Der Schalter „Numerik" eröffnet die Möglichkeit, jeweils die für die folgende Rechnung relevanten numerischen Parameter einzustellen. Auf der ersten Seite (Abbildung 5.1) können beispielsweise die Parameter für die Erzeugung der experimentellen Daten verändert werden.

Die zweite Seite der Oberfläche, die durch Betätigen des Schalters „Weiter" aktiviert wird, stellt die experimentellen Daten dar. Sie gestaltet sich wie in Abbildung 5.2 zu sehen. Zu ihr ist lediglich noch zu sagen, daß durch den Schalter „Messung" künstliche Meßfehler erzeugt werden können. Dabei ist es möglich sowohl einen Fehler für die Nullstellen und Normierungskonstanten, als auch einen Fehler für die Phasenverschiebung $\delta(k)$ anzugeben. Unter Fehler ist hier ein relativer Fehler zu verstehen, um den ein Meßwert maximal nach oben oder unten abweichen darf (siehe (5.1)). Es gibt zwei Ideen, die dieses Vorgehen motivieren. Die erste ist, daß die durch ein reales physikalisches Experiment erzeugten Daten niemals exakt sind. Die zweite Idee beschäftigt sich mit der Ergründung, ob der hier verwendete Algorithmus numerisch stabil läuft, das heißt, ob kleine Änderungen der experimentellen Daten kleine Änderungen beim rekonstruierten Potential verursachen.

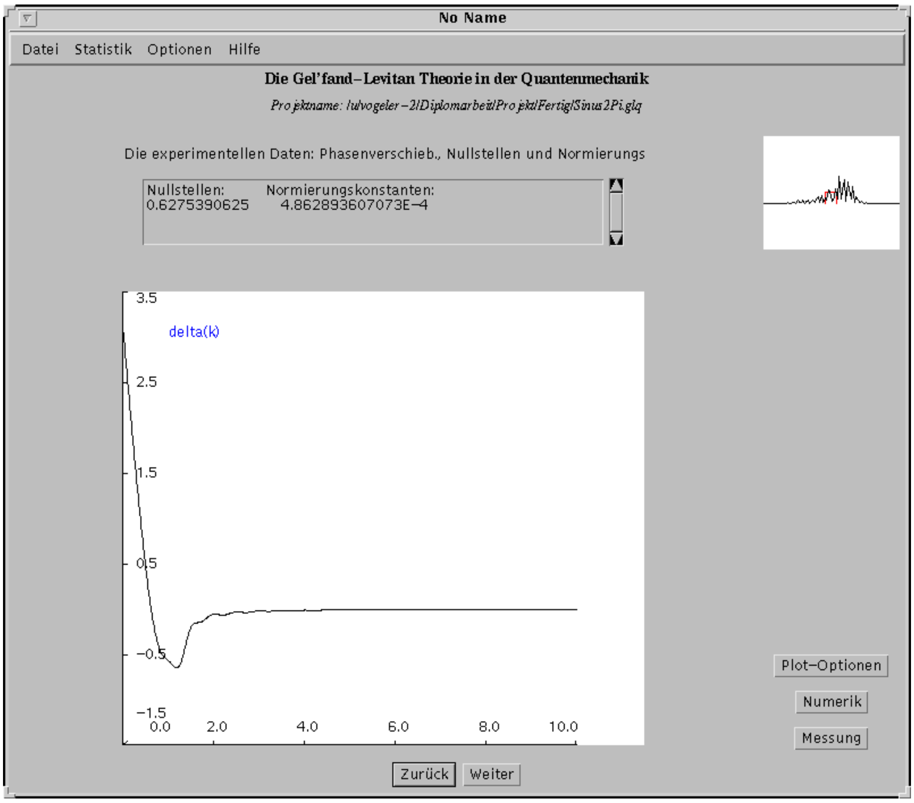

Abbildung 5.1: Erste Seite der Oberfläche

Die nächste Rechnung führt zu dem Betrag der Jost-Funktion und ist exemplarisch in der Abbildung 5.3 zu sehen.

Schließlich hält das Programm noch eine Seite (Abbildung 5.4) bereit, in der das vorgegebene Potential dem rekonstruiertem gegenübergestellt wird.

In den Abbildungen 5.1 bis 5.4 war exemplarisch schon ein Beispiel zu sehen. Das dabei vorgegebene Potential war

$$V(r) = \begin{cases} \sin r & : \quad 0 \leq r \leq 2\pi, \\ 0 & : \quad r > 2\pi. \end{cases}$$

Die Einstellungen der Parameter, die der obigen Rechnung zugrunde liegen, sind in Tabelle 5.1 aufgelistet.

Die Tabelle 5.1 wird nun beispielhaft für alle folgenden Tabellen dieser Art

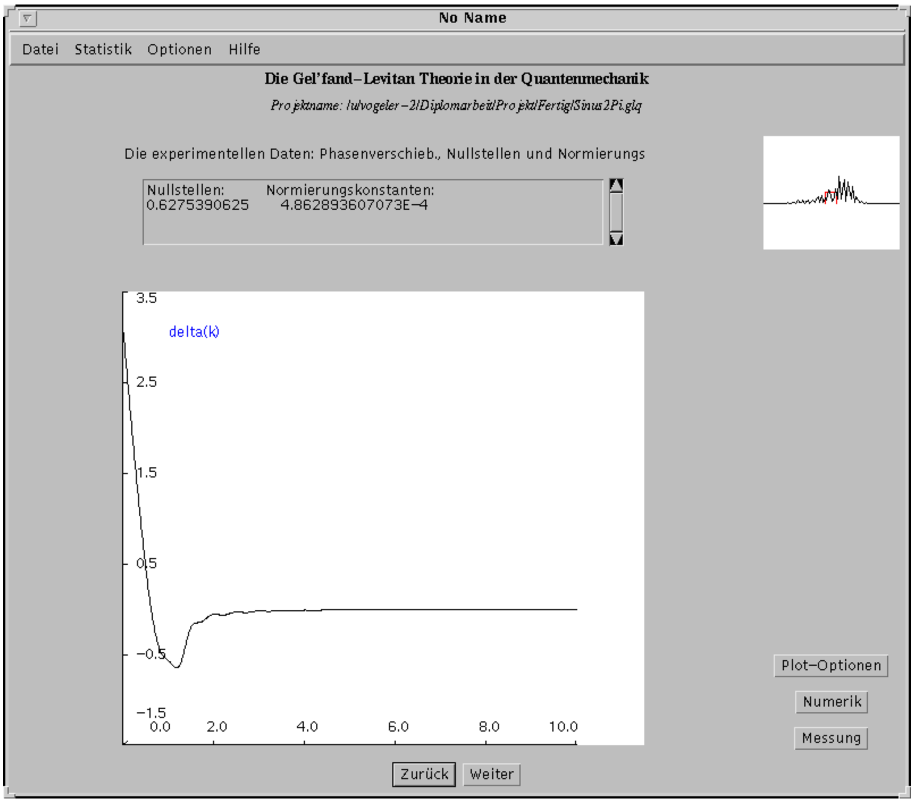

Abbildung 5.2: Zweite Seite der Oberfläche

erläutert.

Die drei numerischen Parameter des ersten Abschnitts „Erzeugung der exp. Daten“ legen die Rahmenbedingungen für die Erzeugung der Phasenverschiebung $\delta(k)$, der Nullstellen $k_1, \ldots, k_p$ und der Normierungskonstanten $C_1, \ldots, C_p$ fest. Der erste dieser Parameter definiert die angestrebte Genauigkeit des Differenzenverfahrens für die Lösung von $\varphi(k, r)$ und $f(k, r)$. Im ersten Fall gibt dieser Wert den absoluten Fehler wieder, im zweiten den relativen. Die anderen beiden Parameter erklären sich sicherlich von selbst.

Der erste Parameter des nächstens Abschnitts „Erzeugung des Betrags der Jost Funktion $f(k)$“ gibt den angestrebten absoluten Fehler für die Erzeugung des Betrags der Jost-Funktion (Principal Value) wieder. Die Bedeutung der anderen beiden auftretenden Parameter ist evident.

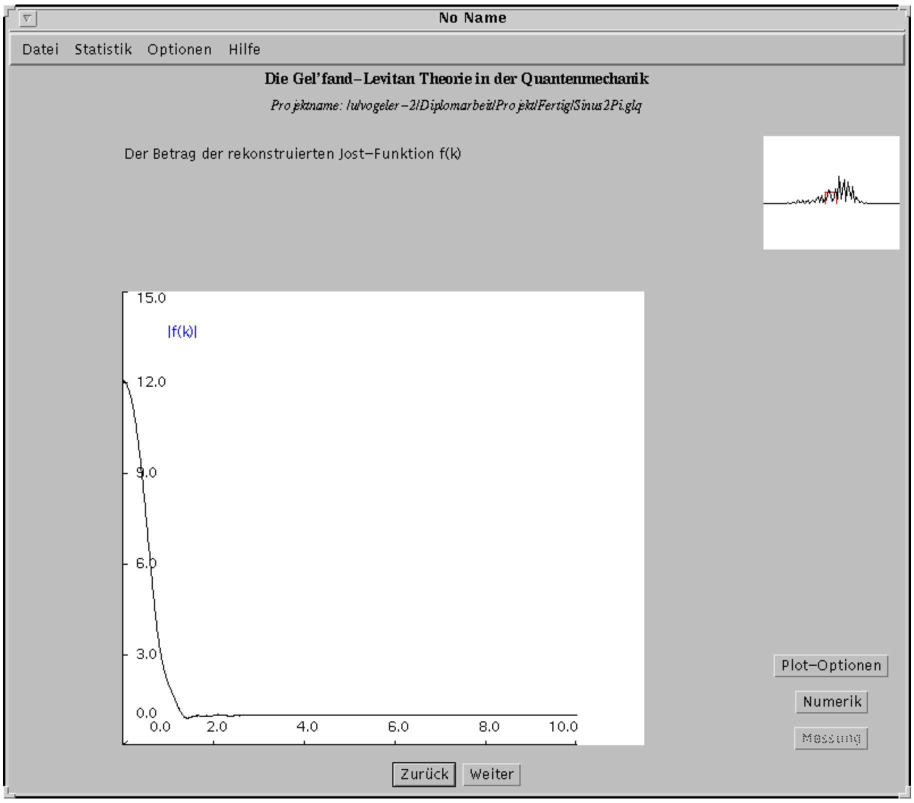

Abbildung 5.3: Dritte Seite der Oberfläche

Zum nächsten Abschnitt „Erzeugung des Kerns $G(r,t)$“ ist bloß zu sagen, daß sein erster Parameter den absoluten Fehler für die Berechnung des Integrals, das dem Kern $G(r,t)$ zugrunde liegt, wiedergibt.
Der Provzner-Levitan-Kern $K(r,r)$ berechnet sich als Lösung einer Fredholmschen Integralgleichung. Ein Maß für die Genauigkeit dieser Rechnung gibt der erste Parameter des vorletzten Abschnitts „Erzeugung des Provzner-Levitan-Kerns $K(r,r)$“ an. Er ist ein ganzer Wert, welcher die Anzahl der Terme in der Tschebyschev-Reihe angibt, die die Lösung $K(r,r)$ approximiert. Dieser Wert kann daher nicht dazu verwendet werden, eine explizite, absolute oder relative Fehlerschranke für die berechnete Lösung $K(r,r)$ vorzugeben. Allerdings kann durch ihn sehrwohl ein guter Indikator für die Güte der Genauigkeit der Lösung erhalten werden. Wenn nämlich die Anzahl der Terme in der Tschebyschev-

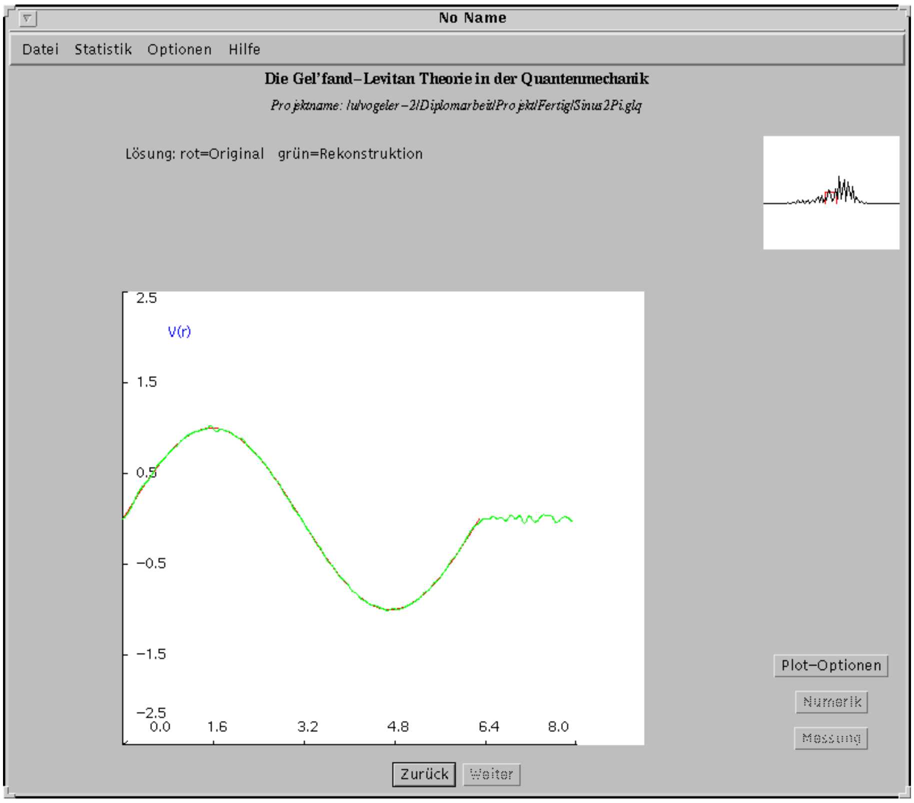

Abbildung 5.4: Vierte Seite der Oberfläche

Reihe variiert wird und sich die Lösung kaum verändert, kann erwartet werden, eine gute Approximation der Lösung erhalten zu haben.
Die beiden Parameter des letzten Abschnitts „Rekonstruktion des Potentials $V(r)$“ der Tabelle bedürfen sicherlich keiner weiteren Erklärung.

Der nächste Abschnitt stellt einige berechnete Beispiele vor. Wie oben schon erwähnt, ist die Stabilität der Gel'fand-Levitan-Theorie unter zufälligen Veränderungen in den experimentellen Daten von besonderem Interesse. Deshalb wird die Rekonstruktion eines vorgegebenen Potentials $V(r)$ mit und ohne Manipulation der erzeugten experimentellen Daten durchgeführt. Unter Manipulation ist hier die Überführung der experimentellen Daten β durch Formel (5.1) nach $\tilde{\beta}$ zu verstehen. Dabei ist im folgenden $q = 0.0, 0.1, 0.5$. Somit wird das Potential $V(r)$ ohne einen expliziten Fehler, mit einem Fehler von bis

Parameter	
Erzeugung der exp. Daten	
-Genauigkeit der Rechnung:	1.0e-4
-Anzahl der Datenpunkte $(k, \delta(k))$*:*	1000
-Berechnung $\delta(k)$ *von 0 bis:*	10.0
Erzeugung des Betrags der Jost-Funktion $f(k)$	
-Genauigkeit der Rechnung:	1.0e-3
-Anzahl der Datenpunkte $(k, f(k))$*:*	1000
-Berechnung $f(k)$ *von 0 bis:*	10.0
Erzeugung des Kerns $G(r,t)$	
-Genauigkeit der Rechnung:	1.0e-2
-Anzahl der Datenpunkte:	1000
Erzeugung des Provzner-Levitan-Kerns $K(r,r)$	
-Genauigkeit der Rechnung:	50
-Anzahl der Datenpunkte:	100
Rekonstruktion des Potentials $V(r)$	
-Rekonstruktion von r=0 bis:	8.0
-Anzahl der Datenpunkte:	1000

Tabelle 5.1:

zu 10% und mit einem Fehler von bis zu 50% in den experimentellen Daten rekonstruiert.

Die numerischen Rechnungen wurden ausschließlich auf SUN-ultra1-Rechnern im Institut für Mathematik ausgeführt. Da zum einen nicht davon ausgegangen werden kann, daß die volle Rechenkapazität eines Rechners immer zur Verfügung steht und zum anderen die Prioritäten für die Prozesse auf den Rechner variieren können, sind die gemessenen Rechenzeiten untereinander nur bedingt vergleichbar.

5.3 Berechnete Beispiele

5.3.1 Die einfache Sinusschwingung

Als erstes wird hier noch einmal das Beispiel aus dem letzten Abschnitt aufgegriffen:

$$V(r) = \begin{cases} \sin r & : \quad 0 \le r \le 2\pi, \\ 0 & : \quad r > 2\pi. \end{cases}$$

Die Abbildung 5.5 zeigt in der linken Spalte von oben nach unten die Phasenverschiebung $\delta(k)$ ohne zusätzlichen Meßfehler, mit einem relativen Meßfehler von bis zu 10% und mit einem relativen Meßfehler von bis zu 50%. Die Abbildungen in der rechten Spalte zeigen nebenstehend jeweils die zugehörige Berechnung des Betrags der Jost-Funktion $f(k)$.
Zusätzlich lassen sich noch die in der Tabelle 5.2 aufgezeigte Nullstelle der Jost-Funktion $f(k)$ für rein imaginäres k und die dazugehörige Normierungskonstante bestimmen.

Meßfehler	Nullstellen	Normierungskonstanten
bis 0%	i0.6275	4.8628E-4
bis 10%	i0.5779	4.7437E-4
bis 50%	i0.3796	4.2672E-4

Tabelle 5.2:

Die Rekonstruktion des Potentials für die drei verschiedenen Fälle zeigt Abbildung 5.6. Sie veranschaulicht die intuitive Erwartung, daß mit zunehmender Meßungenauigkeit die Rekonstruktion des Potentials schlechter wird. Allerdings ist feststellbar, daß die Qualität der Rekonstruktion für die Sinusschwingung auch im dritten Fall, das heißt bei einem relativen Fehler von bis zu 50%, immer noch gut ist. Die totalen Rechenzeiten für die drei Fälle liegen bei 60 Sekunden, 220 Sekunden und 461 Sekunden. Dabei entfallen alleine auf die Berechnung des Betrags der Jost-Funktion $f(k)$ jeweils 13 Sekunden, 143 Sekunden und 368 Sekunden, also im Falle einer gestörten Phasenverschiebung

$\delta(k)$ über 50% der Rechenzeit.

Es darf desweiteren nicht unerwähnt bleiben, daß das Levinson-Theorem numerisch bestätigt werden konnte. Aus Abbildung 5.5 ist nämlich zu ersehen, daß sich für den ungestörten Fall die Phasenverschiebung $\delta(k)$ bei Null in der Nähe der Zahl π lokalisiert. Tatsächlich ergibt sich numerisch $\delta(0.01) \approx 3.084$. Aufgrund des Levinson-Theorems kann nun erwartet werden, daß die Jost-Funktion $f(k)$ genau eine rein imaginäre Nullstelle hat (siehe Tabelle 5.2).
Eine weitere Folgerung der Theorie war, daß $\lim_{k\to\infty} \delta(k) = 0$ gilt. Tatsächlich ergibt sich numerisch ein kontinuierliches Annähern von $|\delta(k)|$ zur Null ab $k \approx 3.5$. Beispielsweise ist $\delta(10.0) \approx -0.0003$.
Für den Betrag der Jost-Funktion läßt sich ähnliches feststellen. Die Theorie fordert hier $\lim_{k\to\infty} f(k) = 1$. Die Grafiken in Abbildung 5.5 verdeutlichen, daß diese Asymptotik hier schnell erreicht wird. Es gilt zum Beispiel $|f(10.0)| \approx 0.9996$.

Die numerischen Programmparameter sind in Tabelle 5.3 festgehalten.

Parameter	Fehler 0%	Fehler 10%	Fehler 50%
Erzeugung der exp. Daten			
-Genauigkeit der Rechnung:	1.0E-4	1.0E-4	1.0E-4
-Anzahl der Datenpunkte $(k, \delta(k))$*:*	1000	1000	1000
-Berechnung $\delta(k)$ *von 0 bis:*	10.0	10.0	10.0
Erzeugung des Betrags der Jost-Funktion $f(k)$			
-Genauigkeit der Rechnung:	1.0e-3	0.01	0.01
-Anzahl der Datenpunkte $(k, f(k))$*:*	1000	1000	1000
-Berechnung $f(k)$ *von 0 bis:*	10.0	10.0	10.0
Erzeugung des Kerns $G(r,t)$			
-Genauigkeit der Rechnung:	0.01	0.01	0.01
-Anzahl der Datenpunkte:	1000	1000	1000
Erzeugung des Provzner-Levitan-Kerns $K(r,r)$			
-Genauigkeit der Rechnung:	50	50	50
-Anzahl der Datenpunkte:	100	100	100
Rekonstruktion des Potentials $V(r)$			
-Rekonstruktion von r=0 bis:	8.0	8.0	8.0
-Anzahl der Datenpunkte:	1000	1000	1000

Tabelle 5.3:

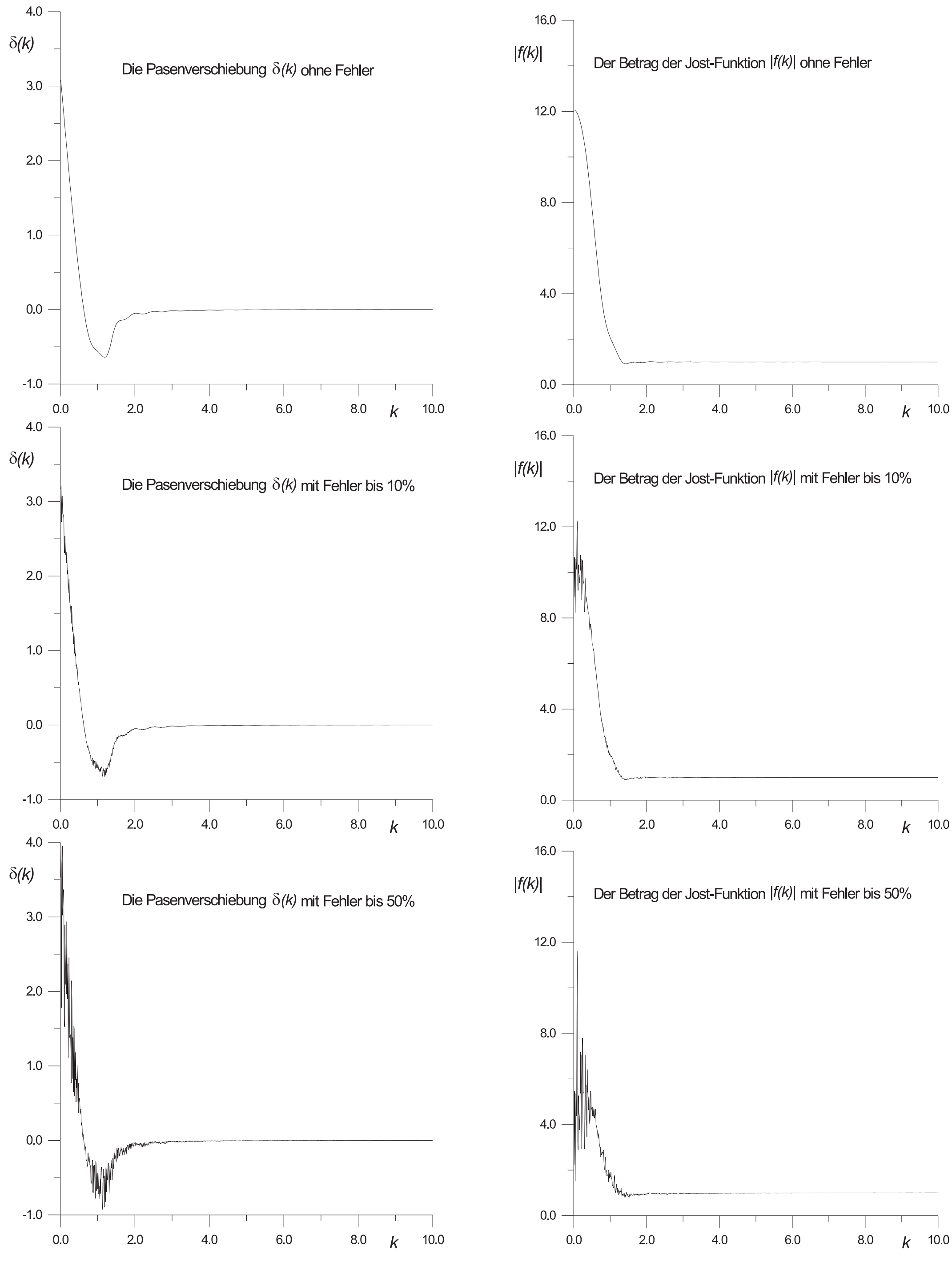

Abbildung 5.5: Den Grafiken liegt das Potential $V(r) = \sin(r), r = 0 \ldots 2\pi$ zugrunde. In der linken Spalte befindet sich jeweils die Phasenverschiebung $\delta(k)$ für die angegebenen relativen Meßfehler und in der rechten Spalte jeweils der Betrag der Jost-Funktion $f(k)$.

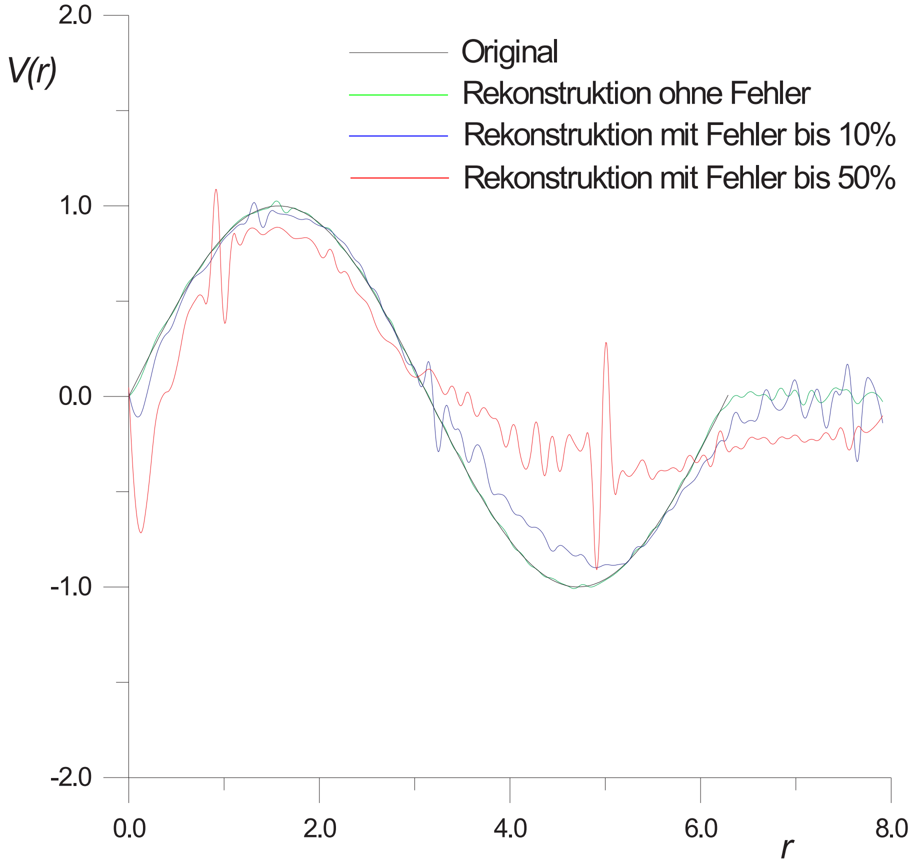

Abbildung 5.6: Rekonstruktion des Potentials $V(r) = \sin(r), r = 0 \ldots 2\pi$.

5.3.2 Die Zick-Zack-Kurve

Hier wird die Rekonstruktion des Potentials (siehe auch Abbildung 5.7)

$$V(r) = \begin{cases} r & : \quad 0 \leq r \leq 1 \\ -r+2 & : \quad 1 \leq r \leq 3 \\ r-4 & : \quad 3 \leq r \leq 4 \\ 0 & : \quad r > 4 \end{cases} \tag{5.2}$$

vorgestellt. Dieses Potential ähnelt der Sinusschwingung aus dem letzten Abschnitt. Interessant ist hier neben der Qualität der Rekonstruktion als solche, ob die verschiedenen Charakteristiken der beiden Potentiale auch in der Rekonstruktion sichtbar werden, also ob sich die Rekonstruktion von „Spitzen“ erkennbar von der Rekonstruktion glatter „Berge“ und „Täler “ unterscheiden läßt.

Dieses Potential erzeugt genauso wie die Sinusschwingung genau einen gebundenen Zustand des Systems. Die Nullstelle der Jost-Funktion $f(k)$ und die dazugehörige Normierungskonstante für die drei verschiedenen Messungen sind in Tabelle 5.4 festgehalten. Die Phasenverschiebung $\delta(k)$ und die Rekonstruk-

Meßfehler	Nullstellen	Normierungskonstanten
bis 0%	i0.3224	0.01350
bis 10%	i0.2969	0.01317
bis 50%	i0.1950	0.01184

Tabelle 5.4:

tion des Betrags der Jost-Funktion $f(k)$ sind in Abbildung 5.8 für die drei Messungen gegenüber gestellt.

Die Rekonstruktion für die drei verschiedenen Messungen illustriert Abbildung 5.9. Die Rechenzeiten bei einem Meßfehler von 0%, 10% und 50% betragen 70 Sekunden, 182 Sekunden und 375 Sekunden. Dabei entfallen alleine auf die Berechnung des Betrags der Jost-Funktion $f(k)$ 12 Sekunden, 115 Sekunden und 297 Sekunden. Der Anteil der Rechenzeit, den diese Berechnung beansprucht,

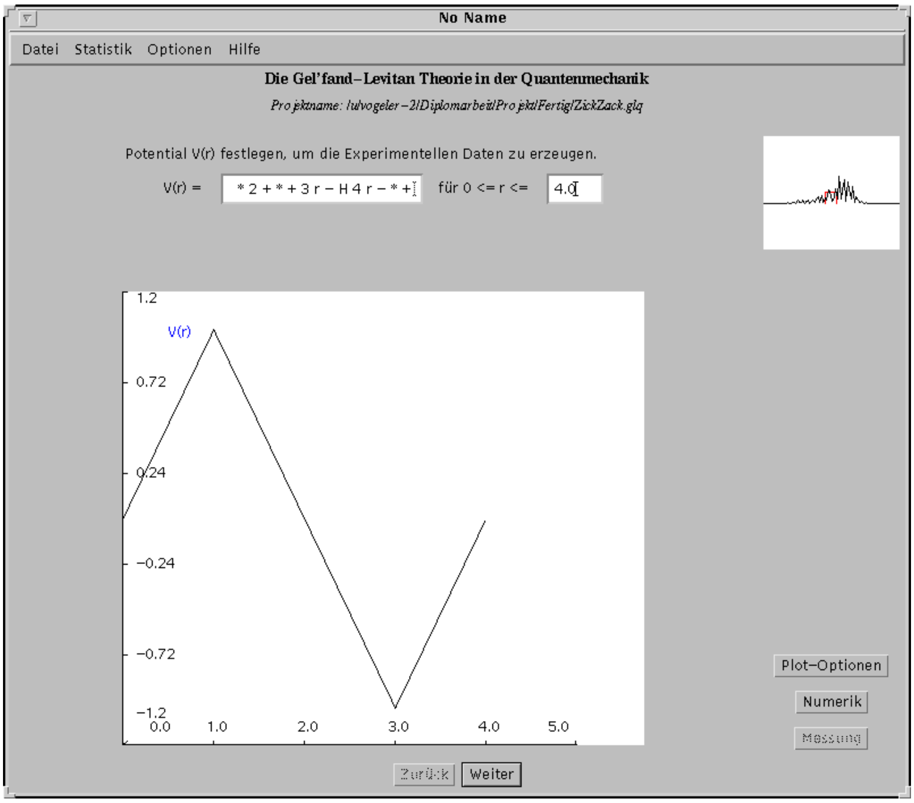

Abbildung 5.7: Das Potential aus Gleichung (5.2).

vergrößert sich somit immer mehr mit zunehmender Meßungenauigkeit.
Abbildung 5.9 macht deutlich, daß der numerische Algorithmus des Programms in der Lage war, die „Zick-Zack-Kurve" in allen drei Fällen noch besser zu rekonstruieren als die einfache Sinus-Schwingung. Desweiteren wird die Charakteristik der „Spitzen" auch noch bei einem Fehler von bis zu 50% in den experimentellen Daten gut wiedergegeben. Die Rekonstruktion der Sinus-Schwingung und die der „Zick-Zack-Kurve" lassen sich somit gut voneinander unterscheiden.
Als weitere Resultate können hier wieder die numerische Bestätigung des Levinson-Theorems und das asymptotische Verhalten der Phasenverschiebung $\delta(k)$ und der Jost-Funktion $f(k)$ festgehalten werden. Es ist nämlich $\delta(0.01) \approx 3.086$, $\delta(10.0) \approx 0.000052$ und $|f(10.0)| \approx 0.9998$.

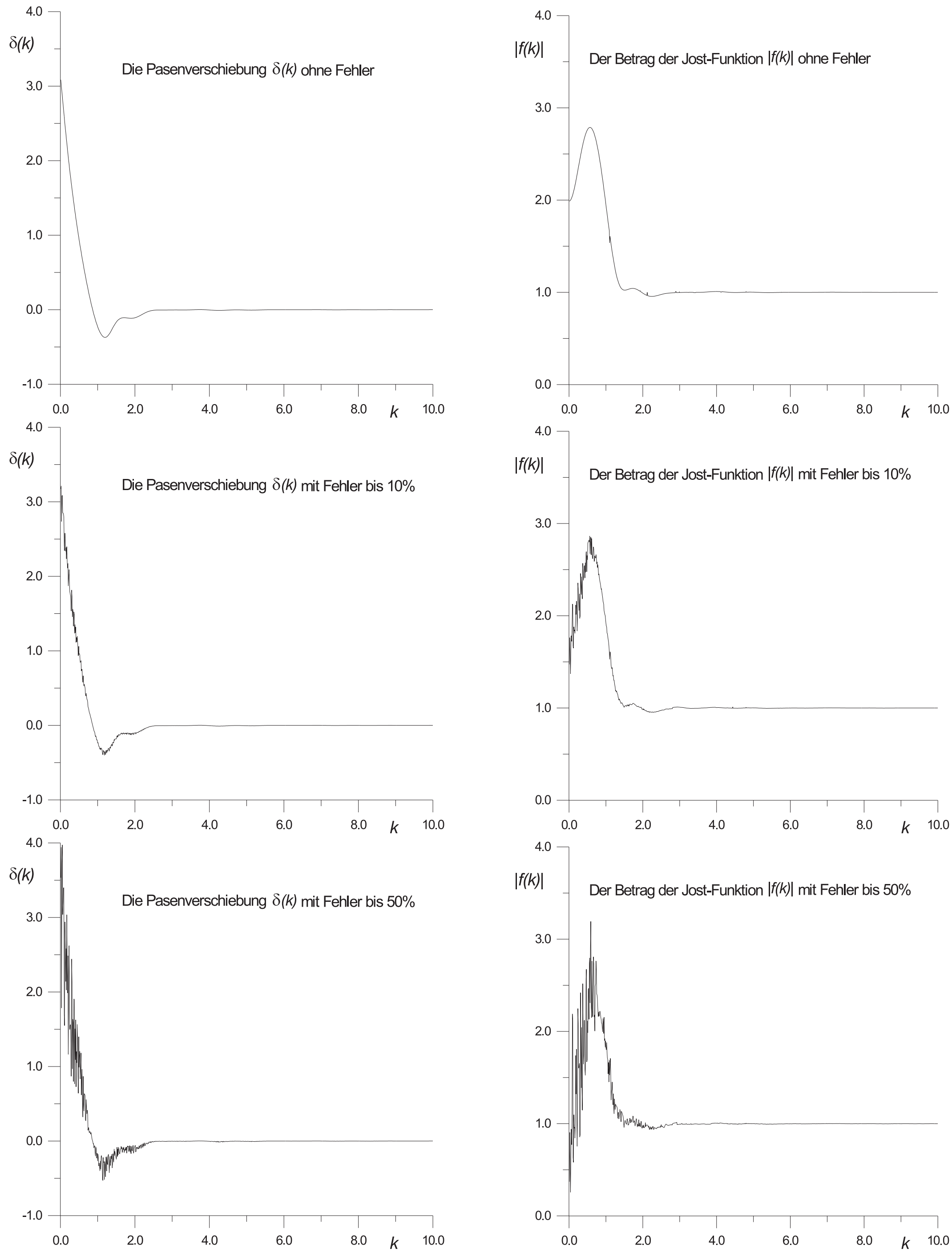

Abbildung 5.8: Den Grafiken liegt das Potential aus Gleichung (5.2) zugrunde. In der linken Spalte befindet sich jeweils die Phasenverschiebung $\delta(k)$ für die angegebenen relativen Meßfehler und in der rechten Spalte jeweils der Betrag der Jost-Funktion $f(k)$.

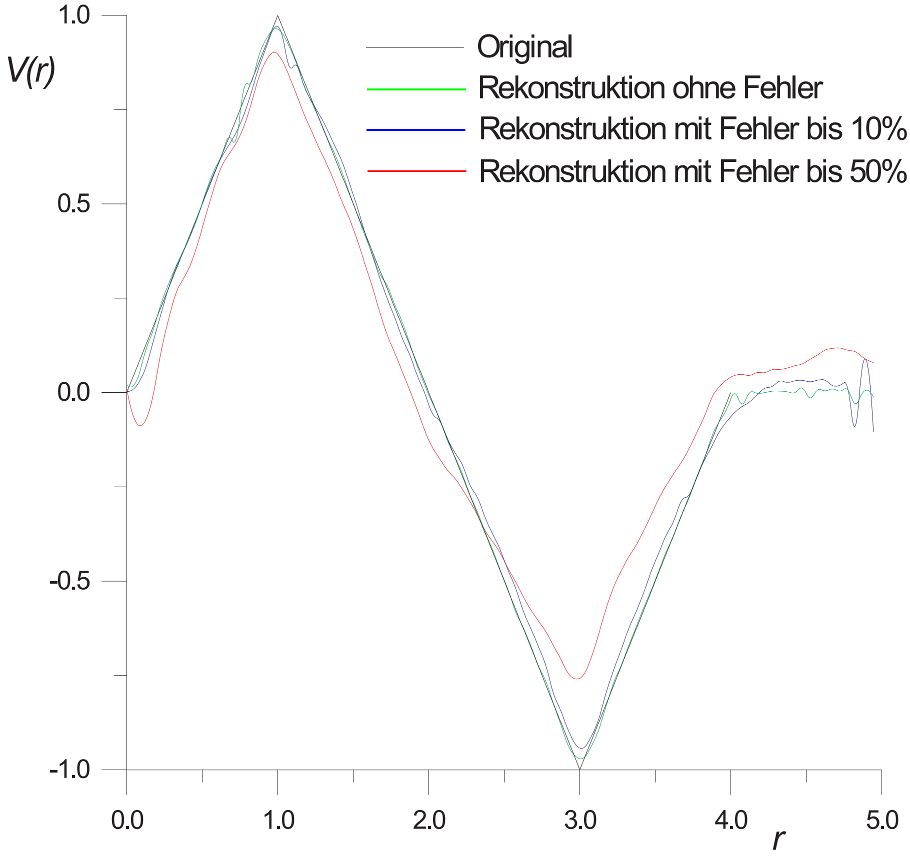

Abbildung 5.9: Rekonstruktion des Potentials aus Gleichung (5.2).

5.3.3 Die Sinusschwingung mit größer werdender Frequenz

Hier werden die Resultate vorgestellt, die die Rekonstruktion des Potentials

$$V(r) = \begin{cases} \sin r^2 & : \quad 0 \le r \le 10 \\ 0 & : \quad r > 10 \end{cases} \tag{5.3}$$

betreffen. Interessant ist hier, ob der Algorithmus in der Lage ist, auch die Abschnitte des Potentials mit den großen Frequenzen nahe bei 10 zu rekonstruieren.

Das Potential läßt keinen gebundenen Zustand zu. Die Phasenverschiebung $\delta(k)$ und der Betrag der Jost-Funktion $f(k)$ sind für die drei verschiedenen Messungen in Abbildung 5.10 gegenüber gestellt. Hier kann schon festgehalten werden, daß wieder das Levinson-Theorem numerisch bestätigt werden konnte. Es ist nämlich $\delta(0.003) \approx 0.033$. Im übrigen hätten wir schon vorher wissen können, daß das Potential (5.3) keinen gebundenen Zustand zuläßt. Es ist nämlich $\int_0^{10} \mathrm{d}r\, r|\sin r^2| < 0.94 < 1$. (Siehe dazu auch Gleichung (3.36).)

Auch das asymptotische Verhalten der Phasenverschiebung und der Jost-Funktion können numerisch bestätigt werden, es ist $\delta(60.0) \approx -0.004$ und $|f(50.0)| \approx 1.0003$.

Damit die Darstellung der Rekonstruktionen für die drei Messungen nicht zu unübersichtlich wird, wurde in den Abbildungen 5.11, 5.12 und 5.13 jeweils die Rekonstruktion des Potentials aus einer Messung dem Original aus Gleichung (5.3) gegenübergestellt. Abbildung 5.11 zeigt deutlich, daß die Rekonstruktion insgesamt gut gelungen ist. Im Bereich von 0 bis 1.5 gibt es kleine Unsicherheiten, während die Rekonstruktion ansonsten sogar für die großen Frequenzen der Schwingung bis 10 vortrefflich ausfällt. Bei der Rekonstruktion des Potentials auf der Grundlage eines relativen Fehlers in den Meßdaten von bis zu 10% fällt auf, daß fast alle Nulldurchgänge auch die für große Frequenzen gut getroffen worden sind. Im Bereich von 0 bis 1.5 wird die Rekonstruktion nun deutlich schlechter als für die Rekonstruktion der Meßdaten ohne zusätzlichen Fehler. Auch der Bereich nach $r = 10$, für den das Original verschwindet, weist nun deutlich größere Schwankungen auf, so daß ein Betrachter, der nur die Rekonstruktion sieht, nicht unbedingt erkennt, daß das Original für $r > 10$ verschwindet. Die Rekonstruktion des Potentials bei einem relativen Fehler der Meßdaten von bis zu 50% fällt qualitativ fast genauso aus, wie die Rekonstruktion des Potentials auf der Grundlage eines relativen Fehlers der Meßdaten von bis zu 10%. Es ist lediglich anzumerken, daß die Rekonstruktion bei $r \approx 9$ noch etwas schwächer geraten ist.

Festzuhalten bleiben noch die Rechenzeiten, die gerade für die Fälle mit positivem Meßfehler ziemlich groß werden. Für die Rekonstruktion des Potentials entfallen für den Fall ohne relativen Meßfehler 32,4 Minuten, für den Fall eines relativen Meßfehlers von bis zu 10% 4700 Minuten und für den dritten Fall eines relativen Meßfehlers von bis zu 50% 12250 Minuten (8,5 Tage). Dabei entfallen alleine auf die Berechnung des Betrags der Jost-Funktion jeweils 17,9 Minuten, 4676 Minuten und 12222 Minuten. Diese Werte sind nur dann bewertbar, wenn die Parameter für die numerischen Rechnungen bekannt sind. Diese sind in Tabelle 5.5 niedergeschrieben.

Parameter	Fehler 0%	Fehler 10%	Fehler 50%
Erzeugung der exp. Daten			
-Genauigkeit der Rechnung:	1.0E-4	1.0E-4	1.0E-4
-Anzahl der Datenpunkte $(k, \delta(k))$*:*	20000	20000	20000
-Berechnung $\delta(k)$ *von 0 bis:*	60.0	60.0	60.0
Erzeugung des Betrags der Jost-Funktion $f(k)$			
-Genauigkeit der Rechnung:	0.001	0.001	0.001
-Anzahl der Datenpunkte $(k, f(k))$*:*	5000	5000	5000
-Berechnung $f(k)$ *von 0 bis:*	50.0	50.0	50.0
Erzeugung des Kerns $G(r,t)$			
-Genauigkeit der Rechnung:	0.001	0.001	0.001
-Anzahl der Datenpunkte:	2000	2000	2000
Erzeugung des Provzner-Levitan-Kerns $K(r,r)$			
-Genauigkeit der Rechnung:	50	50	50
-Anzahl der Datenpunkte:	500	500	500
Rekonstruktion des Potentials $V(r)$			
-Rekonstruktion von r=0 bis:	15.0	15.0	15.0
-Anzahl der Datenpunkte:	1500	1500	1500

Tabelle 5.5:

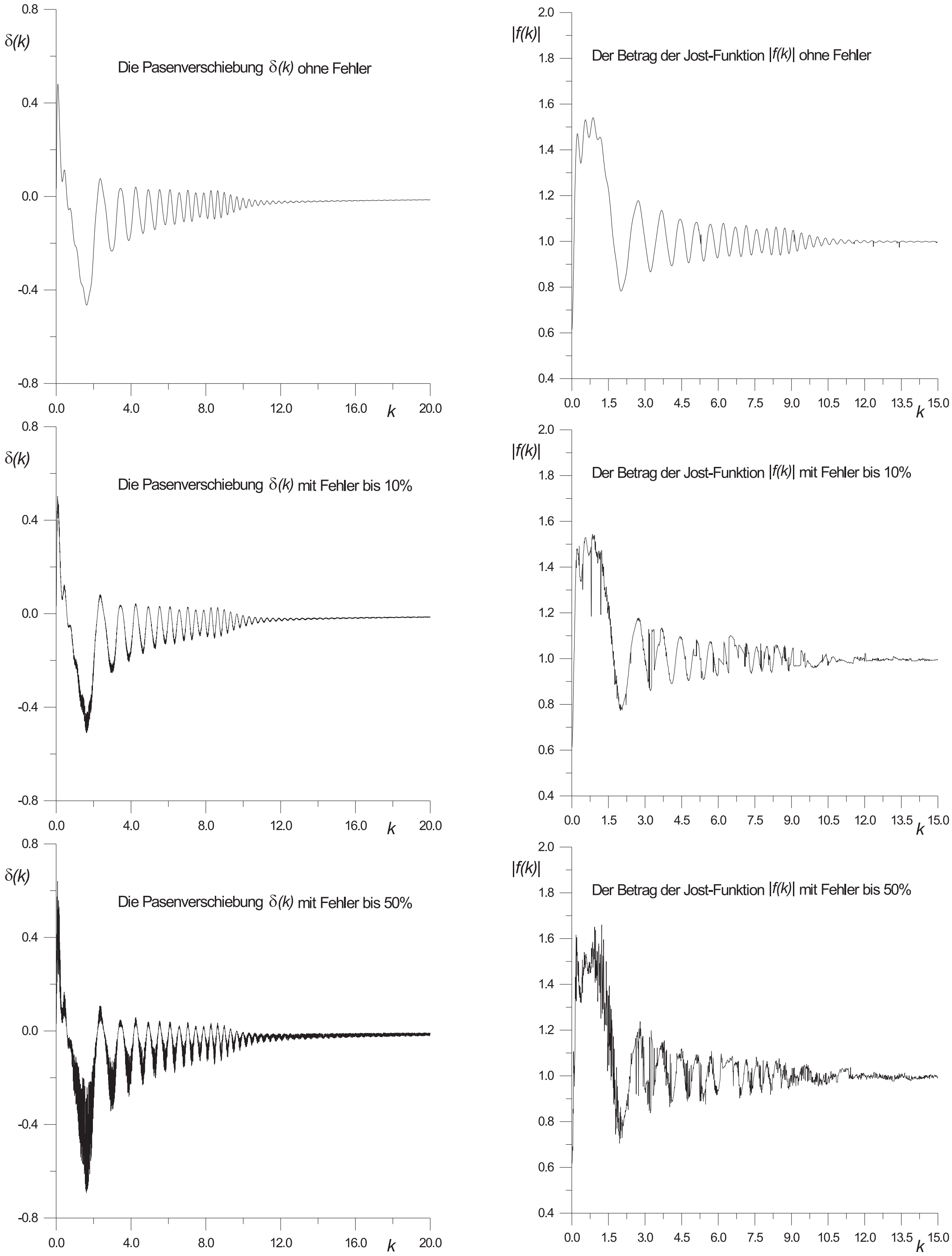

Abbildung 5.10: Den Grafiken liegt das Potential aus Gleichung (5.3) zugrunde. In der linken Spalte befindet sich jeweils die Phasenverschiebung $\delta(k)$ für die angegebenen relativen Meßfehler und in der rechten Spalte jeweils der Betrag der Jost-Funktion $f(k)$.

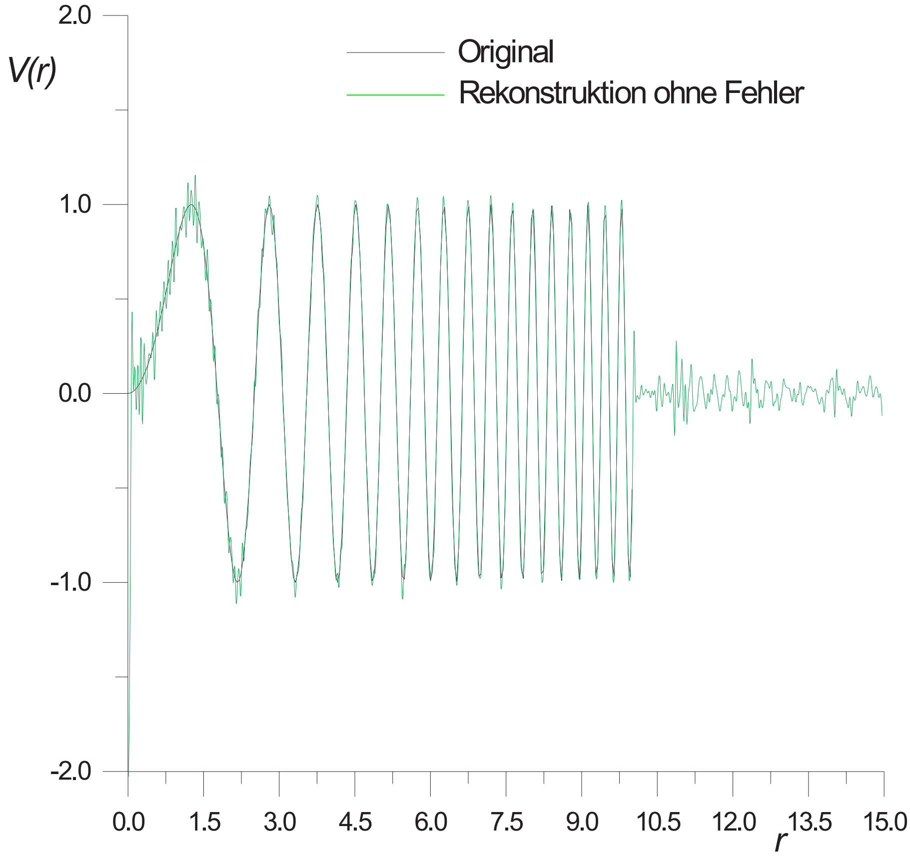

Abbildung 5.11: Rekonstruktion des Potentials aus Gleichung (5.3) ohne relativen Meßfehler.

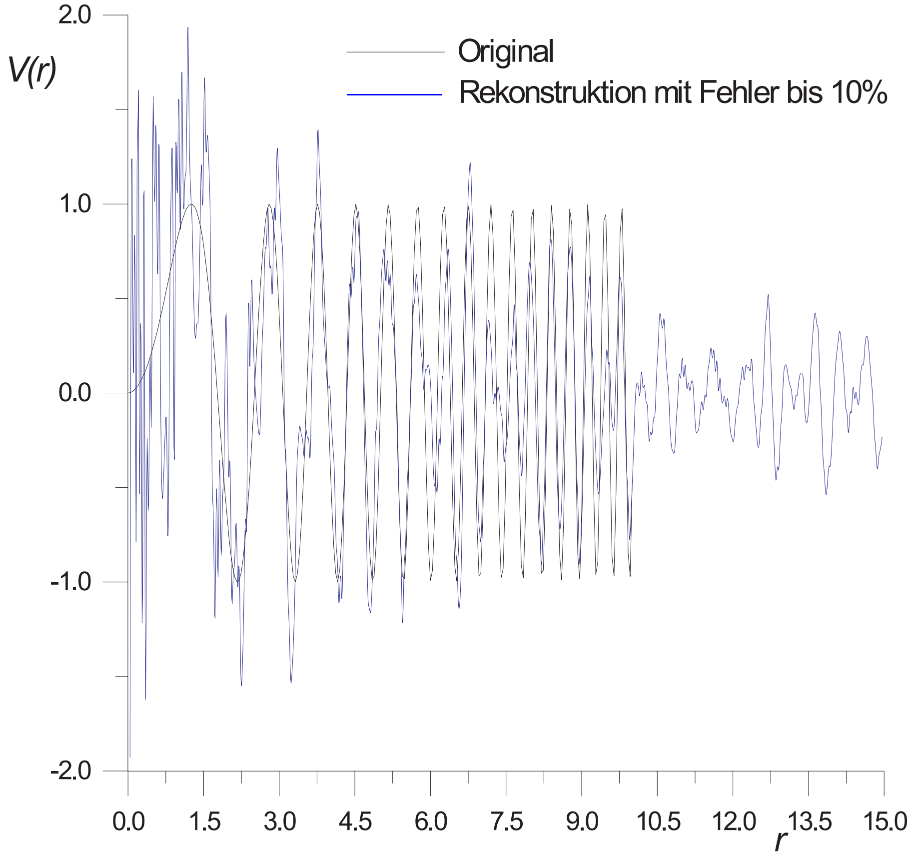

Abbildung 5.12: Rekonstruktion des Potentials aus Gleichung (5.3) bei einem relativen Meßfehler von bis zu 10%.

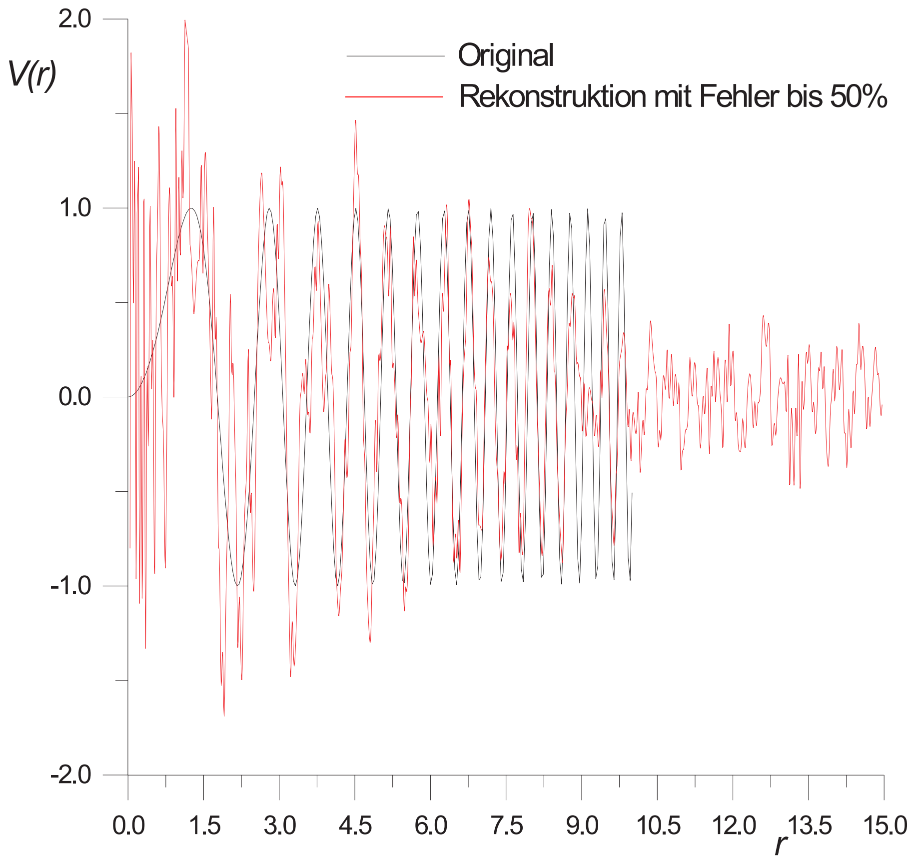

Abbildung 5.13: Rekonstruktion des Potentials aus Gleichung (5.3) bei einem relativen Meßfehler von bis zu 50%.

5.3.4 Das abgeschirmte Coulomb-Potential

Ein realistischeres Beispiel ist das sogenannte Coulomb-Potential. Elektrische Kräfte lassen sich durch das Coulomb-Potential beschreiben, wobei dieses im wesentlichen durch $V(r) = 1/r$ darstellbar ist. Das Coulomb-Potential erfüllt leider nicht die Bedingung (2.7), nämlich daß $r|V(r)| \in L_1[0,\infty]$. Diese Schwierigkeit ist umgehbar, wenn das sogenannte abgeschirmte Coulomb-Potential $V(r) = \exp(-r)/r$ betrachtet wird. Mit dieser Modifikation ist die Bedingung $rV(r) \in L_1[0,\infty]$ erfüllt. Eine weitere Schwierigkeit ist die numerische Behandlung der Singularität bei $r = 0$. Eine Lösung besteht darin, in Näherung das Potential

$$V(r) = \begin{cases} \frac{e^{-r}}{r+0.0001} & : \quad 0 \le r \le 5 \\ 0 & : \quad r > 5 \end{cases} \tag{5.4}$$

zu betrachten. Bei der Arbeit mit dem numerischen Algorithmus war festzustellen, daß die Phasenverschiebung $\delta(k)$ viel langsamer mit zunehmendem k gegen Null konvergiert, wenn das Potential sein Vorzeichen nicht ändert. Der Grund dafür ist, das die Lösungen $\varphi(k,r)$ und $f(k,r)$ der Schrödinger-Gleichung für zunehmendes k langsamer gegen die freien Lösungen $\varphi_0(k,r)$ und $f_0(k,r)$ konvergieren, wenn das Potential sein Vorzeichen beibehält. Dies verdeutlichen die Integrale $P_1(r)$ und $Q(r)$, die wesentlich zu den Abschätzungen (2.37) und (2.46) beigetragen haben, denn das abgeschirmte Coulomb-Potential ist sicherlich immer größer oder gleich Null.

In diesem Abschnitt wird nicht das Verhalten der Rekonstruktion unter Hinzunahme von relativen Fehlern untersucht. Hier wird vielmehr aufgezeigt, wie sich die Rekonstruktion verändert, wenn die Phasenverschiebung $\delta(k)$ von $k = 0$ bis zu einem veränderlichen $k_{\max}$ bereitgestellt wird. Das eben gesagte illustriert Abbildung 5.14. Es ist $\delta(10.0) \approx -0.149$. Wenn also zunächst die Phasenverschiebung $\delta(k)$ von $k = 0$ bis $k_{\max} = 10$ gegeben ist (grüne Kurve), so wäre es unklug das unendliche Integral aus (3.44) für die Berechnung des Betrags der Jost-Funktion $f(k)$ durch ein endliches von 0 bis 10 zu ersetzen. Aus diesem Grund interpoliert der Algorithmus $\delta(k)$ für $k > 10$, indem er versucht in dem Punkt $(10.0, \delta(10.0))$ die Tangente der Phasenverschiebung $\delta(k)$ anzulegen (schwarze Linie). Offensichtlich verspricht dieses Vorgehen in

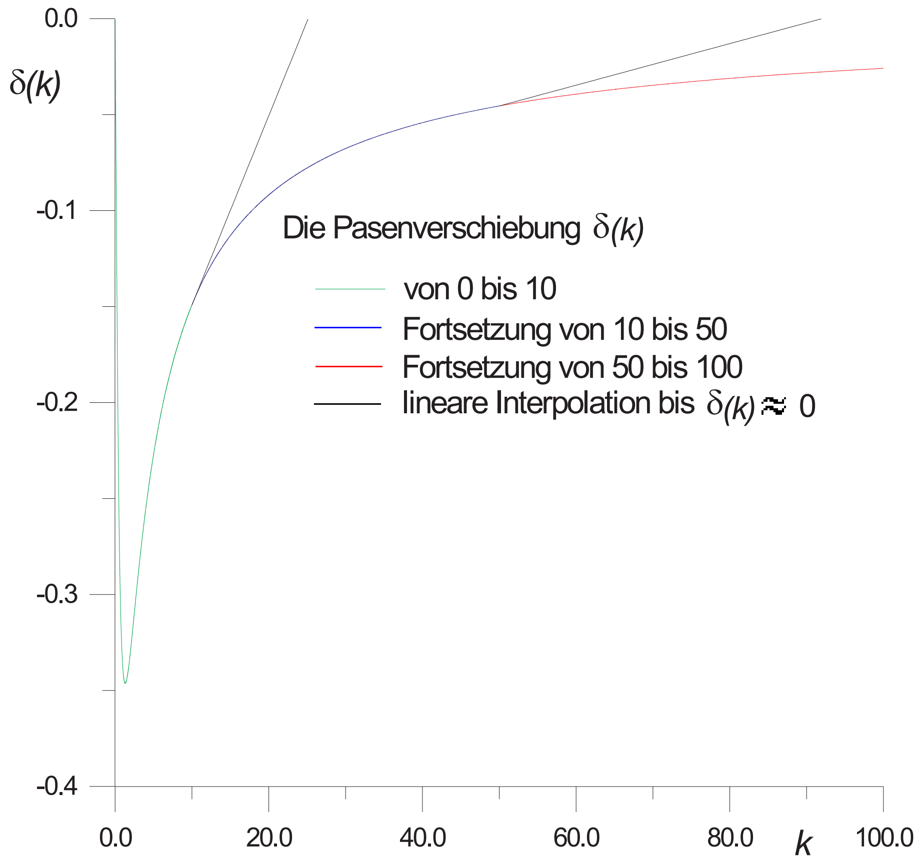

Abbildung 5.14: Die Phasenverschiebung $\delta(k)$ bezüglich des Potentials (5.4) ohne Meßfehler.

diesem Fall keine gute Näherung. Ebenso wird für die anderen Fälle verfahren. In der Abbildung 5.14 ist auf die Darstellung der Interpolation der Phasenverschiebung $\delta(k)$ für $k > 100$ verzichtet worden.

Weiter läßt das Potential aus (5.4) keinen gebundenen Zustand zu. Dies ist wegen Gleichung (3.36) auch nicht möglich, denn es ist $\int_0^5 \mathrm{d}r\, r|V(r)| < 0.993 < 1$. Die drei Berechnungen von $|f(k)|$ aus den drei Phasenverschiebungen zeigt Abbildung 5.15. Die drei Rekonstruktionen sind in Abbildung 5.16 zu sehen. Sie zeigt, daß die Rekonstruktion, für die die Phasenverschiebung $\delta(k)$ bis $k = 100$ berechnet worden ist, die „Singularität“ bei $r = 0$ deutlich am besten nachbildet. Der Funktionswert $\delta(100.0) \approx -0.026$ ist zwar schon deutlich dichter an

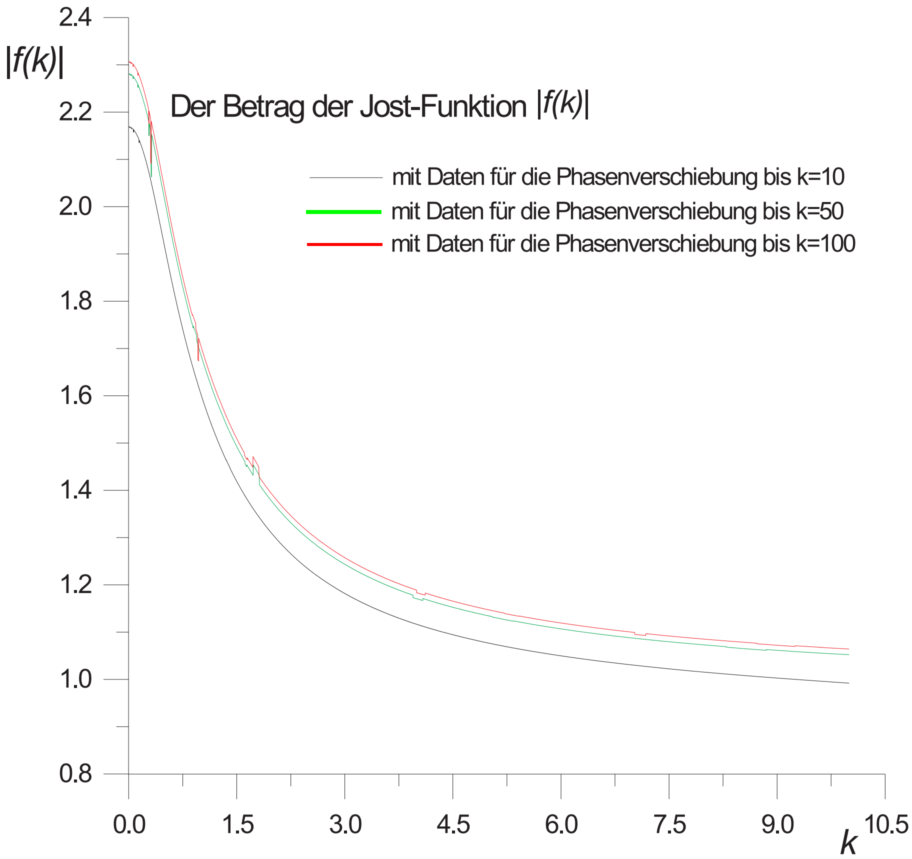

Abbildung 5.15: Der Betrag der Jost-Funktion $f(k)$ für die drei Phasenverschiebungen $\delta(k)$

Null, als $\delta(10) \approx -0.149$, doch offensichtlich noch nicht gut genug, als daß die Rekonstruktion befriedigend ausfallen kann.

Desweiteren seien hier die Rechenzeiten für die drei Fälle wiedergegeben. Sie betragen 533 Sekunden, 1202 Sekunden und 2133 Sekunden. Die dabei benutzte Parameterkonfiguration für die Numerik zeigt Tabelle 5.6.

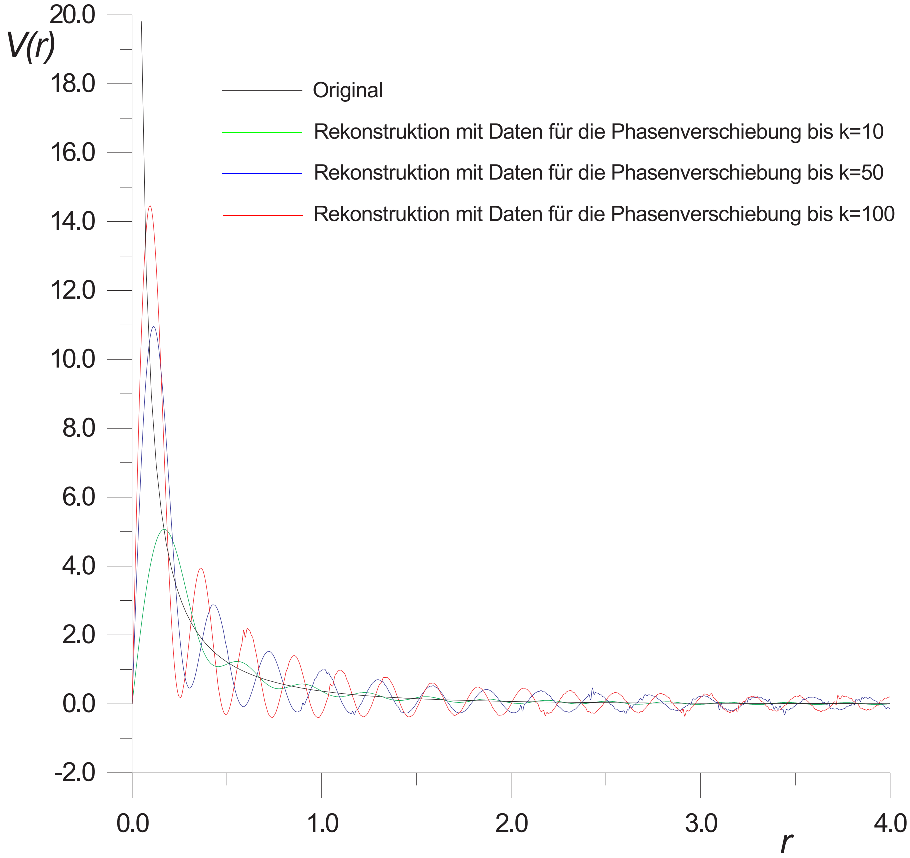

Abbildung 5.16: Die Rekonstruktion des Potentials aus Gleichung (5.4).

Parameter	Fehler 0%	Fehler 10%	Fehler 50%
Erzeugung der exp. Daten			
-Genauigkeit der Rechnung:	1.0E-4	1.0E-4	1.0E-4
-Anzahl der Datenpunkte $(k, \delta(k))$*:*	10000	10000	10000
-Berechnung $\delta(k)$ *von 0 bis:*	10.0	50.0	100.0
Erzeugung des Betrags der Jost-Funktion $f(k)$			
-Genauigkeit der Rechnung:	0.001	0.001	0.001
-Anzahl der Datenpunkte $(k, f(k))$*:*	5000	5000	5000
-Berechnung $f(k)$ *von 0 bis:*	10.0	10.0	10.0
Erzeugung des Kerns $G(r,t)$			
-Genauigkeit der Rechnung:	0.001	0.001	0.001
-Anzahl der Datenpunkte:	5000	5000	5000
Erzeugung des Provzner-Levitan-Kerns $K(r,r)$			
-Genauigkeit der Rechnung:	50	50	50
-Anzahl der Datenpunkte:	1000	1000	1000
Rekonstruktion des Potentials $V(r)$			
-Rekonstruktion von r=0 bis:	8.0	8.0	8.0
-Anzahl der Datenpunkte:	2000	2000	2000

Tabelle 5.6:

5.3.5 Die Parabel

Zum Abschluß wird noch die Rekonstruktion einer Parabel vorstellt. Grundlage dafür ist das Potential

$$V(r) = \begin{cases} r(r-2) & : \quad 0 \leq r \leq 3 \\ 0 & : \quad r > 3 \end{cases} \tag{5.5}$$

Das Potential $V(r)$ aus Gleichung (5.5) weist an der Stelle $r = 3$ eine Unstetigkeitsstelle auf. Dadurch wird die Rekonstruktion besonders bei $r = 3$ interessant.

Der Algorithmus kann für dieses Potential keinen gebundenen Zustand finden. Die Phasenverschiebung und der Betrag der Jost-Funktion sind für die drei verschiedenen Meßfehler in Abbildung 5.17 dargestellt. Hier kann wieder das Levinson-Theorem mit $\delta(0.015) \approx -0.0307$ numerisch bestätigt werden. Auch können die Asymptotiken für die Phasenverschiebung $\delta(k)$ und für den Betrag der Jost-Funktion $f(k)$ numerisch wiedergegeben werden. Es gilt nämlich $\delta(15.0) \approx 0.0029$ und $f(10.0) \approx 1.007$.
Die explizite Rekonstruktion des Potentials zeigt Abbildung 5.18. Sie zeigt, daß für alle drei Fälle die Rekonstruktion gelungen ist. Auch konnte die Unstetigkeit bei $r = 3$ relativ gut rekonstruiert werden.
Die Rechenzeiten für die drei Fälle sind 96 Sekunden, 348 Sekunden und 855 Sekunden. Dabei wurden die Parameter für die Numerik, wie in Tabelle 5.7 gezeigt, gesetzt.

Parameter	Fehler 0%	Fehler 10%	Fehler 50%
Erzeugung der exp. Daten			
-Genauigkeit der Rechnung:	1.0E-4	1.0E-4	1.0E-4
-Anzahl der Datenpunkte $(k, \delta(k))$*:*	1000	1000	1000
-Berechnung $\delta(k)$ *von 0 bis:*	15.0	15.0	15.0
Erzeugung des Betrags der Jost-Funktion $f(k)$			
-Genauigkeit der Rechnung:	0.001	0.01	0.01
-Anzahl der Datenpunkte $(k, f(k))$*:*	1000	1000	1000
-Berechnung $f(k)$ *von 0 bis:*	10.0	10.0	10.0
Erzeugung des Kerns $G(r, t)$			
-Genauigkeit der Rechnung:	0.01	0.01	0.01
-Anzahl der Datenpunkte:	1000	1000	1000
Erzeugung des Provzner-Levitan-Kerns $K(r, r)$			
-Genauigkeit der Rechnung:	50	50	50
-Anzahl der Datenpunkte:	100	100	100
Rekonstruktion des Potentials $V(r)$			
-Rekonstruktion von r=0 bis:	8.0	8.0	8.0
-Anzahl der Datenpunkte:	1000	1000	1000

Tabelle 5.7:

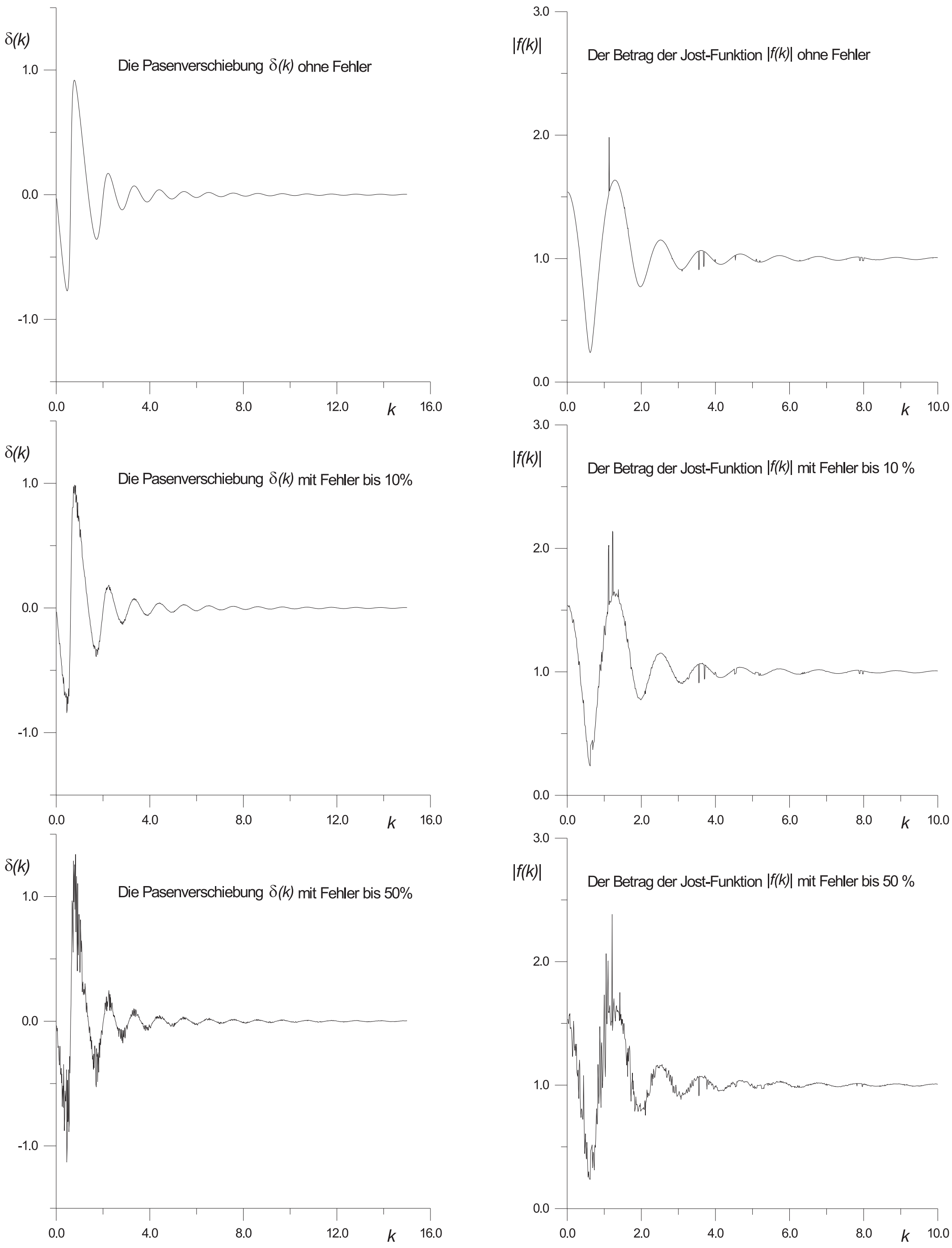

Abbildung 5.17: Den Grafiken liegt das Potential aus Gleichung (5.5) zugrunde. In der linken Spalte befindet sich jeweils die Phasenverschiebung $\delta(k)$ für die angegebenen relativen Meßfehler und in der rechten Spalte jeweils der Betrag der Jost-Funktion $f(k)$.

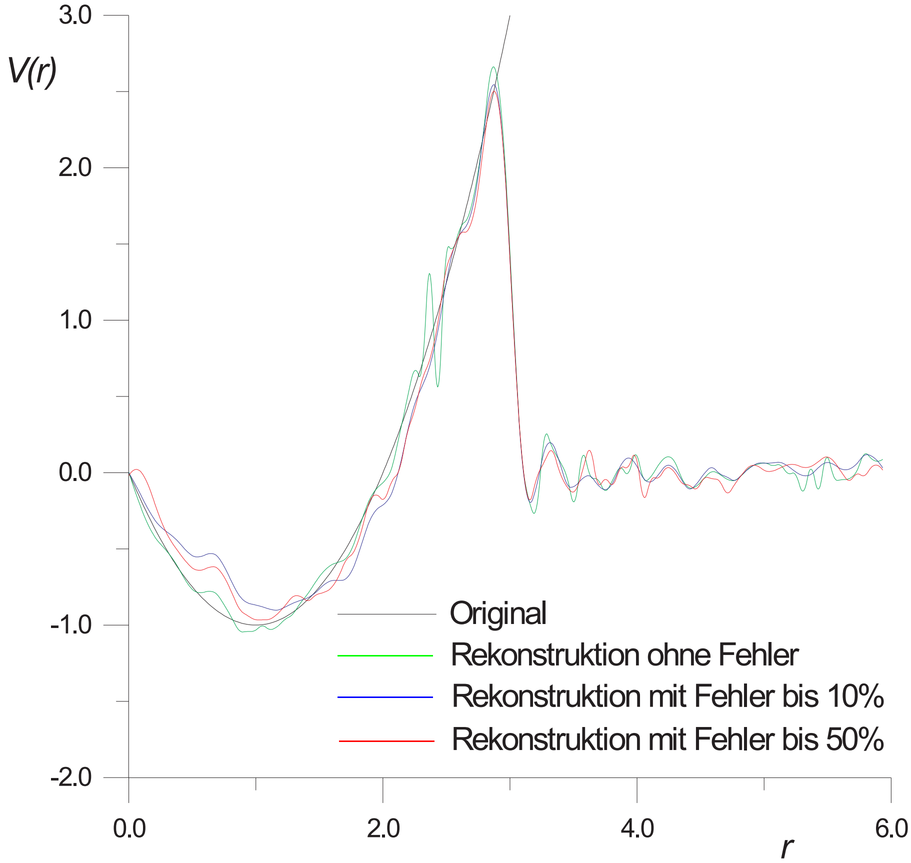

Abbildung 5.18: Die Rekonstruktion des Potentials aus Gleichung (5.5).

5.4 Abschließende Bemerkungen

Es bleibt festzuhalten, daß die numerische Umsetzung der Gel'fand-Levitan-Theorie grundsätzlich als gelungen betrachtet werden kann.

Doch gibt es auch einige Punkte, die verbesserungswürdig sind.

- Die Wahl der Stützstellen für die Interpolation der Phasenverschiebung $\delta(k)$, des Betrags der Jost-Funktion $f(k)$, der Funktion $G(r,t)$ und des Provzner-Levitan-Kerns $K(r,r)$ sind alle äquidistant gewählt worden. Ein geschickteres Vorgehen, wäre an „kritischen" Stellen mehr Funktionsauswertungen zu machen und an Stellen, an denen die Funktion „relativ konstant" in der Ableitung ist, weniger Berechnungen anzustellen. Beispielsweise ist es für die Phasenverschiebung $\delta(k)$ und für den Betrag der Jost-Funktion $f(k)$ sinnvoller „nahe" Null mehr Funktionsauswertungen durchzuführen, als für größere k, wenn es bei beiden Funktionen nur noch darauf ankommt, die Asymptotik richtig zu erfassen.

- Die Interpolation der Phasenverschiebung $\delta(k)$ und des Betrags der Jost-Funktion $f(k)$ für größere k als vorgegeben, kann sicherlich noch verbessert werden. Dies wurde zum Beispiel bei der Analyse der Rekonstruktion des abgeschirmten Coulomb-Potentials sehr deutlich.

- Der Hauptteil der Rechenzeit wurde von der Berechnung des Betrags der Jost-Funktion $f(k)$ beansprucht. Das Entwerfen eines eigenen Algorithmus kann hier gerade für die Fälle, für die eine mit Meßfehlern behaftete Phasenverschiebung $\delta(k)$ vorliegt, große Geschwindigkeitsvorteile bringen. Der Grund dafür ist, das die verwendete NAG-Routine „D01AQF" als Argument eine stetige Funktion erwartet und deshalb bei zufälligen Schwankungen in den Funktionswerten, gerade wenn diese sehr dicht beieinander liegen, sehr genau „hinschaut", wie sich die übergebene Funktion bei diesen „Sprüngen" verhält.

- Ein weiterer Punkt ist natürlich die Adaption des Algorithmus auf Streuexperimente auch für einen festen Drehimpuls $l > 0$.

- Von großen numerisch mathematischen Interesse ist sicherlich die Analyse wie sich ein vorgegebenes Potential $V(r)$ verhalten muß, um seine Rekonstruktion sehr zu erschweren, bzw. unmöglich zu machen.

Anhang A

Einige Abschätzungen

Hier werden passende Abschätzungen für die Kerne $G(\lambda, k, r, \rho)$ und $B(\lambda, k, r, \rho)$ berechnet, die in den Gleichungen (2.35) und (2.42) auftauchen. Dort wurden die Gleichungen

$$G(\lambda, k, r, \rho) = \frac{1}{2\lambda}[\varphi_0(\lambda, k, r)\varphi_0(-\lambda, k, \rho) - \varphi_0(-\lambda, k, r)\varphi_0(\lambda, k, \rho)]$$

für $0 \leq \rho \leq r$ und

$$B(\lambda, k, r, \rho) = \frac{\mathrm{i}}{2k}[f_0(\lambda, k, r)f_0(\lambda, -k, \rho) - f_0(\lambda, k, \rho)f_0(\lambda, -k, r)]$$

für $0 \leq r \leq \rho$ hergeleitet, wobei im Detail

$$\begin{aligned}
\varphi_0(\lambda, k, r) &= 2^\lambda \Gamma(\lambda + 1) k^{-\lambda} \sqrt{r} J_\lambda(kr), \\
f_0(\lambda, k, r) &= \left(\frac{1}{2}\pi k r\right)^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{\frac{1}{2} i\pi(\lambda + \frac{1}{2})} H_\lambda^{(1)}(kr).
\end{aligned}$$

Die Funktionen φ_0 und f_0 sind beide Lösungen der gewöhnlichen Differentialgleichung

$$U'' + k^2 U - \frac{\lambda^2 - \frac{1}{4}}{r^2} U = 0,$$

wobei sie aber unterschiedliche Randbedingungen erfüllen, nämlich

$$\begin{aligned}
\lim_{r \to 0} r^{-\lambda - \frac{1}{2}} \varphi_0(\lambda, k, r) &= 1, \\
\lim_{r \to \infty} \mathrm{e}^{-ikr} f_0(\lambda, k, r) &= 1.
\end{aligned}$$

Für φ_0 und f_0 gilt offensichtlich

$$\begin{aligned}\varphi_0(\lambda, k, r) &= k^{-\lambda-\frac{1}{2}}\varphi_0(\lambda, 1, kr),\\ f_0(\lambda, k, r) &= f_0(\lambda, 1, kr).\end{aligned}$$

Werden weiter noch die Asymptotiken

$$\begin{aligned}\varphi_0(\lambda, 1, z) &\sim 2^{\lambda+1/2}\Gamma(\lambda+1)\sqrt{\pi}\cos(z-\pi/4-\lambda\pi/2) \quad \text{für } |z| \to \infty,\\ f_0(\lambda, 1, z) &\sim (C_1(\lambda)|z|)^{-|\mu|+\frac{1}{2}} \quad \text{für } |z| \to 0 \text{ und } \lambda \neq 0.\end{aligned}$$

beachtet, so kann ein $C_0(\lambda)$ gefunden werden, daß

$$|\varphi_0(\lambda, 1, z)|\mathrm{e}^{-|\mathrm{Im}(z)|} < \begin{cases} (\frac{1}{2}C_0|z|)^{\mu+\frac{1}{2}}, & |z| < 1,\\ (\frac{1}{2}C_0)^{\mu+\frac{1}{2}}, & |z| > 1,\end{cases}$$

wobei $\mu := \mathrm{Re}\,(\lambda)$. Daraus folgt leicht, daß

$$\begin{aligned}(\tfrac{1}{2}C_0)^{\mu+\frac{1}{2}} &\leq \left(\frac{C_0|z|}{1+|z|}\right)^{\mu+\frac{1}{2}}, \quad |z| > 1,\\ (\tfrac{1}{2}C_0|z|)^{\mu+\frac{1}{2}} &\leq \left(\frac{C_0|z|}{1+|z|}\right)^{\mu+\frac{1}{2}}, \quad |z| < 1.\end{aligned}$$

Somit folgt mit $b := \mathrm{Im}\,(k)$

$$\begin{aligned}|\varphi_0(\lambda, 1, z)|\mathrm{e}^{-|\mathrm{Im}(z)|} &< \left(\frac{C_0|z|}{1+|z|}\right)^{\mu+\frac{1}{2}},\\ |\varphi_0(\lambda, k, r)|\mathrm{e}^{-|b|r} &< \left(\frac{C_0 r}{1+|k|r}\right)^{\mu+\frac{1}{2}}.\end{aligned} \tag{A.1}$$

Dieselbe Argumentation liefert andererseits

$$|f_0(\lambda, 1, z)|\mathrm{e}^{\mathrm{Im}(z)} < \begin{cases} (C_1|z|)^{-|\mu|+\frac{1}{2}}, & |z| < 1,\\ C_1^{-|\mu|+\frac{1}{2}}, & |z| > 1.\end{cases}$$

Hieraus folgt

$$|f_0(\lambda, k, r)|\mathrm{e}^{br} < \left(\frac{C_1|k|r}{1+|k|r}\right)^{-|\mu|+\frac{1}{2}}. \tag{A.2}$$

Wenn die Herleitung von Gleichung (3.9) beachtet wird, folgt

$$\varphi_0(-\lambda, k, r) = [f_0(\lambda, k)]^{-1}[2\lambda f_0(\lambda, k, r) + f_0(-\lambda, k)\varphi_0(\lambda, k, r)],$$

wobei aus Gleichung (3.4) bekannt ist, daß

$$f_0(\lambda,k) = 2^\lambda \sqrt{\frac{2}{\pi}}\Gamma(\lambda+1)k^{-\lambda+\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\mathrm{i}\pi(\lambda-\frac{1}{2})}.$$

Wird obige Darstellung für $\varphi(-\lambda,k,r)$ in die Darstellung für $G(\lambda,k,r,\rho)$ eingesetzt, folgt die Formel

$$G(\lambda,k,r,\rho) = \frac{1}{f_0(\lambda,k)}[\varphi_0(\lambda,k,r)f_0(\lambda,k,\rho) - \varphi_0(\lambda,k,\rho)f_0(\lambda,k,r)]. \quad \text{(A.3)}$$

Zusammen mit den Abschätzungen (A.1), (A.2) und der offensichtlichen Abschätzung

$$|f_0(\lambda,k)|^{-1} < A|k|^{\mu-\frac{1}{2}},$$

wobei A nur von λ abhängt, folgt aus Gleichung (A.3) die gesuchte Abschätzung:

$$|G(\lambda,k,r,\rho)| < C(\lambda)\mathrm{e}^{|r-\rho||b|}\left(\frac{r}{1+|k|r}\right)^{|\mu|+\frac{1}{2}}\left(\frac{\rho}{1+|k|\rho}\right)^{-|\mu|+\frac{1}{2}}.$$

Für die Gültigkeit obiger Abschätzung sei noch einmal daran erinnert, daß $0 \leq \rho \leq r$ gilt.

Mit der Herleitung von Gleichung (3.10) ist die Darstellung

$$f_0(\lambda,-k,r) = [f_0(\lambda,k)]^{-1}[f_0(\lambda,-k)f_0(\lambda,k,r) - 2\mathrm{i}k\varphi_0(\lambda,k,r)].$$

möglich. Wird dieses Resultat in die Darstellung für $B(\lambda,k,r,\rho)$ eingesetzt, folgt

$$B(\lambda,k,r,\rho) = \frac{1}{f_0(\lambda,k)}[f_0(\lambda,k,r)\varphi_0(\lambda,k,\rho) - f_0(\lambda,k,\rho)\varphi_0(\lambda,k,r)]. \quad \text{(A.4)}$$

Wenn daran gedacht wird, daß hier $0 \leq r \leq \rho$ gilt, folgt wie eben die Abschätzung

$$|B(\lambda,k,r,\rho)| < C(\lambda)\mathrm{e}^{|b|\rho-br}\left(\frac{\rho}{1+|k|\rho}\right)^{|\mu|+\frac{1}{2}}\left(\frac{r}{1+|k|r}\right)^{-|\mu|+\frac{1}{2}}.$$

Anhang B

Rechnungen zum Provzner-Levitan-Kern

Hier wird die Rechnung, die zu Gleichung (4.2) führt, hergeleitet. Desweiteren wird für dieselbe Gleichung die Abschätzung (4.3) gezeigt.

Es wurde gezeigt, daß folgende Gleichungen gelten ((2.35), (4.1)):

$$\begin{aligned} \varphi(k,r) &= \frac{\sin kr}{k} + \int_0^r \mathrm{d}\rho \, \frac{\sin k(r-\rho)}{k} V(\rho)\varphi(k,\rho), \\ \varphi(k,r) &= \frac{\sin kr}{k} + \int_0^r \mathrm{d}t \, \frac{\sin kt}{k} K(r,t), \quad 0 \le t \le r. \end{aligned}$$

Hierbei ist zu beachten, daß wir uns wegen $\lambda = 1/2$ für die Kurzschreibweisen $\varphi(k,r) = \varphi(\lambda,k,r)$, usw. entschieden haben.
Wird nun die zweite Gleichung in die erste eingesetzt, folgt nach der Multiplikation mit k

$$\int_0^r \mathrm{d}t \, K(r,t) \sin kt = \int_0^r \mathrm{d}\rho \, V(\rho) \sin k(r-\rho) \left(\frac{\sin k\rho}{k} + \int_0^\rho \mathrm{d}t \, K(\rho,t) \frac{\sin kt}{k} \right). \tag{B.1}$$

Die trigonometrischen Terme auf beiden Seiten obiger Gleichung werden eliminiert, indem eine Sinus-Fourier-Transformation nach k angewendet wird.
Für die linke Seite folgt (inverse Fourier-Transformation) $K(r,t')$, $0 \le t' \le r$.
Das erste Integral auf der rechten Seite von (B.1) berechnet sich zu

$$I \;:=\; \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \mathrm{d}k \, \sin kt' \int_0^r \mathrm{d}\rho \, V(\rho) \frac{\sin k(r-\rho)}{k} \frac{\sin k\rho}{k}$$

$$= \frac{2}{\pi}\int_0^r \mathrm{d}\rho\, V(\rho)\int_0^\infty \mathrm{d}k\, \sin kt' \sin k(r-\rho)\frac{\sin k\rho}{k},$$

wenn die Integrationsreihenfolge vertauscht wird, was möglich ist, da hier $V(r)$ bei $r = 0$ als Lebesgue-integrierbar vorausgesetzt wurde und damit der Satz von Fubini anwendbar ist. Durch Anwenden einiger Additionstheoreme folgt

$$\frac{\sin k(r-\rho)\sin k\rho}{k} = \frac{\cos k(r-2\rho) - \cos kr}{2k}. \tag{B.2}$$

In [Bronstein,1973] ist nachlesbar, daß die Formel

$$\int_0^\infty \mathrm{d}\hat{k}\, \frac{\cos \hat{k}c}{\hat{k}} \sin \hat{k} = \begin{cases} \pi/2, & |c| < 1, \\ \pi/4, & |c| = 1, \\ 0, & |c| > 1. \end{cases} \tag{B.3}$$

gilt. Werden nun die Formeln (B.2) und (B.3) benutzt, ergeben sich die Umformungen

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty \mathrm{d}k\, \frac{\cos k(r-2\rho)}{k}\sin kt' = \int_0^\infty \mathrm{d}\hat{k}\, \frac{\cos \hat{k}\frac{r-2\rho}{t'}}{\hat{k}}\sin\hat{k} \\ &= \frac{\pi}{2} \quad \text{für } \tfrac{r-t'}{2} < \rho < \tfrac{r+t'}{2} \\ &\text{und} \\ &\int_0^\infty \mathrm{d}k\, \frac{\cos kr}{k}\sin kt' = \int_0^\infty \mathrm{d}\hat{k}\, \frac{\cos\hat{k}\frac{r}{t'}}{\hat{k}}\sin\hat{k} = 0, \quad \text{da } r > t'. \end{aligned}$$

Sammeln der vorläufigen Ergebnisse, liefert

$$I = \frac{1}{2}\int_{(r-t')/2}^{(r+t')/2} \mathrm{d}\rho\, V(\rho).$$

Für das zweite Integral auf der rechten Seite von (B.1) ist ganz analog zu verfahren, wobei allerdings (B.2) leicht zu verändern ist. Hier sei jetzt nur noch das Resultat angegeben:

$$\begin{aligned} K(r,t) &= \frac{1}{2}\int_{(r-t)/2}^{(r+t)/2} \mathrm{d}s\, V(s) \\ &\quad + \int_{(r-t)/2}^{(r+t)/2} \mathrm{d}s \int_0^{(r-t)/2} \mathrm{d}u\, V(s+u)K(s+u, s-u). \end{aligned} \tag{B.4}$$

Weiter wird hier zusätzlich noch die Abschätzung (4.3)

$$|K(r,t)| \leq \frac{1}{2}\int_{(r-t)/2}^{(r+t)/2} \mathrm{d}s\, |V(s)| \exp\left[\int_0^{(r+t)/2} \mathrm{d}u\, u|V(u)|\right]$$

gezeigt. Mit den Definitionen

$$\begin{aligned}
K_0(r,t) &:= \frac{1}{2}\int_{(r-t)/2}^{(r+t)/2} \mathrm{d}s\, V(s), \\
K_{n+1}(r,t) &:= \int_{(r-t)/2}^{(r+t)/2} \mathrm{d}s \int_0^{(r-t)/2} \mathrm{d}u\, V(s+u)K(s+u,s-u), \quad n \geq 1,
\end{aligned}$$

kann die Neumannsche Reihe $\sum_{n=0}^{\infty} K_n(r,t)$ aufgestellt werden. Diese konvergiert gegen die eindeutige Lösung $K(r,t)$ der Integralgleichung (B.4) wenn folgende Behauptung gilt:

Behauptung: Es gilt für alle $n \in \mathbb{N}$

$$|K_n(r,t)| \leq \frac{1}{2}\int_{(r-t)/2}^{(r+t)/2} \mathrm{d}s\, |V(s)| \frac{1}{n!}\left(\int_0^{(r+t)/2} \mathrm{d}u\, u|V(u)|\right)^n .$$

Beweis: Der Beweis wird per Induktion nach n geführt.
Für $n = 0$ ist die Behauptung per Definition von $K_0(r,t)$ klar.
Sei die Behauptung also für ein $n > 0$ richtig. Dann folgt die Ungleichungskette

$$\begin{aligned}
|K_{n+1}(r,t)| &\leq \int_{(r-t)/2}^{(r+t)/2} \mathrm{d}s \\
&\quad \int_0^{(r+t)/2} \mathrm{d}u\, |V(s+u)||K_n(s+u,s-u)| \quad \text{nach Def.} \\
&\leq \int_{(r-t)/2}^{(r+t)/2} \mathrm{d}s \int_0^{(r-t)/2} \mathrm{d}u\, |V(s+u)| \\
&\quad \frac{1}{2}\int_u^s \mathrm{d}s'\, |V(s')| \frac{1}{n!}\left(\int_0^s \mathrm{d}u'\, u'|V(u')|\right)^n \quad \text{nach Ind. Vor.} \\
&\leq \frac{1}{2}\int_0^{(r-t)/2} \mathrm{d}u \left(\int_{(r-t)/2}^{(r+t)/2} \mathrm{d}s\, |V(s)| \int_u^{(r+t)/2} \mathrm{d}s'\, |V(s')|\right) \\
&\quad \frac{1}{n!}\left(\int_0^s \mathrm{d}u'\, u'|V(u')|\right)^n \\
&\leq \frac{1}{2}\int_{(r-t)/2}^{(r+t)/2} \mathrm{d}s'\, |V(s')| \underbrace{\int_0^{(r+t)/2} \mathrm{d}u \int_u^{(r+t)/2} \mathrm{d}s\, |V(s)|}_{=\int_0^{(r+t)/2} \mathrm{d}s\, s|V(s)|} \\
&\quad \frac{1}{n!}\left(\int_0^s \mathrm{d}u'\, u'|V(u')|\right)^n \\
&= \frac{1}{2}\int_{(r-t)/2}^{(r+t)/2} \mathrm{d}s\, |V(s)| \frac{1}{(n+1)!}\left(\int_0^{(r+t)/2} \mathrm{d}u\, u|V(u)|\right)^{n+1} .
\end{aligned}$$

□

Literaturverzeichnis

[Abramowitz,Stegun] Abramowitz, M., Stegun, I.: *Handbook of Mathematical Functions* U.S. Department of Commerce, National Bureau of Standards, Apllied Mathematics, Series 55

[Baeteman,Chadan;1976] Baeteman, M.L. und Chadan, K.: *Scattering theory with highly singular oscillating potentials*, Ann. Inst. Henri Poincaré, Section A, Vol. XXIV, 1976

[Bargmann;1952] Bargmann, V., Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A. 38,961, 1952

[Boas;1954] Boas, R.P.: *Entire Functions*, Academy Press Inc., Publishers, New York, N.Y., 1954

[Bronstein,1973] Bronstein, I.N.: *Taschenbuch der Mathematik*, Harri Deutsch Verlag, 1973

[Chandrasekharan;1987] Chandrasekharan, K.: *Classical Fourier Transforms*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York London Paris Tokyo, 1987

[Dawydow;1981] Dawydow, A.S.: *Quantenmechanik*, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1981

[De Alfaro,Regge;1965] De Alfaro, V.; Regge T.: *Potential Scattering*, North-Holland Publishing Company-Amsterdam, 1965

[Engelen-Müllges,Reuter;1987] Engelen-Müllges, G.; Reuter F.: *Formelsammlung zur numerischen Mathematik mit C-Programmen*, BI Wissenschaftsverlag Mannheim/Wien/Zürich, 1987

[Fischer;1988] Fischer, W.: *Ausgewählte Kapitel aus der Funktionentheorie*, Vieweg, 1988

[NAG] Fortran Library Mark 18, The Numerical Analysis Group Ltd., Oxford

[Gel'fand,Levitan;1955] Gel'fand I.M. und Levitan B.M.: *On the determination of a differential equation by its spectral funtion*, Izv.Akad.Nauk.SSR ser.Math. 15,309-360, 1951, [Übersetzung in Amer.Math.Soc.Transl. ser. 2,1,253-304, 1955]

[Heuser;1989] Heuser, H.: *Gewöhnliche Differentialgleichungen*, B.G. Teubner Stuttgart, 1989

[Heuser;1992] Heuser, H.: *Funktionalanalysis*, B.G. Teubner Stuttgart, 1992

[Lemay,Perkins;1996] Lemay,L.; Perkins C.L.: *Java in 21 Tagen*, Sams Haar, 1996

[Levin;1956] Levin, B.Y.: *Fourier and Laplace's types of transformation by means of solutions of differential equations of second order*, 1956, Dokl. Akad. Nauk. SSSR, 106, 187-190, [Math. Rev. 18,35 (1957)]

[Levinson;1949] Levinson, N.: *On the uniqueness of the potential in a Schrödinger Equation for a given asymptotik phase*, Det Kgl. Danske Videnskabernes Selskab, Bind XXV, Nr. 9, 1949

[Newton;1966] Newton R.G.: *Scattering theory of waves and particles*, McGraw-Hill Book Company; New York, San Francisco, St. Louis, Toronto, London, Sydney 1966

[Nolting;1992] Nolting, W.: *Quantenmechanik Teil 1, Grundlagen*, Verlag Zimmermann-Neufang, Ulmen 1992

[Nolting;1993] Nolting, W.: *Quantenmechanik Teil 2, Methoden und Anwendungen*, Verlag Zimmermann-Neufang, Ulmen 1993

[Sabatier,Chadan;1989] Chadan, K. und Sabatier, P.C.: *Inverse Problems in Quantum Scattering Theory*; Springer-Verlag; New York, Berlin, Heidelberg, London, Paris, Tokyo 1989

[Schwinger;1961] Schwinger, J.: Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A. 47, 122, 1961

[Tricomi;1957] Tricomi F.G.: Integral Equations, Interscience Publischers, Inc., New York, London 1957

[Whittaker,Watson;1927] Whittaker, E.T.; Watson, G.N.: *Modern Analysis*, Camebride 1927