

Fakultät für Physik und Astronomie

Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

Diplomarbeit

im Studiengang Physik

vorgelegt von

Benedikt Johannes Wilhelm Wundt

aus Hanau

2007

Höhere QED-Bindungs-Korrekturen unter besonderer Berücksichtigung der Selbstenergie

Die Diplomarbeit wurde von Benedikt Johannes Wilhelm Wundt ausgeführt am
Max-Planck-Institut für Kernphysik
unter der Betreuung von
Priv.-Doz. Dr. Ulrich D. Jentschura

Höhere QED-Bindungs-Korrekturen unter besonderer Berücksichtigung der Selbstenergie

Zusammenfassung:

In dieser Arbeit werden höhere QED-Bindungs-Korrekturen der Selbstenergie berechnet. Unser Ziel ist dabei die Bestimmung des nichtlogarithmischen Beitrags in der Ordnung $\alpha(Z\alpha)^6$. Dieser bereitet immer noch große Schwierigkeiten, da in der Rechnung zwei unterschiedliche Energieskalen präsent sind, für deren Berechnung sowohl die Quantenfeldtheorie, als auch die relativistische Atomphysik benötigt werden. Diese beiden Energieskalen trennen wir durch die Einführung eines Überlappungsparameters. Wir präsentieren eine numerische Methode, bei der wir eine diskrete vollständige Basis auf einem Gitter verwenden. Dadurch umgehen wir die Probleme der bisherigen Methoden. So sind wir in der Lage, diesen Beitrag für viele hochangeregte Zustände zu bestimmen, die für die Präzisions-Spektroskopie von großer Bedeutung sind und mit den bisherigen Methoden nicht zugänglich waren.

Higher order QED binding corrections under special consideration of the self-energy

Abstract:

In this work, higher order QED binding corrections to the self-energy are calculated. It is our aim to determine the non-logarithmic contribution of the order $\alpha(Z\alpha)^6$, which has proven to be a difficult task in the past. This is because due to the two energy scales present in the problem, one has to apply methods of quantum field theory as well as of relativistic atomic physics. These two energy scales are separated by introducing an overlapping parameter. We present a numerical method where we use a discrete complete basis set on a lattice which allows us to avoid the problems encountered in the previous methods. Therefore, we can calculate this contribution for higher excited states that are important for high-precision spectroscopy but have not been accessible using previous methods.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Historische Einführung	1
1.2	Gegenstand der vorliegenden Arbeit	2
1.3	Konventionen und Einheiten	4
1.3.1	Heaviside-Lorentz-Einheiten	4
1.3.2	Atomare Einheiten	4
2	Selbstenergie in Photonen-Energieregularisierung	5
2.1	Allgemeine Orientierung	5
2.2	Foldy-Wouthuysen-Transformation für niedrigenergetische Photonen	6
2.2.1	Transformation des Hamiltonians	6
2.2.2	Transformation des Stroms	9
2.2.3	Alternative Herleitung	12
2.3	Photonen-Energieregularisierung	13
2.4	Der Niedrigenergie-Anteil der Selbstenergie	15
3	Analytische Behandlung von relativistischen Bethe-Logarithmen	21
3.1	Der nichtrelativistische Dipol	21
3.2	$p^i \dots p^j p^2$ -Term	25
3.3	$p^i \dots \vec{r} \times \vec{\sigma}$ -Matrixelement	26
3.4	$p^i \dots (\vec{k} \cdot \vec{r}) \vec{k} \times \vec{\sigma}$ -Matrixelement	29
3.5	Der nichtrelativistische Quadrupol	31
3.5.1	$p^i r^j \dots r^j p^i$ -Matrixelement	32
3.5.2	$p^i r^i \dots r^j p^j$ -Matrixelement	33
3.5.3	$p^i r^j \dots r^i p^j$ -Matrixelement	34
3.5.4	$p^i r^2 \dots p^i$ -Matrixelement	36
3.5.5	$p^i r^i r^j \dots p^j$ -Matrixelement	36
3.5.6	Zusammenfassung der Quadrupol-Terme	37
3.6	Korrektur zur Energie	38
3.7	Korrektur zur Wellenfunktion	40
3.8	LS -Korrektur des Hamiltonians	41
3.9	p^4 -Korrektur des Hamiltonians	43
4	Numerische Berechnung von relativistischen Bethe-Logarithmen	47
4.1	Diskretisierung der Schrödinger-Gleichung	47
4.2	Programm zur Berechnung	49
4.2.1	Erzeugung der vollständigen Basis	50
4.2.2	Diskretisierung der äußeren Wellenfunktion	51
4.2.3	Berechnung des relativistischen Bethe-Logarithmus	52
4.2.4	Spezielle Beiträge	53

5	Der Hochenergie-Anteil der Selbstenergie	57
5.1	Entwicklung des Propagators	57
5.2	Effektiver Dirac-Hamiltonian	58
6	Numerische Ergebnisse für den A_{60}-Koeffizienten	61
6.1	Hochangeregte D -Zustände	61
6.2	Rydberg-Zustände mit nahezu maximalem Bahndrehimpuls	62
7	Diskussion und Ausblick	65
7.1	Was wurde erreicht?	65
7.2	Verhalten der D -Zustände	66
7.3	Rydberg-Zustände	66
7.4	Ausblick	67
A	Berechnung der diskreten Ableitungen	69
A.1	Erste Ableitung	69
A.2	Zweite Ableitung	70
B	QED Herleitung der Selbstenergie	73
B.1	Vakuumpolarisation	73
B.2	Selbstenergie des Elektrons	74
B.3	Vertexkorrektur	76
B.4	Selbstenergie in einem gebundenen Zustand	77
B.5	Effektiver Hamiltonian	78
C	Reparametrisierungsinvarianz an einem Beispiel	81
C.1	Energieregularisierung	82
C.2	Massenregularisierung	82
C.3	Dimensionale Regularisierung	83
D	Einzelergebnisse	85
D.1	Ergebnisse für hochangeregte D -Zustände	85
D.1.1	Niedrigenergie-Anteil für $D_{3/2}$ -Zustände	85
D.1.2	Niedrigenergie-Anteil für $D_{5/2}$ -Zustände	87
D.2	Ergebnisse für Rydberg-Zustände	88
D.2.1	Niedrigenergie-Anteil für $L = N - 2, J = L - \frac{1}{2}$	88
D.2.2	Niedrigenergie-Anteil für $L = N - 2, J = L + \frac{1}{2}$	89
D.2.3	Niedrigenergie-Anteil für $L = N - 1, J = L - \frac{1}{2}$	90
D.2.4	Niedrigenergie-Anteil für $L = N - 1, J = L + \frac{1}{2}$	92

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Historische Einführung

Die Physik des Atoms ist seit langer Zeit eine stete Quelle für neue Entdeckungen innerhalb der Physik. Ende des vorletzten Jahrhunderts riet der Physikprofessor Philipp von Jolly Max Planck vom Studium der Physik ab, da nach seiner Ansicht „*in dieser Wissenschaft schon fast alles erforscht sei, und es gelte, nur noch einige unbedeutende Lücken zu schließen*“ [1]. Eine davon war das ungeklärte Problem, warum das Elektron im Atom nicht in den Kern stürzt. Der junge Planck trug auch einiges dazu bei, diese Lücke zu schließen, nur war sie alles andere als unbedeutend und führte zu einer riesigen Entwicklung und immer neuen Rätseln für die Physiker.

Aus Plancks Idee der Quantisierung der Energie, die er eigentlich eher unwillig zur Lösung des Schwarzkörperproblems einführte [2] und erst spät akzeptierte, entwickelte Bohr 1913 eine der ersten Lösungen für die Energie-Zustände des Wasserstoff-Atoms [3]. Aus ihnen ließen sich die empirisch ermittelten Werte der Balmer- und anderer Serien berechnen. Allerdings waren einige der von der Bohr'schen Theorie geforderten Postulate eher empirisch eingeführt worden und nicht aus der Theorie begründbar, was eine der großen Schwächen der Theorie blieb. Sommerfeld entwickelte diese Theorie 1916 weiter, indem er Korrekturen aufgrund der speziellen Relativitätstheorie einbaute und von den Kreisbahnen Bohrs, zu einem eher planetenartigen System mit elliptischen Bahnen überging [4].

Die ersten experimentellen Messungen des Spektrums von Wasserstoff wurden bereits 1885 von Balmer durchgeführt, der für die Ergebnisse auch eine einfache empirische Formel bestimmen konnte. Zwei Jahre später entdeckten Michelson und Morley [5] bereits, dass manche dieser Linien über eine weitere Feinstruktur verfügen. Durch die von Sommerfeld vorgenommene Erweiterung enthielt die Bohr'sche Theorie nun auch diesen Effekt, eine tiefere physikalische Erklärung der angenommenen Quantisierungen lieferte sie jedoch nicht.

Schrödinger entwickelte im Jahr 1926 die Wellenmechanik soweit, dass es ihm gelang, mit ihrer Hilfe die Energie-Zustände des Wasserstoff-Atoms zu berechnen [6]. Neben den, mit Bohrs Ergebnissen übereinstimmenden, Werten lieferte seine Theorie auch eine Begründung für die Quantisierung der Zustände, die der Bohr'schen Theorie fehlte. Kurze Zeit später erweiterte Dirac die Theorie um die spezielle Relativitätstheorie und konnte damit noch Korrekturen zu den Energiewerten berechnen, die sich aus relativistischen Effekten, wie dem Spin, ergaben. Mit ihr war es dann auch möglich, die von Michelson und Morley beobachtete Feinstruktur zu erklären und nachzurechnen [7].

Die Vorhersagen Diracs wurden dann in den 40er Jahren experimentell überprüft, allerdings stellte man damals unerklärliche Abweichungen von diesen Vorhersagen fest. Retherford und Lamb waren 1947 die Ersten, die dies genau ausmaßen. Sie stellten fest, dass die $S_{1/2}$ - und $P_{1/2}$ -Niveaus nicht, wie von der Dirac'schen Theorie vorhergesagt die gleiche Energie haben, sondern dass der $P_{1/2}$ -Zustand energetisch tiefer liegt [8]. Dies war um so erstaunlicher, als

Uehling 1935 [9] vorausgesagt hatte, dass der $S_{1/2}$ -Zustand energetisch tiefer liegen würde. Die Energiedifferenz der beiden Zustände bestimmten in einer späteren Messung 1953 Triebwasser, Dayhoff und Lamb [10] zu

$$E_{2S_{1/2}} - E_{2P_{1/2}} = 1057.8(1)\text{MHz}.$$

Die Erklärung lieferte Bethe zwei Monate nach der Entdeckung. Er war als Erster in der Lage, den Hauptbeitrag zu dieser sog. Lamb-Verschiebung aufgrund der Selbstenergie bis zur Ordnung $\alpha(Z\alpha)^4$ mit Hilfe der QED, die nun noch das elektromagnetische Strahlungsfeld quantisierte, zu berechnen [11]. Dies hatten vor ihm bereits einige andere versucht, Bethe war aber der Erste, der es schaffte, die auftretenden Unendlichkeiten so zu renormieren, dass er am Ende ein endliches und sinnvolles Ergebnis erhielt. Dies war eines der ersten Anwendungsgebiete der QED und lieferte die damals genauesten Bestimmungsmethoden für die Feinstrukturkonstante α [12]. Der Hauptbeitrag dieser Korrektur hat eine logarithmische Abhängigkeit von den Bindungsenergien der Zustände, weshalb er auch als Bethe-Logarithmus bezeichnet wird. Seine Bestimmung ist damals wie heute nur numerisch möglich.

Die restlichen Beiträge in dieser Ordnung konnten zwei Jahre später von Feynman [13] und French/Weiskopf [14] berechnet werden. Erickson und Yennie gelang 16 Jahre danach auch die Bestimmung der zu $\ln((Z\alpha)^2)$ proportionalen Beiträge der Ordnung $\alpha(Z\alpha)^6$ [15,16]. Ein weiterer Beitrag dieser Ordnung, der sogenannte A_{60} -Koeffizient, konnte aber bis 1993 nicht berechnet werden [17]. Wegen der zwei präsenten Energieskalen, müssen für seine Berechnung sowohl die Quantenfeldtheorie als auch die relativistische Atomphysik angewendet werden. Diese werden dann durch die Wahl eines Überlappungsparameters zusammengeführt, was die Rechnung ausgesprochen schwierig macht. Darum ist dieser Beitrag bisher auch nur für einige ausgesuchte Zustände berechnet worden [18–25].

Die Laserspektroskopie hat in den seit der Entdeckung der Lamb-Verschiebung vergangenen 60 Jahren große Fortschritte gemacht und erreicht heute an wasserstoffartigen Systemen eine relative Genauigkeit von bis zu 10^{-14} [26]. Diese Fortschritte machen es auch heute noch erforderlich, die theoretischen Vorhersagen zu verbessern.

In letzter Zeit sind gerade hochangeregte D -Zustände [27, 28] und Rydberg-Zustände mit nahezu maximalem Drehimpuls [29] ins Interesse der Spektroskopie gerückt. Für diese Zustände existieren bis heute noch keine theoretischen Berechnungen des A_{60} -Koeffizienten. Mit der in dieser Arbeit entwickelten numerischen Methode sind wir in der Lage, auch für diese Zustände Ergebnisse zu erhalten.

1.2 Gegenstand der vorliegenden Arbeit

Die genaue Bestimmung der Energie von Atomzuständen ist, wie erwähnt, seit langem ein viel betrachtetes Gebiet der modernen Physik. Die Experimente zur Messung dieser Energien erreichen heute so hohe Genauigkeiten, dass selbst die Hochenergie-Prozesse der aktuellen Forschung berücksichtigt werden müssen [30,31]. Um mit der rasanten Entwicklung der Experimente Schritt zu halten, muss man sich eines “Juwels der theoretischen Physik” bedienen, wie es Feynman einmal ausgedrückt hat, der **QED**. In dieser Arbeit wollen wir diese nutzen, um das Problem der Ein-Photonen-Selbstenergie eines gebundenen Elektrons zu betrachten, welches sich zum Großteil für die Lamb-Verschiebung im Atom verantwortlich zeichnet. Dabei legen wir besonderes Augenmerk auf den Niedrigenergie-Anteil der Korrektur in der Ordnung $\alpha(Z\alpha)^6$, dessen Berechnung bis heute große Probleme bereitet. Die sich ergebenden Beiträge werden, da sie relativistische Korrekturen zum Bethe-Logarithmus sind, als relativistische Bethe-Logarithmen bezeichnet. Wir werden eine Trennung des Integrationsbereiches vornehmen, um die Rechnungen im Niedrigenergie-Anteil zu vereinfachen (siehe Kapitel 2). Die Vereinfachung wird dadurch ermöglicht, dass wir im Niedrigenergie-Anteil den relativistischen Dirac-Hamiltonian mittels einer Foldy-Wouthuysen-Transformation, in einen nichtrelativistischen Hamiltonian mit Korrekturen transformieren können. Dadurch sind wir in der Lage, die relativistischen Korrekturen klar vom

Hauptbeitrag zu trennen und es gibt für jede Korrektur einen eigenen Term. Außerdem ist es uns möglich, den nichtrelativistischen Propagator zu benutzen, was uns erlaubt, die separaten Lösungen für Winkel- und Radialteile der Schrödinger-Gleichung zu verwenden.

Die einzelnen Terme werden dabei in zwei Schritten berechnet. Zuerst führen wir die Integration der Kugelflächenfunktionen über den Raumwinkel aus, wozu wir algebraische Methoden verwenden. Danach führen wir die verbleibende Radialintegration numerisch aus. Durch die Verwendung dieser Racah-Algebra werden auch komplizierte Ausdrücke mit großen Bahndrehimpuls gut handhabbar. Einen Einblick in diese Algebra bieten [32] und [33]. Dabei wird ausgenutzt, dass die Kugelflächenfunktionen eine $2L + 1$ dimensionale irreduzible Darstellung zu festem L der $SO(3)$ -Lie-Algebra bilden. Dies wird in Kapitel 3 beschrieben. So erhalten wir schließlich Integrale, die nur noch über die eindimensionale Radialkoordinate r gehen. Diese berechnen wir im zweiten Schritt mit Hilfe einer numerische Gitterrechnung, die auf einem in [34] beschriebenen Verfahren beruht. Wir werden das numerische Verfahren in Kapitel 4 genauer erklären.

Unsere, in dieser Arbeit entwickelte, Methode verwenden wir dann, um den Koeffizienten in Ordnung $\alpha(Z\alpha)^6$ zur (Ein-Photonen-)Selbstenergie für hochangeregte D - und Rydberg-Zustände mit nahezu maximalem Bahndrehimpuls zu berechnen. Dazu geben wir eine kurze Einführung in die Definition der Beiträge. Vernachlässigt man die reduzierte Masse des Systems, die allerdings später auch leicht wieder eingesetzt werden kann (siehe [35]), so ist der Selbstenergiebeitrag zur Lamb-Verschiebung gegeben durch

$$\delta E_{SE} = \frac{\alpha}{\pi} m \frac{(Z\alpha)^4}{N^3} F(NL_J, Z\alpha). \quad (1.1)$$

Dabei bezeichnet m die Masse des Elektrons und NL_J ist die spektroskopische Notation für die betrachteten Zustände. So wird zum Beispiel der Zustand mit $N = 12$, $L = 2$ und $J = \frac{1}{2}$ als $12D_{1/2}$ bezeichnet. Für den dimensionslosen F -Faktor gibt es die folgende semianalytische Entwicklung in Potenzen von α [22]

$$F(NL_J, Z\alpha) = A_{40}(NL_J) + (Z\alpha)^2 [A_{61}(NL_J) \ln((Z\alpha)^{-2}) + G_{SE}(NL_J, Z\alpha)] \quad (L \geq 0). \quad (1.2)$$

Die erste Ziffer in den Indizes der Koeffizienten steht für die Potenz von $(Z\alpha)$ und die zweite für die Potenz des Logarithmus. Den Grenzwert von G_{SE} für $Z\alpha \rightarrow 0$ bezeichnet man als A_{60} -Koeffizienten, also

$$A_{60}(NL_J) = \lim_{Z\alpha \rightarrow 0} G_{SE}(NL_J, Z\alpha). \quad (1.3)$$

Auch der F -Faktor kann in einen Hoch- und Niedrigenergie-Anteil aufgespalten werden. Der Niedrigenergie-Anteil hat nach [36] für alle von uns betrachteten Zustände in Photonen-Energie-regularisierung die folgende Gestalt:

$$F_{\text{lep}}(NL_J, Z\alpha) = -\frac{4}{3} \ln k_0 + (Z\alpha)^2 \left[A_{61} \ln \left(\frac{\epsilon}{(Z\alpha)^2 m} \right) + \frac{\mathcal{C}}{\epsilon} + \mathcal{L} \right]. \quad (1.4)$$

$\ln k_0$ bezeichnet den bekannten Bethe-Logarithmus und ϵ ist der Überlappungsparameter, den wir in Kapitel 2 erklären werden. Unsere Hauptaufgabe liegt in der Bestimmung seines relativistischen Pendans \mathcal{L} . Für die betrachteten Zustände ist der Selbstenergiebeitrag durch harte virtuelle Photonen (Hochenergieteil), den man aus [17–19] erhält, gegeben durch

$$F_{\text{hep}}(NL_J, Z\alpha) = -\frac{1}{2\kappa(2L+1)} + (Z\alpha)^2 \left[A_{61} \ln \left(\frac{m}{2\epsilon} \right) - \frac{\mathcal{C}}{\epsilon} + \mathcal{K} \right]. \quad (1.5)$$

Somit lässt sich der A_{60} Koeffizient bestimmen zu

$$A_{60} = \mathcal{K} - A_{61} \ln(2) + \mathcal{L}, \quad (1.6)$$

mit dem relativistischen Bethe Logarithmus \mathcal{L} .

1.3 Konventionen und Einheiten

Wir wollen hier einen Überblick über die wichtigsten in dieser Arbeit verwendeten Konventionen geben und beschreiben, welches Einheitensystem verwendet wird.

- Im analytischen Teil werden Heaviside-Lorentz-Einheiten verwendet, in denen man die Lichtgeschwindigkeit c , die Dirac-Konstante \hbar und die Konstante ϵ_0 gleich eins setzt ($\epsilon_0 = \hbar = c = 1$), womit nur eine einzige physikalische Dimension verbleibt. Als verbleibende Dimension wählen wir in dieser Arbeit die Länge. Die Dimension der Länge wollen wir mit λ_e bezeichnen.
- Die Ergebnisse der numerischen Rechnung werden in atomaren Einheiten angegeben.
- Griechische Indizes durchlaufen die Werte von $0 \dots 3$, lateinische Indizes die Werte $1 \dots 3$.
- Indizes von kontravarianten Vektoren werden als Superskript plaziert. Zum Beispiel ist $k^0 = \omega$ die 0-te Komponente des Vierervektors k .
- Werden griechische oder lateinische Indizes wiederholt, so gilt die Summenkonvention auch, wenn beide Indizes oben oder beide unten stehen (Beispiel $\vec{\alpha} \cdot \vec{p} = \alpha^i p^i$). Soll die Summenkonvention nicht verwendet werden, werden wir dies explizit erwähnen.
- Die Spurbildung einer Matrix wird mit dem Kürzel Tr bezeichnet.

1.3.1 Heaviside-Lorentz-Einheiten

Für den Übergang von SI zu Heaviside-Lorentz-Einheiten gehen wir vom Coulomb-Gesetz

$$F = k_0 \frac{q_1 q_2}{r^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r^2}$$

aus und wählen die Einheiten so, dass $\epsilon_0 = 1$ wird, ebenso werden auch die Einheiten der Länge und Zeit gewählt, damit $c = 1$ gilt. Schließlich wird auch die Einheit der Energie so gewählt, dass $\hbar = 1$ ist. In diesen Einheiten gilt damit

$$e^2 = \frac{e^2}{\epsilon_0 \hbar c} = 4\pi \frac{k_0 e^2}{\hbar c} = 4\pi\alpha, \text{ da } \epsilon_0 = \hbar = c = 1.$$

Wir sehen daraus, dass es sich bei der elektrischen Ladung um eine dimensionslose Größe handelt. Somit ändert sich auch das Coulomb-Potential eines Elektrons um einen Kern mit Z Protonen und nimmt die folgende Gestalt an

$$V(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{4\pi Z\alpha}{r} = -\frac{Z\alpha}{r}.$$

Die inhomogenen Maxwell-Gleichungen in kovarianter Formulierung sind in diesen Einheiten gegeben durch

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = j^\nu.$$

1.3.2 Atomare Einheiten

Die atomaren Einheiten sind, wie der Name suggeriert, ein Einheitensystem, welches in der Atomphysik zur Anwendung kommt. Sie sind so gewählt, dass sie sich an den grundlegenden Skalen der Atome orientieren, die durch das Wasserstoff-Atom gegeben sind. Ausgehend vom Gauß'schen Einheitensystem, wählt man die Elementarladung e , die Elektronenmasse m_e und die Dirac-Konstante \hbar als Einheiten. Aus ihnen ergeben sich die weiteren Einheiten:

- Als Einheit der Länge, hat man den Bohr'schen Radius a_0 .
- Als Einheit der Energie, ergibt sich die atomare Bindungsenergie $(Z\alpha)^2 m$.

Kapitel 2

Selbstenergie in Photonen-Energierregularisierung

2.1 Allgemeine Orientierung

In Appendix B.4 wird der allgemeine Ausdruck für die Wechselwirkung eines gebundenen Elektrons mit seinem eigenen Strahlungsfeld hergeleitet. In diesem Abschnitt wollen wir beschreiben, wie man diese sogenannte Selbstenergie für einen gebundenen Zustand konkret ausrechnet.

Bei einem gebundenen Zustand sind zwei Energieskalen präsent. Das ist zum einen die hochrelativistische Energieskala der virtuellen Photonen und zum anderen die nichtrelativistische des gebundenen Elektrons. Die Effekte bei höheren Photonen-Energien lassen sich mit den Mitteln der Quantenfeldtheorie gut berechnen und behandeln das Elektron als frei. Das Kernfeld sieht man dann als störendes äußeres Feld an und behandelt es mit den Methoden der Störungstheorie. Die Wechselwirkungen, die zu gebundenen Zuständen führen, lassen sich so nicht (bzw. nur in unendlicher Ordnung) nachvollziehen. Der Ausdruck für die Selbstenergie eines freien Elektrons ist sowohl ultraviolett-, als auch infrarot-divergent. Die Ultraviolett-Divergenz wird durch Renormierung beseitigt, aber die Infrarot-Divergenz verbleibt. Diese Divergenz wird aber durch die Effekte bei niedrigen Energien beseitigt. Dort muss man das Kernfeld exakt berücksichtigen, wozu man die Methoden der relativistischen Atomphysik verwendet. Sie besitzt keine Infrarot-Divergenz, weil die Energie ganz natürlich durch die atomare Bindungsenergie nach unten beschränkt ist.

Wir trennen dazu den Integrationsbereich in zwei Teile auf. Im ersten Teil berechnen wir die Energieverschiebung im niedrigenergetischen, gebundenen Bereich und im zweiten die im hochenergetischen, nahezu freien Bereich. Dazu wählen wir den sogenannten Überlappungsparameter ϵ so, dass er deutlich größer als die Energie der gebundenen Zustände ist, um alle Effekte auch hochangeregter Zustände mitzunehmen, er aber wiederum deutlich kleiner als die Masse des Elektrons ist, bei der die Hochenergie-Prozesse dominant sind. Man wählt also

$$(Z\alpha)^2 m \ll \epsilon \ll m.$$

Durch diese Wahl für ϵ überlappen sich die beiden Bereiche und eine Zusammenfassung beider Resultate zu einem Gesamtergebnis für die Korrektur wird möglich. Diese Trennung bildet gleichzeitig auch die Photonen-Energierregularisierung, denn durch die Wahl von ϵ bildet es auch gleichzeitig einen IR-Cutoff des Hochenergie-Anteils und regularisiert die dort auftretende IR-Divergenz. Dafür erhält man Terme, die von ϵ abhängen. Diese heben sich aber mit den entsprechenden Termen des Niedrigenergie-Anteils auf, so dass das Gesamtergebnis durch die atomare Bindungsskala natürlich begrenzt ist. Für die Ordnung $\alpha(Z\alpha)^4$ findet man eine Beschreibung der Rechnung in §123 von [37]. Darum werden wir uns im Folgenden auf die Terme der Ordnung $\alpha(Z\alpha)^6$ konzentrieren und die Terme niedrigerer Ordnung als gegeben ansehen.

Die IR-Divergenz im Hochenergie-Anteil lässt sich natürlich auch mit anderen Regularisierungen beseitigen, wobei man dann bis auf null herunter integriert. Die Einführung des Niedrigenergie-Anteils ist dann als Renormierung der von der Regularisierung abhängigen Terme nötig und lässt sich nicht so intuitiv als zweiter Teil des Integrals begründen. Auch für diese Niedrigenergie-Anteile bildet der Überlappungsparameter die obere Grenze, so dass sie, um diese Parameterabhängigkeit zu beseitigen, mit dem Niedrigenergie-Anteil in Photonen-Energieregularisierung verrechnet werden müssen. Wie diese Reparametrisierung funktioniert, werden wir in App. C an einem analytischen Beispiel erläutern.

Für die Berechnung des Niedrigenergie-Anteils in Photonen-Energieregularisierung führen wir eine Foldy-Wouthuysen-Transformation durch, um von der relativistischen Dirac-Gleichung zu effektiven Niedrigenergie-Operatoren und Korrekturen aufgrund des relativistischen Stroms zu kommen. Mit deren Hilfe können wir dann die zeitunabhängige Störungstheorie auf die nichtrelativistischen Wellenfunktion anwenden. Man erhält so Ausdrücke, die relativistische Korrekturen zum Bethe-Logarithmus darstellen, weswegen sie als relativistische Bethe-Logarithmen bezeichnet werden. Sie ergeben sich als Matrixelemente der effektiven Operatoren mit den Schrödinger-Wellenfunktionen, die noch über die Energie von null bis ϵ zu integrieren sind. Teile der Integrationen werden in Kapitel 3 erstmalig analytisch ausgeführt; die Radialintegration wird numerisch ausgeführt. In Kapitel 4 wird dies genauer beschrieben.

Eine Übersicht des Hochenergie-Anteils, also des Bereichs von ϵ bis ∞ , geben wir in Kapitel 5.

2.2 Foldy-Wouthuysen-Transformation für niedrigenergetische Photonen

2.2.1 Transformation des Hamiltonians

Für die Lösung der Dirac-Gleichung ist die Berechnung aller vier Komponenten des Dirac-Spinors erforderlich. Auch in vielen Näherungsverfahren für niedrige Energien sind immer noch die Lösungen negativer Energie zu berücksichtigen oder durch Konstanten zu nähern. Die Ursache dafür liegt in den α -Matrizen, die dafür sorgen, dass in Gleichungen für die oberen beiden Komponenten immer auch die beiden unteren Komponenten vorkommen. Sie mischen also in Gleichungen die oberen und unteren Komponenten eines Dirac-Spinors. Eine sehr anschauliche Methode, um diese Mischung näherungsweise zu beseitigen, bietet die Foldy-Wouthuysen-Transformation. Dabei handelt es sich um eine kanonische Transformation, bei der jeweils, bis zu einer gewissen Ordnung, der sogenannte ungerade Anteil – das ist derjenige, der zwischen oberen und unteren Komponenten mischt, also α -Matrizen enthält – wegtransformiert wird. Es verbleibt nur der sogenannte gerade Anteil, der nur Diagonalmatrizen enthält. So erhält man am Ende einen Hamiltonian, der nur auf die beiden oberen Komponenten des Dirac-Spinors wirkt, also letztlich nur auf einen Pauli-Spinor. Für freie Teilchen ist dies sogar exakt möglich, für gebundene Zustände, wie wir sie hier betrachten, ist es nur bis zu einer bestimmten Entwicklungsordnung möglich. Wir folgen dabei der Darstellung aus [38]. Wir betrachten den Dirac-Hamilton-Operator

$$\begin{aligned} H &= \beta m + \vec{\alpha} \left(\vec{p} - e\vec{A} \right) + e\phi \\ &= \beta m + \mathcal{O} + \mathcal{E}. \end{aligned} \tag{2.1}$$

Aufgrund der Abwesenheit eines äußeren Feldes setzen wir $\vec{A} = 0$. Wir definieren den ungeraden Anteil

$$\mathcal{O} = \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \tag{2.2}$$

und entsprechend den geraden Anteil

$$\mathcal{E} = e\phi = V. \tag{2.3}$$

Aus der Hermitizität von H folgt nun auch die von \mathcal{E} und \mathcal{O} . Wir wollen hier auch noch einmal die wichtigsten Eigenschaften der Matrizen $\vec{\alpha}$ und β erwähnen, da dies für die Rechnungen wichtig wird. Für β sind dies die Relationen

$$\beta = \gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

$$\beta \mathcal{E} = \mathcal{E} \beta, \quad (2.5)$$

$$\beta \mathcal{O} = -\mathcal{O} \beta \quad (2.6)$$

und für α

$$\vec{\alpha} = \gamma^0 \vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

$$\alpha^i \alpha^j = \delta^{ij} + i \epsilon^{ijk} \Sigma^k, \quad (2.8)$$

$$\alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i = 2 \delta^{ij}, \quad (2.9)$$

$$\beta \vec{\alpha} = -\vec{\alpha} \beta. \quad (2.10)$$

Desweiteren gilt

$$\Sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2} [\gamma^\mu, \gamma^\nu], \quad (2.11)$$

$$\Sigma^{\mu\nu} = -\epsilon_{\mu\nu\kappa} \Sigma^\kappa. \quad (2.12)$$

In dieser Arbeit ist der Hamilton-Operator zeitunabhängig und somit betrachten wir die Transformation nur für diesen Fall. Wir haben also

$$\frac{\partial H}{\partial t} = 0 \quad (2.13)$$

und eine unitäre Transformation U

$$|\Psi'\rangle = U|\Psi\rangle. \quad (2.14)$$

Wenden wir die Transformation auf die Dirac-Gleichung an, so erhalten wir

$$i \frac{\partial}{\partial t} U^\dagger |\Psi'\rangle = H |\Psi\rangle = H U^\dagger |\Psi'\rangle = U^\dagger i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi'\rangle. \quad (2.15)$$

Damit folgt

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi'\rangle = U H U^\dagger |\Psi'\rangle = H' |\Psi'\rangle, \quad (2.16)$$

falls

$$\frac{\partial U}{\partial t} = 0. \quad (2.17)$$

Wir müssen nun einen Ansatz für U finden, der die ungeraden Operatoren zum Verschwinden bringt. Dies ist im Allgemeinen leider nicht in allen Ordnungen möglich, sondern nur bis zu einer gewissen Ordnung eines Entwicklungsparameters. Wir benutzen den Entwicklungsparameter $(Z\alpha)$ und wählen einen Ansatz, der die ungeraden Operatoren bis zur niedrigsten Ordnung in $(Z\alpha)$ zum Verschwinden bringt. Für eine Entwicklung bietet sich dabei

$$U = e^{iS} \text{ mit } S = -i \frac{\beta}{2m} \mathcal{O} \quad (2.18)$$

an. Damit das einen unitären Operator ergibt, muss S hermitisch sein, was man aus

$$U^\dagger U = e^{-iS^\dagger} e^{iS} = 1 \quad (2.19)$$

erkennt. Es lässt sich leicht unter Verwendung der Hermitität und der Kommutatorrelationen zeigen, dass

$$S^\dagger = i \frac{\mathcal{O}^\dagger \beta^\dagger}{2m} = i \frac{\mathcal{O} \beta}{2m} = -i \frac{\beta}{2m} \mathcal{O} = S. \quad (2.20)$$

Mit diesem Ansatz können wir die Entwicklung durch Anwendung der Baker-Campbell-Hausdorff-Identität darstellen als

$$H' = e^{iS} H e^{-iS} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} {}^n[S, H] \quad (2.21)$$

mit ${}^n[S, H]$ als n -Kommutator von S und H (${}^0[S, H] = H$). Wir wollen die ungeraden Terme bis zur vierten Ordnung in $(Z\alpha)$ zum Verschwinden bringen, darum müssen wir bei den Transformationen alle Terme bis zu dieser Ordnung betrachten. Wir schreiben den ersten Kommutator einmal explizit auf, die restlichen kann man in [38] finden

$$i[S, H] = -\mathcal{O} + \frac{\beta}{2m} [\mathcal{O}, \mathcal{E}] + \frac{1}{m} \beta \mathcal{O}^2. \quad (2.22)$$

Der erste Term aus (2.22) sorgt dafür, dass der ungerade Term in (2.1) in niedrigster Ordnung gerade verschwindet. Nach der ersten Transformation erhalten wir bis zur Ordnung $(Z\alpha)^4$

$$\begin{aligned} H' &= \beta \left(m + \frac{\mathcal{O}^2}{2m} - \frac{\mathcal{O}^4}{8m^3} \right) + \mathcal{E} - \frac{1}{8m^3} [\mathcal{O}, [\mathcal{O}, \mathcal{E}]] + \frac{\beta}{2m} [\mathcal{O}, \mathcal{E}] - \frac{\mathcal{O}^3}{3m^2} \\ &= \beta m + \mathcal{E}' + \mathcal{O}'. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Die beiden ungeraden Terme in \mathcal{O}' sind von der Ordnung $(Z\alpha)^4$. Um also unseren transformierten Hamilton-Operator frei von ihnen zu machen, brauchen wir eine weitere Transformation. Wir verfahren ein weiteres Mal auf dieselbe Weise und so wählen wir diesmal

$$S' = -i \frac{\beta}{2m} \mathcal{O}' = -i \frac{\beta}{2m} \left(\frac{\beta}{2m} [\mathcal{O}, \mathcal{E}] - \frac{\mathcal{O}^3}{3m^2} \right). \quad (2.24)$$

Wir rechnen den Kommutator einmal explizit aus:

$$\begin{aligned} i[S', H'] &= -\frac{\beta}{2m} [\mathcal{O}, \mathcal{E}] + \frac{1}{8m^3} [[\mathcal{O}, \mathcal{E}], \beta \mathcal{O}^2] + \frac{1}{4m^2} [[\mathcal{O}, \mathcal{E}], \mathcal{E}] - \frac{\beta}{4m^3} [\mathcal{O}, \mathcal{E}]^2 \\ &\quad + \frac{\mathcal{O}^3}{3m^2} + \frac{\beta}{6m^3} [\mathcal{E}, \mathcal{O}^3]. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Vernachlässigt man alle Terme höherer Ordnung als $(Z\alpha)^4$ so erhält man bereits nach dieser Transformation einen Hamiltonian, der bis zu dieser Ordnung nur auf die oberen beiden Spinorkomponenten wirkt; er wird bestimmt zu

$$H_{FW} = \beta \left(m + \frac{\mathcal{O}^2}{2m} - \frac{\mathcal{O}^4}{8m^3} \right) + \mathcal{E} - \frac{1}{8m^2} [\mathcal{O}, [\mathcal{O}, \mathcal{E}]]. \quad (2.26)$$

Wir setzen nun die Definitionen (2.2) und (2.3) von \mathcal{O} und \mathcal{E} ein und berechnen den Kommutator

$$\begin{aligned} [\vec{\alpha} \cdot \vec{p}, [\vec{\alpha} \cdot \vec{p}, V]] &= [\vec{\alpha} \cdot \vec{p}, \vec{\alpha} \cdot \vec{p} V - V \vec{\alpha} \cdot \vec{p}] \\ &= [\vec{\alpha} \cdot \vec{p}, \alpha^j p^j [V]] = [\vec{\alpha} \cdot \vec{p}, -i \alpha^j \frac{Z\alpha}{r^3} r^j] \\ &= -i Z\alpha \left(\alpha^i p^i \alpha^j \frac{r^j}{r^3} - \alpha^j \frac{r^j}{r^3} \alpha^i p^i \right) \\ &= -i Z\alpha \left(\alpha^i \alpha^j p^i \frac{r^j}{r^3} - \alpha^j \alpha^i \frac{r^j}{r^3} p^i \right). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Dabei wurde die Ersetzung $p \rightarrow -i\nabla$ benutzt. Die α -Matrizen lassen sich mit Hilfe von (2.8) zusammenfassen, so dass

$$\begin{aligned}
 [\vec{\alpha} \cdot \vec{p}, [\vec{\alpha} \cdot \vec{p}, V]] &= -iZ\alpha \left(\delta^{ij} p^i \frac{r^j}{r^3} + i\epsilon^{ijk} p^i \frac{r^j}{r^3} \Sigma^k - \delta^{ji} \frac{r^j}{r^3} p^i - i\epsilon^{jik} \frac{r^j}{r^3} p^i \Sigma^k \right) \\
 &= Z\alpha \left(-4\pi\delta(\vec{r}) + \epsilon^{ijk} p^i \frac{r^j}{r^3} \Sigma^k - \epsilon^{jik} \frac{r^j}{r^3} p^i \Sigma^k \right) \\
 &= Z\alpha \left(-4\pi\delta(\vec{r}) - \frac{2}{r^3} \epsilon^{kji} \Sigma^k r^j p^i \right) \\
 &= -Z\alpha 4\pi\delta(\vec{r}) - \frac{2Z\alpha}{r^3} (\vec{\Sigma} \cdot \vec{L})
 \end{aligned} \tag{2.28}$$

gilt, wobei wir

$$p^i V = p^i [V] + V p^i, \tag{2.29}$$

$$\nabla^i \frac{r^i}{r^3} = 4\pi\delta(\vec{r}) \tag{2.30}$$

und die totale Antisymmetrie des ϵ -Tensors verwendet haben. Für den Foldy-Wouthuysen-transformierten Hamiltonian erhalten wir in Übereinstimmung mit [21] das Ergebnis

$$H_{FW} = \gamma^0 \left(m + \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{(\vec{p}^2)^2}{8m^3} \right) + V + \frac{\pi Z\alpha}{2m^2} \delta(\vec{r}) + \frac{Z\alpha}{4m^2 r^3} \vec{\Sigma} \cdot \vec{L}. \tag{2.31}$$

2.2.2 Transformation des Stroms

Bei der Foldy-Wouthuysen Transformation des Niedrigenergie-Anteils der Selbstenergie (2.84) müssen auch die relativistischen Ströme

$$y^j = \alpha^j \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \tag{2.32}$$

transformiert werden. Dabei verhalten sie sich genauso wie der Hamiltonian, es gilt also

$$y_{FW}^j = U y^j U^{-1} = e^{iS} y^j e^{-iS}. \tag{2.33}$$

Wir benutzen (2.21), wobei nun H gegen y^j ausgetauscht wird. Auch hier wollen wir eine Entwicklung in Potenzen von $(Z\alpha)$ vornehmen. Dazu betrachten wir die Ordnungen von $(Z\alpha)$ bei \vec{k} ($\mathcal{O}((Z\alpha)^2)$) und \vec{r} ($\mathcal{O}((Z\alpha)^{-1})$). Praktischerweise stellt damit die Entwicklung der Exponentialfunktion nach ihrem Argument eine Entwicklung in $(Z\alpha)$ dar. Wir erhalten also

$$y_0^j = \alpha^j \tag{2.34}$$

$$y_1^j = \alpha^j (i\vec{k} \cdot \vec{r}) \tag{2.35}$$

$$y_2^j = \alpha^j \frac{1}{2} (i\vec{k} \cdot \vec{r})^2. \tag{2.36}$$

Der y_3^j -Term ist zwar von der Ordnung $(Z\alpha)^4$, ist aber nicht relevant, weil er ungerade ist und später alle ungeraden Stromterme vernachlässigt werden. Wir berechnen nun die y^j nach der ersten FW-Transformation mit

$$S = -i\beta \frac{\mathcal{O}}{2m} = -i\gamma^0 \frac{\vec{\alpha} \cdot \vec{p}}{2m}. \tag{2.37}$$

Es ergibt sich

$$i[S, \alpha^j] = \frac{\gamma^0}{m} p^j \quad (2.38)$$

$$-\frac{1}{2}[S, [S, \alpha^j]] = -\frac{1}{2m^2}(p^j \vec{\alpha} \cdot \vec{p}) \quad (2.39)$$

$$-\frac{i}{6}[S, [S, [S, \alpha^j]]] = -\frac{\gamma^0}{6m^3}(p^j \vec{p}^2), \quad (2.40)$$

woraus

$$y'_0 = \alpha^j + \frac{\gamma^0}{m} p^j - \frac{1}{2m^2} p^j (\vec{\alpha} \cdot \vec{p}) - \frac{\gamma^0}{6m^3} (p^j \vec{p}^2) \quad (2.41)$$

folgt. Für die zweite Transformation verwenden wir

$$S' = -i \frac{\gamma^0}{2m} \left(\frac{\gamma^0}{2m} [\vec{\alpha} \cdot \vec{p}, V] - \frac{(\vec{\alpha} \cdot \vec{p})^3}{3m^2} \right) \quad (2.42)$$

und

$$y'' = y' + i[S', y'] + \text{Terme höherer Ordnung.} \quad (2.43)$$

Bei der Berechnung des Kommutators ist nur der α^j -Term von y'_0 zu berücksichtigen, da alle anderen Terme von höherer Ordnung sind. Somit bestimmen wir den Kommutator zu

$$\begin{aligned} i[S', y'_0] &= i[S', \alpha^j] = \left[\left(\frac{1}{4m^2} [\vec{\alpha} \cdot \vec{p}, V] - \frac{\gamma^0 (\vec{\alpha} \cdot \vec{p})^3}{6m^3} \right), \alpha^j \right] \\ &= \frac{1}{2m^2} ([p^j, V] - \alpha^j [\vec{\alpha} \cdot \vec{p}, V]) - \frac{1}{3m^3} (p^j \vec{p}^2). \end{aligned} \quad (2.44)$$

Wir setzen (2.44) und (2.41) in (2.43) ein und erhalten als Ergebnis

$$\begin{aligned} y_{0,FW}^j &= \alpha^j + \gamma^0 \left(\frac{p^j}{m} - \frac{1}{2m^3} (p^j \vec{p}^2) \right) - \frac{1}{2m^2} p^j (\vec{\alpha} \cdot \vec{p}) \\ &\quad - \frac{1}{2m^2} \alpha^j [\vec{\alpha} \cdot \vec{p}, V] + \frac{1}{2m^2} [p^j, V]. \end{aligned} \quad (2.45)$$

Für die Terme y_1^j und y_2^j ist jeweils nur der Kommutator mit S zu berechnen, da alle anderen von zu hoher Ordnung sind. Somit ist bei der zweiten Transformation in (2.43) nur der y' -Term relevant. Für y' errechnen wir also

$$\begin{aligned} y_{1,FW}^j &= y_1^j + i[S, y_1^j] = \alpha^j (i\vec{k} \cdot \vec{r}) + i \left[-i \frac{\beta}{2m} \vec{\alpha} \cdot \vec{p}, \alpha^j (i\vec{k} \cdot \vec{r}) \right] \\ &= \alpha^j (i\vec{k} \cdot \vec{r}) + \frac{\beta}{2m} \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \alpha^j (i\vec{k} \cdot \vec{r}) - \alpha^j (i\vec{k} \cdot \vec{r}) \frac{\beta}{2m} \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \\ &= \alpha^j (i\vec{k} \cdot \vec{r}) + \frac{i\beta}{2m} \left(\vec{\alpha} \cdot \vec{p} \alpha^j (\vec{k} \cdot \vec{r}) + \alpha^j (\vec{k} \cdot \vec{r}) \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \right). \end{aligned} \quad (2.46)$$

Aus (2.9) leiten wir die Beziehung $\alpha^i \alpha^j = 2\delta^{ij} - \alpha^j \alpha^i$ ab, welche wir nun in (2.46) einsetzen und so

$$\begin{aligned} y_{1,FW}^j &= \alpha^j (i\vec{k} \cdot \vec{r}) + \frac{i\beta}{2m} \left(2\delta^{ij} p^i (\vec{k} \cdot \vec{r}) - \alpha^j \alpha^i p^i (\vec{k} \cdot \vec{r}) + \alpha^j (\vec{k} \cdot \vec{r}) (\alpha^i p^i) \right) \\ &= \alpha^j (i\vec{k} \cdot \vec{r}) + \frac{i\beta}{2m} \left(-\alpha^j [\vec{\alpha} \cdot \vec{p}, \vec{k} \cdot \vec{r}] + 2p^j (\vec{k} \cdot \vec{r}) \right) \end{aligned} \quad (2.47)$$

bekommen. Wir verwenden zur weiteren Vereinfachung, wo dies möglich ist, die Ersetzung $p \rightarrow -i\nabla$. Damit erhalten wir nun

$$y_{1,FW}^j = \alpha^j (i\vec{k} \cdot \vec{r}) + \frac{i\beta}{2m} \left(-\alpha^j [\vec{\alpha} \cdot \vec{p}, \vec{k} \cdot \vec{r}] + 2(\vec{k} \cdot \vec{r}) p^j - 2i k^j \right). \quad (2.48)$$

Wir verfahren bei y_2^j analog und berechnen

$$\begin{aligned}
y_{2,FW}^j &= -\frac{\alpha^j}{2}(\vec{k} \cdot \vec{r})^2 + i[S, y_2^j] \\
&= -\frac{\alpha^j}{2}(\vec{k} \cdot \vec{r})^2 - \frac{1}{4m} \left(\beta \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \alpha^j (\vec{k} \cdot \vec{r})^2 - \alpha^j (\vec{k} \cdot \vec{r})^2 \beta \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \right) \\
&= -\frac{\alpha^j}{2}(\vec{k} \cdot \vec{r})^2 - \frac{\beta}{4m} \left(\alpha^i p^i \alpha^j (\vec{k} \cdot \vec{r})^2 + \alpha^j (\vec{k} \cdot \vec{r})^2 \alpha^i p^i \right) \\
&= -\frac{\alpha^j}{2}(\vec{k} \cdot \vec{r})^2 - \frac{\beta}{4m} \left(2\delta^{ij} p^i (\vec{k} \cdot \vec{r})^2 - \alpha^j \vec{\alpha} \cdot \vec{p} (\vec{k} \cdot \vec{r})^2 + \alpha^j (\vec{k} \cdot \vec{r})^2 \vec{\alpha} \cdot \vec{p} \right) \\
&= -\frac{\alpha^j}{2}(\vec{k} \cdot \vec{r})^2 - \frac{\beta}{4m} \left(2p^j (\vec{k} \cdot \vec{r})^2 - \alpha^j [\vec{\alpha} \cdot \vec{p}, (\vec{k} \cdot \vec{r})^2] \right).
\end{aligned} \tag{2.49}$$

Nach einer weiteren kleinen Umformung erhalten wir als Resultat

$$y_{2,FW}^j = -\frac{\alpha^j}{2}(\vec{k} \cdot \vec{r})^2 - \frac{\beta}{4m} \left(2(\vec{k} \cdot \vec{r})^2 p^j + 2[p^j, (\vec{k} \cdot \vec{r})^2] - \alpha^j [\vec{\alpha} \cdot \vec{p}, (\vec{k} \cdot \vec{r})^2] \right). \tag{2.50}$$

Im Folgenden werden wir die ungeraden Terme dieser Ausdrücke vernachlässigen. Da wir nur mit den oberen Komponenten rechnen, sind sie nicht relevant. Um die endgültige Form von y_{FW} zu bestimmen, müssen noch die Produkte der α^j -Matrizen mit den Kommutatoren ausgewertet werden. Wir beginnen mit

$$\begin{aligned}
\alpha^j [\vec{\alpha} \cdot \vec{p}, V] &= \alpha^j \alpha^i p^i V - \alpha^j V \alpha^i p^i \\
&= p^i \delta^{ji} V + i\epsilon^{jik} p^i V \Sigma^k - V p^i \delta^{ji} - i\epsilon^{jik} V p^i \Sigma^k \\
&= [p^j, V] + i\epsilon^{jik} p^i [V] \Sigma^k,
\end{aligned} \tag{2.51}$$

wobei im zweiten Schritt Relation (2.8) und im Schritt danach (2.29) ausgenutzt wird. Bekanntlich gilt:

$$p^i [V] = -i\nabla^i \left[-\frac{Z\alpha}{r} \right] = -i\frac{Z\alpha}{r^3} \vec{r}. \tag{2.52}$$

Wenden wir nun dies und die Definition des Kreuzproduktes über den ϵ -Tensor an, so erhalten wir

$$\alpha^j [\vec{\alpha} \cdot \vec{p}, V] = [p^j, V] + \frac{Z\alpha}{r^3} \left(\vec{r} \times \vec{\Sigma} \right)^j. \tag{2.53}$$

Die weiteren Kommutatoren werden analog berechnet; dazu geben wir die Rechnung ohne erklärende Kommentare an. Sie sind

$$\begin{aligned}
\alpha^j [\vec{\alpha} \cdot \vec{p}, \vec{k} \cdot \vec{r}] &= \alpha^j \alpha^i p^i (\vec{k} \cdot \vec{r}) - \alpha^j (\vec{k} \cdot \vec{r}) \alpha^i p^i \\
&= \delta^{ji} p^i [\vec{k} \cdot \vec{r}] + i\epsilon^{jik} p^i [\vec{k} \cdot \vec{r}] \Sigma^k \\
&= -ik^j + \epsilon^{jik} k^i \Sigma^k = -ik^j + \left(\vec{k} \times \vec{\Sigma} \right)^j
\end{aligned} \tag{2.54}$$

und

$$\begin{aligned}
\alpha^j [\vec{\alpha} \cdot \vec{p}, (\vec{k} \cdot \vec{r})^2] &= \alpha^j \alpha^i p^i (\vec{k} \cdot \vec{r})^2 - \alpha^j (\vec{k} \cdot \vec{r})^2 \alpha^i p^i \\
&= \delta^{ji} p^i (\vec{k} \cdot \vec{r})^2 + i\epsilon^{jik} p^i [(\vec{k} \cdot \vec{r})^2] \Sigma^k - (\vec{k} \cdot \vec{r})^2 \delta^{ji} p^i \\
&= [p^j, (\vec{k} \cdot \vec{r})^2] + 2\epsilon^{jik} (\vec{k} \cdot \vec{r}) k^i \Sigma^k \\
&= [p^j, (\vec{k} \cdot \vec{r})^2] + 2(\vec{k} \cdot \vec{r}) \left(\vec{k} \times \vec{\Sigma} \right)^j.
\end{aligned} \tag{2.55}$$

Wie durch Weglassen der ungeraden Terme angedeutet, beschränken wir unsere Rechnung auf die oberen Anteile der Dirac-Matrizen unserer Spinoren; es geht also $\gamma^0 \rightarrow 1$ und $\vec{\Sigma} \rightarrow \vec{\sigma}$ über. Als Ergebnis für die $y_{i,FW}^j$ bekommen wir

$$y_{0,FW}^j = \left(\frac{p^j}{m} - \frac{1}{2m^3} p^j \vec{p}^2 \right) - \frac{1}{2m^2} \frac{Z\alpha}{r^3} (\vec{r} \times \vec{\sigma})^j, \quad (2.56a)$$

$$y_{1,FW}^j = -\frac{i}{2m} (\vec{k} \times \vec{\sigma})^j + \frac{i}{m} (\vec{k} \cdot \vec{r}) p^j + \frac{k^j}{2m}, \quad (2.56b)$$

$$y_{2,FW}^j = -\frac{1}{2m} (\vec{k} \cdot \vec{r})^2 p^j + \frac{1}{2m} (\vec{k} \cdot \vec{r}) (\vec{k} \times \vec{\sigma})^j + \frac{1}{2m} [p^j, (\vec{k} \cdot \vec{r})^2]. \quad (2.56c)$$

Manche dieser Terme liefern allerdings keinen Beitrag zur Lamb-Verschiebung. So gibt zum Beispiel der erste Term in (2.56b) die magnetische Wechselwirkung an, die aber nicht zur Energieverschiebung beiträgt [25].

2.2.3 Alternative Herleitung

Der eben berechnete korrigierte Strom lässt sich auch über eine andere Methode direkt aus dem Foldy-Wouthuysen-transformierten Hamiltonian bestimmen. Dazu transformiert man den effektiven Hamiltonian (B.37) anstatt des einfacheren Dirac-Hamiltonians (2.1) und berücksichtigt explizite Zeitabhängigkeiten. Ausgehend von dem so transformierten Hamiltonian, der als Gl.(2.9b) in [25] zu finden ist, vernachlässigen wir die Formfaktoren und Terme, die diese enthalten. Wir gehen erneut bis zur Ordnung $(Z\alpha)^4$, was auf den folgenden Hamiltonian führt

$$\begin{aligned} H_{FW}^m &= \frac{(\vec{p} - e\vec{A})^2}{2m} + V - \frac{e}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} - \frac{(\vec{p} - e\vec{A})^4}{8m^3} + \frac{1}{8m^2} \vec{\nabla}^2 V \\ &+ \frac{e}{8m^2} \frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \frac{e}{8m^2} \left[\vec{\sigma} \cdot (\vec{\nabla} V \times \vec{p}) - \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} \times \vec{\nabla} V) \right] \\ &+ \frac{e}{4m^2} \vec{\sigma} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial t} \vec{A} \times \vec{p} \right) - \frac{e}{4m^2} \vec{\sigma} \cdot (\vec{\nabla} V \times \vec{A}) + \dots \end{aligned} \quad (2.57)$$

Durch Setzen von $\vec{A} = 0$ erhält man hieraus wieder (2.31). Damit können wir die Terme linear in \vec{A} über die Beziehung $H_{\text{int}} = -e\vec{j} \cdot \vec{A}$ mit dem relativistischen Strom in Verbindung bringen und aus dem Hamiltonian extrahieren. Diesen Wechselwirkungs-Hamiltonian erhalten wir zu

$$\begin{aligned} H_{\text{int}} &= -\frac{e\vec{A} \cdot \vec{p}}{m} - \frac{e}{2m} \vec{\sigma} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{A}) - \frac{e\vec{A} \cdot \vec{p}\vec{p}^2}{2m^3} + \frac{e}{4m^2} \vec{\sigma} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial t} \vec{A} \times \vec{p} \right) - \frac{e}{4m^2} \vec{\sigma} \cdot (\vec{\nabla} V \times \vec{A}) \\ &= -\frac{e\vec{A} \cdot \vec{p}}{m} - \frac{e}{2m} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla}) \cdot \vec{A} - e \frac{\vec{A} \cdot \vec{p}\vec{p}^2}{2m^3} - \frac{e}{4m^2} (\vec{\sigma} \times \vec{p}) \cdot \frac{\partial}{\partial t} \vec{A} - \frac{e}{4m^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V) \cdot \vec{A} \\ &= -e\vec{j} \cdot \vec{A}, \end{aligned} \quad (2.58)$$

wobei zu beachten ist, dass wir in Coulomb-Eichung arbeiten, wo $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ gilt. Der Strom ist dabei im Impulsraum gegeben. Beim Vernichter-Anteil von \vec{A} gilt für die Wirkung des ∇ -Operators $\vec{\nabla} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) = i\vec{k} \vec{\nabla} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$. Weiterhin entwickeln wir $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ bis zur relativen Ordnung $(Z\alpha)^2$, so dass wir insgesamt auf $(Z\alpha)^6$ kommen. Dies führt auf den Strom

$$\begin{aligned} \delta j^j &= \frac{p^j}{m} \left(1 + i\vec{k} \cdot \vec{r} - \frac{1}{2} (\vec{k} \cdot \vec{r})^2 \right) + \frac{i}{2m} (\vec{\sigma} \times \vec{k})^j \left(1 + i\vec{k} \cdot \vec{r} \right) \\ &- \frac{p^j \vec{p}^2}{2m^3} - \frac{i\omega}{4m^2} (\vec{\sigma} \times \vec{p})^j - \frac{1}{4m^2} \frac{Z\alpha}{r^3} (\vec{r} \times \vec{\sigma})^j. \end{aligned} \quad (2.59)$$

Im Vergleich zu dem im letzten Abschnitt erhaltenen Ergebnis

$$\begin{aligned} \delta j^j &= \frac{p^j}{m} \left(1 + i\vec{k} \cdot \vec{r} - \frac{1}{2}(\vec{k} \cdot \vec{r})^2 \right) + \frac{i}{2m} \left(\vec{\sigma} \times \vec{k} \right)^j \left(1 + i\vec{k} \cdot \vec{r} \right) \\ &\quad - \frac{p^j \vec{p}^2}{2m^3} - \frac{1}{2m^2} \frac{Z\alpha}{r^3} (\vec{r} \times \vec{\sigma})^j \end{aligned} \quad (2.60)$$

zeigt sich ein Unterschied. Es lässt sich aber zeigen, dass beide Ströme, wie gewünscht, äquivalent sind. Dazu betrachten wir

$$\langle \phi | -\frac{i}{4m^2} (\vec{\sigma} \times \vec{p}) \omega = \langle \phi | -\frac{i}{4m^2} (\vec{\sigma} \times \vec{p}) [(H_S - E_S + \omega) - (H_S - E_S)]. \quad (2.61)$$

Der Term mit $(H_S - E_S + \omega)$ trägt dabei nicht zum endlichen Teil des Niedrigenergie-Anteils bei (siehe Kap. 3.4). Somit haben wir

$$\begin{aligned} \langle \phi | \frac{i}{4m^2} (\vec{\sigma} \times \vec{p}) (H_S - E_S) &= \langle \phi | \frac{i}{4m^2} (\vec{\sigma} \times [\vec{p}, (H_S - E_S)]) \\ &= \langle \phi | \frac{1}{4m^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V) \\ &= \langle \phi | \frac{Z\alpha}{4m^2 r^3} (\vec{\sigma} \times \vec{r}) . \end{aligned} \quad (2.62)$$

Er lässt sich damit mit dem letzten Term von (2.59) zusammenfassen. Eine etwas ausführlichere Erklärung einer ähnlichen Rechnung findet man in Kap. 3.4 zum $(\vec{k} \cdot \vec{r})\vec{k} \times \vec{\sigma}$ -Matrixelement, das sich auch mit dem $\vec{r} \times \vec{\sigma}$ -Term verrechnen lässt. Der Term nur mit $\vec{k} \times \vec{\sigma}$ trägt zur Lamb-Verschiebung nicht bei. Nehmen wir auch dieses Ergebnis gleich schon vorweg, so erhalten wir für den transformierten, relativistischen Strom das konsistente und einfache Resultat

$$\delta j^j = \frac{p^j}{m} \left(1 + i\vec{k} \cdot \vec{r} - \frac{1}{2}(\vec{k} \cdot \vec{r})^2 \right) - \frac{p^j \vec{p}^2}{2m^3} - \frac{1}{4m^2} \frac{Z\alpha}{r^3} (\vec{r} \times \vec{\sigma})^j . \quad (2.63)$$

2.3 Photonen-Energieregularisierung

Die Selbstenergie erhält man in Ein-Schleifen-Rechnung (B.33) zu

$$\delta E_{SE} = ie^2 \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} D_{\mu\nu}(k) \langle \bar{\psi} | \gamma^\mu \frac{1}{\not{p} - \not{k} - m - \gamma^0 V} \gamma^\nu | \psi \rangle - \langle \bar{\psi} | \delta m | \psi \rangle . \quad (2.64)$$

Dabei haben wir kein eindimensionales Integral vor uns, bei dem man einfach den Integrationsbereich trennen kann, vielmehr handelt es sich um ein vierdimensionales, komplexes Integral. Wir müssen also den Integrationsweg so wählen, dass eine Trennung in Hoch- und Niedrigenergie-Anteil möglich wird, aber alle Pole des Integranden richtig mitgenommen werden. Das Vorgehen werden wir darum nun kurz beschreiben.

Dazu ersetzen wir zuerst den Dirac-Coulomb-Propagator

$$S_F^V = \frac{1}{\not{p} - \not{k} - m - \gamma^0 V}$$

wegen

$$\hat{E} | \psi \rangle = i \frac{\partial | \psi \rangle}{\partial t} = E_\psi | \psi \rangle$$

in (2.64) durch

$$S_F^V \rightarrow \frac{1}{\gamma^0(E_\psi - \omega) - \vec{\gamma} \cdot \vec{p} - m - \gamma^0 V} = S_F^V(E_\psi - \omega) .$$

Diesen können wir nach einer Fourier-Transformation schreiben als

$$S_F^V(E - \omega) = \sum_n^f \frac{|\psi_n\rangle \langle \bar{\psi}|}{(E_\psi - \omega) - E_n(1 - i\eta)}.$$

Durch diese Darstellung können wir die Pole des Propagators schnell finden und mit

$$(E_\psi - \omega) - E_n(1 - i\eta) = 0 \quad \text{oder} \quad \omega = E_\psi - E_n(1 - i\eta)$$

angeben. Die Pole des diskreten Spektrums liegen oberhalb der reellen Achse, weswegen sie für unsere Rechnung nicht von Belang sind. Abgesehen davon existieren Energieeigenwerte E_n für $E_n > m$ und $E_n < -m$, wobei hier $E_\psi < m$ und $E_\psi \approx m$ ist. Betrachtet man die Pole als Funktion von ω , so findet man sie bei

$$\text{Re}(\omega) < 0, \text{Im}(\omega) = i\eta \equiv E_n > 0, \quad (2.65)$$

sowie

$$\text{Re}(\omega) > 2m, \text{Im}(\omega) = -i\eta \equiv E_n < 0. \quad (2.66)$$

Wir können hieraus erkennen, dass die Pole für $\omega > 2m$ unter die reelle Achse gedrückt werden, während die Pole mit $\omega < 0$ leicht darüber gedrückt werden. Weiterhin tragen auch die Pole des Photonen-Propagators dazu bei. Wir finden sie, indem wir erstmal den Propagator in Feynman-Eichung betrachten

$$D_{\mu\nu}(k) = -\frac{g_{\mu\nu}}{k^2 + i\eta} = -\frac{g_{\mu\nu}}{\omega^2 - \vec{k}^2 + i\eta}.$$

Um die Pole besser zu sehen, benutzen wir

$$\frac{1}{\omega^2 - \vec{k}^2 + i\eta} = \frac{1}{(\omega - |\vec{k}| + i\eta)(\omega + |\vec{k}| - i\eta)}.$$

Sie liegen also bei

$$\omega = |\vec{k}| - i\eta \quad \text{und} \quad \omega = -|\vec{k}| + i\eta.$$

Diese Pole befinden sich daher für $\text{Re}(\omega) > 0$ leicht unterhalb der reellen Achse und für $\text{Re}(\omega) < 0$ leicht darüber.

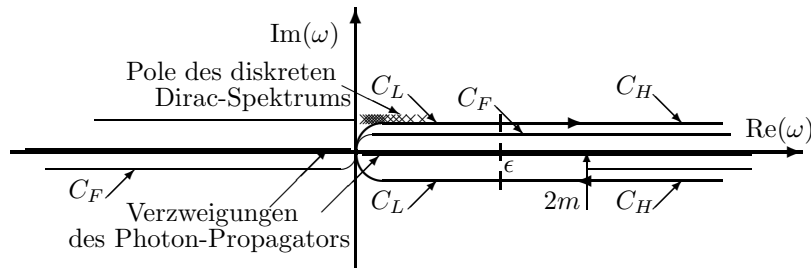


Abbildung 2.1: Integrationswege für die ω -Integration

Wir integrieren entlang des Feynman-Weges C_F , wobei wir die Lage der Polstellen berücksichtigen. Um diesen durch einen Halbkreis in der komplexen Ebene schließen zu können, muss erst gewährleistet sein, dass das Integral insgesamt wie k^{-2} abfällt. Dazu betrachten wir die einzelnen Beiträge. Das Matrixelement \hat{P} verhält sich für große k wie k^{-1} , der regularisierte Propagator wie k^{-4} und d^4k wie k^3 . Somit verhält sich das Integral, wie gewünscht. Der Beitrag

des Kreisbogens liefert nochmal ein k . Das Integral fällt damit mit k^{-1} ab und verschwindet für große k .

Den Feynman-Weg biegen wir nun um zur modifizierten Kontour $C_L + C_H$, wobei wir keine Residuen auslassen. Wir schliessen C_L durch Hinzunahme eines Verbindungsweiges bei $\text{Re}(\omega) = \epsilon$, was sicherlich möglich ist, da C infinitesimal ober- bzw. unterhalb der reellen Achse verläuft. Dadurch können wir den Hochenergie- und den Niedrigenergie-Anteil wie folgt definieren:

$$E_H = ie^2 \int_{C_H} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} D_{\mu\nu} \langle \bar{\psi} | \gamma^\mu \frac{1}{\not{p} - \not{k} - m - \gamma^0 V} \gamma^\nu | \psi \rangle - \langle \bar{\psi} | \delta m | \psi \rangle \quad (2.67)$$

$$E_L = ie^2 \int_{C_L} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} D_{\mu\nu} \langle \bar{\psi} | \gamma^\mu \frac{1}{\not{p} - \not{k} - m - \gamma^0 V} \gamma^\nu | \psi \rangle. \quad (2.68)$$

Man sieht hier, dass nur im Hochenergie-Anteil eine Renormierung notwendig ist. Der Selbstenergiebeitrag zur Lamb-Verschiebung ist damit als Summe der beiden gegeben

$$\delta E_{SE} = E_L + E_H. \quad (2.69)$$

Wie bei allen Trennungsmethoden darf der Überlappparameter am Ende in keiner physikalischen Observablen auftauchen, also muss δE_{SE} unabhängig von ihm sein. Allerdings ist es die Summe zweier Funktionen in Abhängigkeit von $Z\alpha$ und dem Parameter ϵ . Es muss also gelten

$$\delta E_{SE}(Z\alpha) = E_L(Z\alpha, \epsilon) + E_H(Z\alpha, \epsilon) \quad (2.70)$$

Betrachtet man eine bestimmte Ordnung in $Z\alpha$, so darf das Ergebnis von δE_{SE} in dieser Ordnung nicht von ϵ abhängen. Allerdings gilt das nicht für die einzelnen Beiträge von E_L und E_H in dieser Ordnung, die wir deshalb nach ϵ entwickeln. Da aber ihre Summe nicht von ϵ abhängen darf, müssen sich alle Koeffizienten, außer dem von ϵ^0 , gerade herausheben.

2.4 Der Niedrigenergie-Anteil der Selbstenergie

Wir wollen den Ausdruck für den Niedrigenergie-Anteil in eine für unsere Rechnungen günstigere Form bringen. Wir beginnen mit dem allgemeinen Ausdruck für den Niedrigenergie-Anteil

$$E_L = ie^2 \int_{C_L} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} D_{\mu\nu} \langle \bar{\psi} | \gamma^\mu \frac{1}{\not{p} - \not{k} - m - \gamma^0 V} \gamma^\nu | \psi \rangle. \quad (2.71)$$

Zum Umformen nutzen wir die Beziehung

$$A \frac{1}{B} C = \frac{1}{C^{-1} B A^{-1}} \quad (2.72)$$

sowie die durch Differenzieren zu beweisende Formel

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \not{p} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \gamma^0 \omega = \not{p} - \not{k}. \quad (2.73)$$

Zur Vereinfachung definieren wir noch $\alpha^0 = \gamma^0 \gamma^0 = \text{Id}$ (es ist zu beachten, dass dies nicht im Sinne eines Lorentz-Index zu verstehen ist). Wir gehen von

$$\begin{aligned} \tilde{P}_{\mu\nu} &= \langle \bar{\psi} | \gamma^\mu \frac{1}{\not{p} - \not{k} - m - \gamma^0 V} \gamma^\nu | \psi \rangle \\ &= \langle \bar{\psi} | \gamma^\mu \frac{1}{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} (\not{p} - \gamma^0 \omega - \gamma^0 V - m) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}} \gamma^\nu | \psi \rangle \\ &= \langle \psi^+ | \gamma^0 \gamma^\mu e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \frac{1}{\gamma^0 (E_\psi - \omega) - \vec{\gamma} \cdot \vec{p} - \gamma^0 V - m} \gamma^\nu e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \psi \rangle \\ &= \langle \psi^+ | \alpha^\mu e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \frac{1}{(E_\psi - \omega) - \vec{\alpha} \cdot \vec{p} - V - \gamma^0 m} \alpha^\nu e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \psi \rangle \end{aligned} \quad (2.74)$$

aus und erhalten schließlich

$$\tilde{P}_{\mu\nu} = \langle \psi^+ | \alpha^\mu e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \frac{1}{(E_\psi - \omega) - H_D} \alpha^\nu e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \psi \rangle. \quad (2.75)$$

Als nächstes setzen wir nun den Photonen-Propagator in Coulomb-Eichung ein; dieser hat nach [21] die folgende Gestalt

$$\begin{aligned} D_{00} &= \frac{1}{\vec{k}^2}, \\ D_{0i} &= D_{i0} = 0, \\ D_{ij} &= \frac{1}{k^2} \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) = \frac{1}{k^2} \delta_{ij}^T. \end{aligned} \quad (2.76)$$

Zuerst wollen wir uns mit dem durch das D_{00} -Element hervorgerufenen Anteil

$$\begin{aligned} \delta E_{L,00} &= ie^2 \int_{C_L} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} D_{00}(k) \langle \bar{\psi} | \gamma^0 \frac{1}{\not{p} - \not{k} - m - \gamma^0 V} \gamma^\nu | \psi \rangle \\ &= ie^2 \int_{C_L} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \frac{1}{\vec{k}^2} \langle \psi^+ | \alpha^0 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \frac{1}{E_\psi - \omega - H_D} \alpha^0 e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \psi \rangle \end{aligned} \quad (2.77)$$

beschäftigen. Wir erinnern uns an die Definition $\alpha^0 = 1$ und verwenden noch

$$\langle \vec{r}_1 | \frac{1}{E - \omega - H_D} | \vec{r}_2 \rangle = \sum_n \frac{\psi_n(\vec{r}_1) \psi_n^+(\vec{r}_2)}{E - \omega - E_n(1 - i\eta)} = \frac{|\psi_n\rangle \langle \psi_n|}{E - \omega - E_n(1 - i\eta)}. \quad (2.78)$$

Dies eingesetzt liefert

$$\delta E_{L,00} = ie^2 \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int_{C_L} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{\vec{k}^2} \langle \psi^+ | \frac{|\psi_n\rangle \langle \psi_n|}{E_\psi - \omega - E_n(1 - i\eta)} | \psi \rangle. \quad (2.79)$$

Nach Wahl der Integrationskontour C_L ist dort $\omega > 0$. Somit können nach (2.66) nur die Pole des Elektronen-Propagators mit $E_n < 0$ beitragen. Für genügend kleines ϵ hat dann $\delta E_{L,00}$ in C_L keinen Pol und ist damit analytisch. Dementsprechend verschwindet das Integral über die geschlossene Kurve C_L für $\epsilon \rightarrow 0$ und trägt nicht bei.

Wegen $D_{0i} = D_{i0} = 0$ bleibt nur noch der von D_{ij} herrührende Anteil übrig. Mit $k^2 = \omega^2 - \vec{k}^2$ ergibt sich

$$E_L = -ie^2 \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int_{C_L} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{\omega^2 - \vec{k}^2} \delta_{ij}^T \tilde{P}^{ij}(\omega), \quad (2.80)$$

wobei \tilde{P}^{ij} nach (2.75) gegeben ist durch

$$\tilde{P}_{ij} = \langle \psi | \alpha^i e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \frac{1}{H_D - (E_\psi - \omega)} \alpha^j e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \psi \rangle. \quad (2.81)$$

Dies ist analytisch innerhalb von C_L , weil $(E - \omega)$ wegen $\omega < \epsilon$ ($\omega \ll m E$) dort nicht null wird. In diesem Fall ist es der Photonen-Propagator, der einen Beitrag liefert, denn

$$\frac{1}{\omega^2 - \vec{k}^2 + i\eta} = \frac{1}{(\omega - |\vec{k}| + i\eta)(\omega + |\vec{k}| - i\eta)}$$

hat einen Pol bei $\omega = |\vec{k}| - i\eta$. Das Residuum ist somit $-\frac{2\pi i}{2|\vec{k}|}$, womit sich

$$\begin{aligned} E_L &= -ie^2 \int_{|\vec{k}| < \epsilon} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2\pi} (-2\pi i) \frac{1}{2|\vec{k}|} \delta_{ij}^T \tilde{P}^{ij}(\omega) \\ &= -e^2 \int_{|\vec{k}| < \epsilon} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2|\vec{k}|} \delta_{ij}^T \tilde{P}^{ij}(\omega) \\ &= -e^2 \int_{|\vec{k}| < \epsilon} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3 2|\vec{k}|} \delta_{ij}^T \langle \psi^+ | \alpha^i e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \frac{1}{H_D - (E_\psi - \omega)} \alpha^j e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \psi \rangle \end{aligned} \quad (2.82)$$

ergibt. Dabei gilt

$$\omega = |\vec{k}|. \quad (2.83)$$

Im Niedrigenergie-Anteil wird darum ω mit $|\vec{k}|$ identifiziert.

Im Matrixelement \tilde{P}_{ij} steht die Wellenfunktion ψ für einen Dirac-Spinor. Wir erinnern uns an den in Abschnitt 2.2 beschriebenen Formalismus, der es uns erlaubt, nach der Transformation bis zu einer gewissen Ordnung in $(Z\alpha)$ mit Pauli-Spinoren zu rechnen. Um dies zu erreichen, wenden wir nun die unitäre Transformation auf das Matrixelement an. Es ist zu beachten, dass es sich eigentlich um zwei hintereinander ausgeführte Transformationen U und U' handelt, deren Produkt $U_{FW} = UU'$ wir hier vereinfacht als U schreiben. Unter Verwendung von (2.72) gilt

$$\begin{aligned} \tilde{P}^{ij} &= \langle \psi^\dagger | \alpha^i e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \frac{1}{H_D - (E_\psi - \omega)} \alpha^j e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \psi \rangle \\ &= \langle \psi^\dagger | U^\dagger U \alpha^i e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U^\dagger U \frac{1}{H_D - (E_\psi - \omega)} U^\dagger U \alpha^j e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} U^\dagger U | \psi \rangle \\ &= \langle U\psi^\dagger | \left(U \alpha^i e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U^\dagger \right) \frac{1}{U(H_D - (E_\psi - \omega))U^\dagger} \left(U \alpha^j e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} U^\dagger \right) | U\psi \rangle \\ &= \langle \tilde{\psi}^\dagger | \left(U \alpha^i e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U^\dagger \right) \frac{1}{U(H_D - (E_\psi - \omega))U^\dagger} \left(U \alpha^j e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} U^\dagger \right) | \tilde{\psi} \rangle \end{aligned} \quad (2.84)$$

mit $U\psi = \tilde{\psi}$.

Wir rufen uns das Ergebnis (2.31) des FW-transformierten Hamiltonians H_{FW} in Erinnerung:

$$H_{FW} = UH_DU^\dagger = m + \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{(\vec{p}^2)^2}{8m^3} + V + \frac{\pi Z\alpha}{2m^2} \delta(\vec{r}) + \frac{Z\alpha}{4m^2 r^3} \vec{\sigma} \cdot \vec{L}. \quad (2.85)$$

Es enthält den Schrödinger-Hamiltonian

$$H_S = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V$$

und seine relativistischen Korrekturen

$$\delta H = -\frac{(\vec{p}^2)^2}{8m^3} + \frac{\pi Z\alpha}{2m^2} \delta(\vec{r}) + \frac{Z\alpha}{4m^2 r^3} \vec{\sigma} \cdot \vec{L}. \quad (2.86)$$

Es ist dabei zu beachten, dass der mittlere Term proportional zu $\delta(\vec{r})$ nur für S-Zustände beiträgt, die in dieser Arbeit nicht betrachtet werden. Deshalb wird der Term hier meist weggelassen. Mit diesen Ausdrücken formen wir den Nenner um zu

$$\begin{aligned} U(H_D - (E - \omega))U^\dagger &= H_{FW} - (E - \omega) \\ &= (m + H_S + \delta H) - (m + E_S + \delta E - \omega) \\ &= (H_S - (E_S - \omega)) + \delta H - \delta E. \end{aligned} \quad (2.87)$$

Damit haben wir den Hamiltonian, wie bei der Störungsrechnung zum relativistischen Wasserstoffatom, zerlegt. Außerdem entspricht das Inverse des Ausdrucks in Klammern gerade dem nichtrelativistischen Propagator. Dies führt zu einer starken Vereinfachung der Rechnungen, erlaubt es uns doch, mit den Schrödinger-Wellenfunktionen zu rechnen und die Korrekturen störungstheoretisch zu erfassen.

Dazu müssen wir auch die erste störungstheoretische Korrektur der Wellenfunktion mitnehmen. Wir erhalten sie z.B. nach [39] zu

$$|\tilde{\psi}\rangle = |\Phi\rangle + |\delta\Phi\rangle = |\Phi\rangle + \frac{1}{(E_S - H_S)'} \delta H |\Phi\rangle, \quad (2.88)$$

wobei der Strich bedeutet, dass hier über alle möglichen Zustände außer dem Eigenzustand mit E_S summiert und integriert wird. In Abschnitt 2.2.2 wurde die FW-Transformation der Ausdrücke $y^j = \alpha^j \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ berechnet. Damit können wir schreiben:

$$U \alpha^j \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) U^\dagger = y_{FW}^j = \left(1 + i (\vec{k} \cdot \vec{r}) - \frac{1}{2} (\vec{k} \cdot \vec{r})^2 \right) \frac{p^j}{m} \quad (2.89)$$

$$\begin{aligned} & - \frac{1}{2m^3} p^j \vec{p}^2 - \frac{Z\alpha}{2m^2 r^3} (\vec{r} \times \vec{\sigma})^j \\ & + \frac{1}{2m} (\vec{k} \cdot \vec{r}) (\vec{k} \times \vec{\sigma})^j \\ & = \frac{p^j}{m} + \delta y^j, \end{aligned} \quad (2.90)$$

wobei wir hier den Hauptbeitrag von den Korrekturen trennen. In der folgenden Übersicht ist dies der einzige Beitrag in der Ordnung $(Z\alpha)^0 = 1$. Er trägt damit in der Ordnung $\alpha(Z\alpha)^4$ zur Lamb-Verschiebung bei. Die Korrekturen, die ein δ enthalten, tragen alle eine weitere Ordnung $(Z\alpha)^2$. Ihr Beitrag zur Selbstenergie ist somit von der Ordnung $\alpha(Z\alpha)^6$. Bis zu dieser Ordnung ergibt sich also

$$\begin{aligned} \tilde{P}^{ij} &= \langle \tilde{\psi}^\dagger | \left\{ U \alpha^i e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} U^\dagger \right\} \frac{1}{U(H_D - (E - \omega))U^\dagger} \left\{ U \alpha^j e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} U^\dagger \right\} | \tilde{\psi} \rangle \\ &= \langle \Phi + \delta\Phi | \left\{ \frac{p^i}{m} + \delta y^i \right\} \frac{1}{(H_S - (E_S - \omega)) + \delta H - \delta E} \left\{ \frac{p^j}{m} + \delta y^j \right\} | \Phi + \delta\Phi \rangle. \end{aligned} \quad (2.91)$$

Wir multiplizieren aus und nehmen nur die Terme mit, die maximal einen Korrekturterm enthalten, womit \tilde{P}^{ij} die Gestalt

$$\begin{aligned} \tilde{P}^{ij} &= \langle \Phi | \frac{p^i}{m} \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{p^j}{m} | \Phi \rangle \\ &+ 2 \cdot \langle \Phi | \frac{p^i}{m} \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \delta y^j | \Phi \rangle \\ &+ \langle \Phi | \frac{p^i}{m} \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \delta E \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{p^j}{m} | \Phi \rangle \\ &- \langle \Phi | \frac{p^i}{m} \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \delta H \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{p^j}{m} | \Phi \rangle \\ &+ 2 \cdot \langle \Phi | \frac{p^i}{m} \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{p^j}{m} | \delta\Phi \rangle + \mathcal{O}((Z\alpha)^4) \end{aligned} \quad (2.92)$$

annimmt. Wir haben so eine große Menge an Korrekturtermen erhalten. Die einzelnen Beiträge zur Energieverschiebung bekommen wir, wenn wir dies nun wieder in (2.82) einsetzen. Der von Bethe berechnete Hauptbeitrag zur Lamb-Verschiebung ist dabei durch den ersten der Terme gegeben. Für ihn ergibt sich

$$E_{L,nd} = -e^2 \int_{|\vec{k}| < \epsilon} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2|\vec{k}|} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{k^2} \right) \langle \Phi | \frac{p^i}{m} \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{p^j}{m} | \Phi \rangle. \quad (2.93)$$

Er führt zum bekannten Bethe-Logarithmus. Wir geben nun die Korrekturen in der Ordnung $\alpha(Z\alpha)^6$ an. Die Bezeichnungen in Klammern sind dabei nicht als korrekte mathematische, sondern vielmehr als intuitive Bezeichnung der einzelnen Terme gedacht. Die Transformation der Korrektur durch den relativistischen Strom führt dabei auf die folgenden Beiträge:

$$\begin{aligned} \delta E_{L,p^i p^2} &= -e^2 \int_{|\vec{k}| < \epsilon} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2|\vec{k}|} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{k^2} \right) \\ &\times \langle \Phi | \frac{p^i}{m} \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{-p^j p^2}{m^3} | \Phi \rangle, \end{aligned} \quad (2.94)$$

$$\begin{aligned} \delta E_{L,r\times\sigma} &= -e^2 \int_{|\vec{k}|<\epsilon} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2|\vec{k}|} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\vec{k}^2} \right) \\ &\times \langle \Phi | \frac{p^i}{m} \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{-Z\alpha (\vec{r} \times \vec{\sigma})^j}{m^2 r^3} | \Phi \rangle, \end{aligned} \quad (2.95)$$

$$\begin{aligned} \delta E_{L,krk\times\sigma} &= -e^2 \int_{|\vec{k}|<\epsilon} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2|\vec{k}|} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\vec{k}^2} \right) \\ &\times \langle \Phi | \frac{p^i}{m} \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{(\vec{k} \cdot \vec{r}) (\vec{k} \times \vec{\sigma})^j}{m} | \Phi \rangle. \end{aligned} \quad (2.96)$$

Die Korrekturen zum Dipol bei (2.89) führen auf den sogenannten nichtrelativistischen Quadrupol, der die folgende Gestalt annimmt

$$\begin{aligned} \delta E_{L,nq} &= -e^2 \int_{|\vec{k}|<\epsilon} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2|\vec{k}|} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\vec{k}^2} \right) \\ &\times \left\{ \langle \Phi | \frac{p^i}{m} (i\vec{k} \cdot \vec{r}) \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{p^j}{m} (-i\vec{k} \cdot \vec{r}) | \Phi \rangle \right. \\ &\left. - \langle \Phi | \frac{p^i}{m} (\vec{k} \cdot \vec{r})^2 \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{p^j}{m} | \Phi \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (2.97)$$

Der nächste Term entsteht durch die Korrektur des Energieeigenwerts; er lautet

$$\begin{aligned} \delta E_{L,\delta E} &= -e^2 \int_{|\vec{k}|<\epsilon} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2|\vec{k}|} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\vec{k}^2} \right) \\ &\times \langle \Phi | \frac{p^i}{m} \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \delta E \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{p^j}{m} | \Phi \rangle. \end{aligned} \quad (2.98)$$

Die relativistischen Korrekturen des Hamiltonians führen auf den Term

$$\begin{aligned} \delta E_{L,\delta H} &= -e^2 \int_{|\vec{k}|<\epsilon} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2|\vec{k}|} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\vec{k}^2} \right) \langle \Phi | \frac{p^i}{m} \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \\ &\times \left(\frac{(\vec{p}^2)^2}{8m^3} - \frac{Z\alpha}{4m^2 r^3} \vec{L} \cdot \vec{\sigma} \right) \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{p^j}{m} | \Phi \rangle. \end{aligned} \quad (2.99)$$

Dabei lassen wir den Darwin-Term proportional zu $\delta(r)$ weg, weil er nur für S - und P -Zustände einen Beitrag liefert und wir nur Zustände mit $L = 2$ und höherem L betrachten. Die Korrektur der Eigenfunktionen liefert schließlich

$$\begin{aligned} \delta E_{L,\delta\Phi} &= -e^2 \int_{|\vec{k}|<\epsilon} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\vec{k}|} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\vec{k}^2} \right) \\ &\times \langle \Phi | \frac{p^i}{m} \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{p^j}{m} | \delta\Phi \rangle. \end{aligned} \quad (2.100)$$

Der gesamte Niedrigenergie-Anteil ist in Photonen-Energieeregularisierung gegeben durch [40]

$$F_{\text{lep}}(\epsilon) = -\frac{4}{3} \ln k_0 + (Z\alpha)^2 \left\{ A_{61} \left[\ln \left(\frac{\epsilon}{(Z\alpha)^2 m} \right) + \frac{1}{\epsilon} \right] + \mathcal{L} \right\}. \quad (2.101)$$

Dabei wurden die Beiträge aller Korrekturterme in den entsprechenden Ordnungen von ϵ bereits zusammengefasst. Der relativistische Bethe-Logarithmus ist die Summe der einzelnen Beiträge der Korrekturen in der Ordnung ϵ^0 , die wir mit β bezeichnen und im nächsten Abschnitt bestimmen werden.

Kapitel 3

Analytische Behandlung von relativistischen Bethe-Logarithmen

3.1 Der nichtrelativistische Dipol

In diesem Abschnitt führen wir den analytischen Teil der Berechnung von (2.93) durch. Wir gehen demnach aus von

$$E_{L,nd} = -e^2 \int_{|\vec{k}| < \epsilon} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2|\vec{k}|} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{k^2} \right) \langle \Phi | \frac{p^i}{m} \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{p^j}{m} | \Phi \rangle. \quad (3.1)$$

Das Matrixelement hängt nur vom Betrag von k ab, es bietet sich also an, das Integral nach k in Kugelkoordinaten zu berechnen

$$\begin{aligned} E_{L,nd} &= -e^2 \int_{|\vec{k}| < \epsilon} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2|\vec{k}|} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{k^2} \right) \langle \Phi | \frac{p^i}{m} \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{p^j}{m} | \Phi \rangle \\ &= - \int_{|\vec{k}| < \epsilon} \frac{dk}{(2\pi)^3} \frac{4\pi\alpha k^2}{2m^2 k} \int d\Omega \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{k^2} \right) \langle \Phi | p^i \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} p^j | \Phi \rangle. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Wir machen Gebrauch von der Identität

$$\int d\Omega \frac{k^i k^j}{k^2} = \frac{4\pi}{3} \delta^{ij} \quad (3.3)$$

und davon, dass $|\vec{k}| = \omega$ ist, womit wir

$$E_{L,nd} = -\frac{2\alpha}{3\pi m^2} \int_0^\epsilon d\omega \omega \langle \Phi | p^i \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} p^i | \Phi \rangle \quad (3.4)$$

bekommen. Um die verbleibende Integration nach ω ausführen zu können, werden wir nun das in obigem Ausdruck enthaltene Matrixelement berechnen. Dazu ersetzen wir nach $p^i \rightarrow -i\nabla_i$ den Impulsoperator, was uns

$$E_{L,nd} = -\frac{2\alpha}{3\pi m^2} \int_0^\epsilon d\omega \omega \langle \Phi | \nabla^i \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \nabla^i | \Phi \rangle \quad (3.5)$$

liefert. Wir betrachten nun

$$S = \langle \Phi | \nabla_i \frac{1}{H_S - E_S + \omega} \nabla_i | \Phi \rangle. \quad (3.6)$$

Wir wechseln mit Hilfe der Relation

$$A^i B^i = \sum_q (-1)^q A_q B_{-q} \quad (3.7)$$

aus [32] in die sphärische Darstellung und fügen jeweils zwischen Propagator und ∇ -Operator eine vollständige Basis des Wasserstoff-Atoms

$$\text{Id} = \sum_{nlm} |nlm\rangle \langle nlm|$$

ein, wodurch wir

$$\langle n'l'm' | \frac{1}{H - E_S + \omega} |nlm\rangle = \frac{1}{E_n - E_S + \omega} \delta_{n,n'} \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} \quad (3.8)$$

bekommen. Unser Referenzzustand $|\Phi\rangle$ ist auch ein Eigenzustand des Schrödinger-Hamiltonians, weswegen wir den Zustand im Folgenden mit $|NLM\rangle$ bezeichnen. Dabei steht N für seine Haupt-, L für seine Drehimpuls- und M für seine magnetische Quantenzahl. Damit ergibt sich S zu

$$S = \sum_{nlmq} (-1)^q \langle NLM | \nabla_{1q} |nlm\rangle \frac{1}{E_n - E_S + \omega} \langle nlm | \nabla_{1-q} |NLM\rangle. \quad (3.9)$$

Hier kommt uns nun die Vereinfachung zu Gute, die wir dadurch erhalten, dass wir mit dem Schrödinger Hamiltonian rechnen. Denn so können wir die explizite Darstellung der Eigenzustände als (siehe z.B. [39])

$$|nlm\rangle = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (3.10)$$

benutzen. Da es sich bei S um die Spur eines Tensors handelt, ist S im Sinne der sphärischen Tensoren ein Skalar. Dies kann man z.B. bei Gl. (3.2.24) von [32] erkennen. Wir verwenden das Wigner-Eckhart-Theorem, um das reduzierte Matrixelement zu erhalten, in dem die M -Abhängigkeit beseitigt wurde. Um Schreibarbeit zu sparen, wird

$$Q(00) = \sum_{nlmq} (-1)^q \nabla_{1q} |nlm\rangle \frac{1}{E_n - E_S + \omega} \langle nlm | \nabla_{1-q} \quad (3.11)$$

gesetzt. Damit erhalten wir

$$\langle NLM | Q(00) |NLM\rangle = (-1)^{L-M} \begin{pmatrix} L & 0 & L \\ -M & 0 & M \end{pmatrix} \langle NL || Q(0) || NL \rangle. \quad (3.12)$$

Das reduzierte Matrixelement läßt sich nicht direkt berechnen, sondern kann nur über obige Relation bestimmt werden. Dazu wählt man M so, dass die Rechnung möglichst einfach wird. In unserem Fall setzen wir $M = 0$ und erhalten das reduzierte Matrixelement, indem wir $M = 0$ in (3.12) einsetzen und dort die linke Seite berechnen und nach dem reduzierten Matrixelement auflösen. Es ergibt sich folgende Formel:

$$\begin{aligned} S_{M=0} &= (-1)^L \begin{pmatrix} L & 0 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \langle NL || Q(0) || NL \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2L+1}} \langle NL || Q(0) || NL \rangle. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Das Matricelement für beliebiges M bekommen wir nun, indem wir dieses Resultat berücksichtigen und das $3j$ -Symbol berechnen, dabei erhalten wir

$$\langle NLM | Q(00) | NLM \rangle = \frac{1}{\sqrt{2L+1}} \langle NL \| Q(0) \| NL \rangle = S_{M=0}. \quad (3.14)$$

Wir stellen fest, dass diese Formel bereits unser Ergebnis ist, da sie unabhängig von M ist. Es bleibt also zu berechnen:

$$S_{M=0} = \sum_{nlmq} (-1)^q \langle NLO | \nabla_{1q} | nlm \rangle \frac{1}{E_n - E_S + \omega} \langle nlm | \nabla_{1-q} | NLO \rangle. \quad (3.15)$$

Zur Vereinfachung der Rechnung formen wir nun das erste Bracket um:

$$\begin{aligned} \langle NLO | \nabla_{1q} | nlm \rangle &= \langle nlm | \nabla_{1q}^\dagger | NLO \rangle^* = \langle nlm | \nabla_{1q}^* | NLO \rangle^* \\ &= (-1)^q \langle nlm | \nabla_{1-q} | NLO \rangle^*. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Für S ergibt sich damit

$$S_{M=0} = \sum_{nlmq} \frac{1}{E_n - E_S + \omega} |\langle nlm | \nabla_{1-q} | NLO \rangle|^2. \quad (3.17)$$

Es bleibt nur noch ein Matricelement zu berechnen, für das wir mit Hilfe von [33]

$$\langle nlm | \nabla_{1-q} | NLO \rangle = (-1)^m \frac{\begin{pmatrix} l & 1 & L \\ -m & -q & 0 \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} l & 1 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}} \langle nl0 | \nabla_{10} | NLO \rangle \quad (3.18)$$

erhalten. Das $3j$ -Symbol im Zähler formen wir nach den Regeln (8.4.5/6) aus [32] um:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} l & 1 & L \\ -m & -q & 0 \end{pmatrix} &= (-1)^{l+1+L} \begin{pmatrix} l & 1 & L \\ m & q & 0 \end{pmatrix} \\ &= (-1)^{l+1+L} \begin{pmatrix} L & l & 1 \\ 0 & m & q \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Das $3j$ -Symbol im Nenner ist nur für gerades $L+1+l$ von null verschieden, so dass $(-1)^{l+1+L} = 1$ gilt. Setzen wir nun (3.18) in (3.17) ein und wenden (3.19) nur auf eines der $3j$ -Symbole an, so erhalten wir

$$S_{M=0} = \sum_{nlmq} \frac{\begin{pmatrix} L & l & 1 \\ 0 & m & q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & 1 & L \\ -m & -q & 0 \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} l & 1 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2} \frac{1}{E_n - E_S + \omega} |\langle nl0 | \nabla_{10} | nl0 \rangle|^2. \quad (3.20)$$

Da wir sie häufiger benötigen werden, schreiben wir Gl. (12.1.3) aus [32] einmal explizit auf

$$\sum_{\psi\kappa} (-1)^{p-\psi+k-\kappa} \begin{pmatrix} a & p & k \\ -\alpha & \psi & \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p & k & a' \\ -\psi & -\kappa & \alpha' \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{a+\alpha}}{2a+1} \Delta(apq) \delta_{a\alpha'} \delta_{\alpha\alpha'}. \quad (3.21)$$

Dabei steht $\Delta(apq)$ für die Dreiecksbeziehung die a, p und k erfüllen müssen. Die Dreiecksbeziehung sagt hier vereinfacht aus, dass entweder $a+p=k$ oder $a-p=k$ gelten muss. Wir identifizieren nun $a=L$, $\alpha=0$, $p=1$, $\psi=q$, $k=l$ und $\kappa=m$. Außerdem können wir noch den Faktor $(-1)^L$ der rechten Seite mit $(-1)^{l+1}$ zu eins kürzen, da aufgrund der Eigenschaften der

3j-Symbole l nur die Werte $L \pm 1$ annehmen kann und somit $(-1)^{l+1-L} = (-1)^0$ oder $(-1)^2$ wird, also in beiden Fällen gleich eins ist. Aus ähnlichen Gründen gilt für den verbleibenden Faktor, $(-1)^{q+m}$, $q = -m$, wodurch dieser ebenfalls eins wird. Wir erhalten also

$$\sum_{q,m} \begin{pmatrix} L & l & 1 \\ 0 & m & q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & 1 & L \\ -m & -q & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2L+1}. \quad (3.22)$$

Die Dreiecksbeziehung und die Tatsache, dass $L + 1 + l$ gerade ist, führen uns auf die zwei möglichen Werte für l , nämlich $l = L \pm 1$. Wir wenden die Umformungen von (3.19) noch auf das andere 3j-Symbol an und können dies nun berechnen zu

$$\begin{pmatrix} l & 1 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 = \begin{cases} \frac{L}{(2L+1)(2L-1)} & \text{für } l = L - 1, \\ \frac{L+1}{(2L+1)(2L+3)} & \text{für } l = L + 1. \end{cases} \quad (3.23)$$

Von der Summe über l bleiben zwei Matrixelemente übrig. Sie werden nach Gl. (13.2.23/24) aus [32] errechnet zu

$$\langle nL + 10 | \nabla_{10} | NL0 \rangle = \frac{L+1}{\sqrt{(2L+1)(2L+3)}} \int_0^\infty dr r^2 R_{nL+1}(r) \left(\frac{d}{dr} - \frac{L}{r} \right) R_{NL}(r) \quad (3.24)$$

und

$$\langle nL - 10 | \nabla_{10} | NL0 \rangle = \frac{L}{\sqrt{(2L+1)(2L-1)}} \int_0^\infty dr r^2 R_{nL-1}(r) \left(\frac{d}{dr} + \frac{L+1}{r} \right) R_{NL}(r). \quad (3.25)$$

Jetzt setzen wir (3.23) und (3.22) in (3.20) ein, wobei wir aus (3.24) und (3.25) erkennen, dass die Matrixelemente reell sind, und erhalten

$$\begin{aligned} S_{M=0} &= \sum_n \frac{1}{2L+1} \frac{1}{E_n - E_S + \omega} \left\{ \frac{(L+1)^2}{(2L+1)(2L+3)} \frac{(2L+1)(2L+3)}{L+1} \right. \\ &\quad \times \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{nL+1}(r) \left(\frac{d}{dr} - \frac{L}{r} \right) R_{NL}(r) \right)^2 + \frac{L^2}{(2L+1)(2L-1)} \\ &\quad \left. \times \frac{(2L+1)(2L-1)}{L} \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{nL-1}(r) \left(\frac{d}{dr} + \frac{L+1}{r} \right) R_{NL}(r) \right)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Wir können nun die verbleibende Integration nach ω in (3.5) ausführen. Wir bezeichnen die obigen Matrixelemente, aus denen das $(E_n - E_S - \omega)^{-1}$ und die Summe über n jeweils herausgezogen sind, mit M_n . Es ergibt sich

$$\begin{aligned} E_{L,nd} &= -\frac{2\alpha}{3\pi m^2} \int_0^\epsilon d\omega \sum_n \frac{\omega}{E_n - E_S + \omega} M_n \\ &= -\frac{2\alpha}{3\pi m^2} \sum_n \int_0^\epsilon d\omega \left\{ \frac{\omega - E_S + E_n}{E_n - E_S + \omega} - \frac{E_n - E_S}{E_n - E_S + \omega} \right\} M_n \\ &= -\frac{2\alpha}{3\pi m^2} \sum_n \int_0^\epsilon d\omega \left\{ 1 - \frac{E_n - E_S}{E_n - E_S + \omega} \right\} M_n \\ &= -\frac{2\alpha}{3\pi m^2} \sum_n \left\{ \epsilon - (E_n - E_S) \ln \left(\left| \frac{\epsilon - E_S + E_n}{E_n - E_S} \right| \right) \right\} M_n. \end{aligned}$$

Den Logarithmus spalten wir durch Einfügen der atomaren Bindungsskala in zwei Teile auf und entwickeln denjenigen, der ϵ enthält. So bekommen wir schließlich

$$E_{L,nd} \approx -\frac{2\alpha}{3\pi m^2} \sum_n \left\{ \epsilon - (E_n - E_S) \ln \left(\frac{2\epsilon}{(Z\alpha)^2 m} \right) + (E_n - E_S) \ln \left(\frac{2|E_n - E_S|}{(Z\alpha)^2 m} \right) \right\} M_n. \quad (3.27)$$

Verrechnen wir das mit dem renormierten Hochenergieanteil, heben sich die divergenten Terme heraus, wie man z.B. in Gl.(3.9) bei [25] sehen kann. Für die hier betrachteten Zustände mit $L \neq 0$ ergibt sich daraus der bekannte Bethe-Logarithmus:

$$\begin{aligned} -\frac{4}{3} \ln k_0 &= \frac{N^3}{(Z\alpha)^4} \frac{2}{3} \sum_n (E_n - E_S) \ln \left(\frac{2|E_n - E_S|}{(Z\alpha)^2 m} \right) \\ &\times \left\{ \frac{L+1}{2L+1} \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{nL+1}(r) \left(\frac{d}{dr} - \frac{L}{r} \right) R_{nL}(r) \right)^2 \right. \\ &\left. + \frac{L}{2L+1} \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{nL-1}(x) \left(\frac{d}{dr} + \frac{L+1}{r} \right) R_{nL}(r) \right)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

3.2 $p^i \dots p^j p^2$ -Term

Der erste Korrekturterm, mit dem wir uns befassen wollen, ist (2.94). Wir können dabei analog zu Abschnitt 3.1 die Winkelintegration in k und weitere Umformungen durchführen und erhalten so

$$\delta E_{L,p^i p^2} = -\frac{2\alpha}{3\pi m^4} \int_0^\epsilon d\omega \omega \langle \Phi | \nabla^i \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \nabla^i \Delta | \Phi \rangle. \quad (3.29)$$

Wir reduzieren wieder auf $M = 0$ und verfahren wie in Abschnitt 3.1. Als Zwischenergebnis bekommen wir

$$\delta E_{L,p^i p^2} = -\frac{2\alpha}{3\pi m^4} \int_0^\epsilon d\omega \omega \sum_{nlmq} (-1)^q \langle NL0 | \nabla_{1q} | nlm \rangle \frac{1}{E_n - E_S + \omega} \langle nlm | \nabla_{1-q} \Delta | NL0 \rangle. \quad (3.30)$$

Das erste Teil-Matrixelement wurde bereits im vorherigen Abschnitt berechnet und soll hier erstmalig nicht weiter betrachtet werden. Wir beschäftigen uns zunächst mit der Berechnung von

$$D = \langle nlm | \nabla_{1-q} \Delta | NL0 \rangle. \quad (3.31)$$

Wir benutzen die bekannte Relation für den Laplace-Operator in Kugelkoordinaten

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\vec{L}^2}{r^2}. \quad (3.32)$$

Eingesetzt in D führt das zu

$$D = \langle nlm | \nabla_{1-q} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\vec{L}^2}{r^2} \right\} | NL0 \rangle. \quad (3.33)$$

Nun ist $|NL0\rangle$ eine Eigenfunktion zu \vec{L}^2 mit dem Eigenwert $L(L+1)$. Also wenden wir diesen Operator direkt auf die rechte Seite an. Es verbleiben dann nur noch Faktoren, die r oder Ableitungen nach r enthalten. Diese wirken nur auf den Radialteil der Wellenfunktion und lassen den Winkelanteil unverändert. Wir können dementsprechend die Gradientenformel ((3.18) und

(3.24), (3.25)) anwenden, müssen dabei aber wieder berücksichtigen, dass sich die Radialfunktion verändert bzw. die Ableitung auf diese wirkt.

Wir stellen die Zwischenschritte hier nicht explizit dar, da diese bereits in Abschnitt 3.1 behandelt wurden. Die Integration nach ω führen wir bereits aus. Dabei verwendet man nach allgemeiner Konvention bei den Korrekturen im Logarithmus die Skalierung auf $(Z\alpha)^2 m$ und nicht wie im letzten Abschnitt $\frac{1}{2}(Z\alpha)^2 m$. Der endliche Beitrag der Ordnung ϵ^0 zum relativistischen Bethe-Logarithmus ergibt sich zu

$$\begin{aligned}
 \beta_{p^i p^2} = & -\frac{2}{3m^5} \frac{N^3}{(Z\alpha)^6} \sum_n (E_n - E_S) \text{Log} \left(\frac{|E_n - E_S|}{(Z\alpha)^2 m} \right) \left\{ \frac{L+1}{2L+1} \right. \\
 & \times \int_0^\infty dr r^2 R_{nL+1}(r) \left(\frac{d}{dr} - \frac{L}{r} \right) R_{NL}(r) \\
 & \times \int_0^\infty dr r^2 R_{nL+1}(r) \left(\frac{d}{dr} - \frac{L}{r} \right) \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) R_{NL}(r) \\
 & + \frac{L}{2L+1} \int_0^\infty dr r^2 R_{nL-1}(r) \left(\frac{d}{dr} + \frac{L+1}{r} \right) R_{NL}(r) \\
 & \times \int_0^\infty dr r^2 R_{nL-1}(r) \left(\frac{d}{dr} + \frac{L+1}{r} \right) \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) R_{NL}(r) \\
 & - \frac{L+1}{2L+1} \int_0^\infty dr r^2 R_{nL+1}(r) \left(\frac{d}{dr} - \frac{L}{r} \right) R_{NL}(r) \\
 & \times \int_0^\infty dr r^2 R_{nL+1}(r) \left(\frac{d}{dr} - \frac{L}{r} \right) \frac{L(L+1)}{r^2} R_{NL}(r) \\
 & - \frac{L}{2L+1} \int_0^\infty dr r^2 R_{nL-1}(r) \left(\frac{d}{dr} + \frac{L+1}{r} \right) R_{NL}(r) \\
 & \left. \times \int_0^\infty dr r^2 R_{nL-1}(r) \left(\frac{d}{dr} + \frac{L+1}{r} \right) \frac{L(L+1)}{r^2} R_{NL}(r) \right\}. \tag{3.34}
 \end{aligned}$$

3.3 $p^i \dots \vec{r} \times \vec{\sigma}$ -Matrixelement

Als nächstes wollen wir uns dem Term (2.95) widmen. Die Rechnung wird dadurch verkompliziert, dass nun auch der Spin aufgrund des $\vec{\sigma}$ -Operators berücksichtigt werden muss. Wir verwenden nun Spin-Kugelflächenfunktionen. Sie sind nach Gl. (7.2.6/7) aus [32] gegeben durch

$$Y_{JM}^{L\frac{1}{2}}(\hat{x}) = \sum_{\sigma=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} C_{LM-\sigma\frac{1}{2}\sigma}^{JM} Y_{LM-\sigma}(\hat{x}) \chi_{\frac{1}{2}\sigma} = \begin{pmatrix} C_{LM-\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{JM} Y_{LM-\frac{1}{2}}(\hat{x}) \\ C_{LM+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{JM} Y_{LM+\frac{1}{2}}(\hat{x}) \end{pmatrix}. \tag{3.35}$$

Wir benötigen daraus ebenfalls noch die sphärische Darstellung des Kreuzproduktes. Da wir wieder nur das reduzierte Matrixelement bestimmen wollen, geben wir nur die z - oder 0 -Komponente an:

$$(\vec{r} \times \vec{\sigma})_0 = -i\sqrt{2} \sum_{\mu} C_{1\mu 1-\mu}^{10} r_{\mu} \sigma_{-\mu} = -i(r_1 \sigma_{-1} - r_{-1} \sigma_1). \tag{3.36}$$

Dies sind nicht die einzigen Änderungen aufgrund des Spins im Vergleich zu den vorangegangenen Rechnungen. Wir müssen nun die Quantenzahlen für das Wasserstoff-Atom mit einer Kopplung von $L + S$ zu J verwenden, wobei $M = M_J$ ist. Dargestellt werden die Zustände durch die erwähnten Spin-Kugelflächenfunktionen für den Winkelanteil, der Radialanteil bleibt unverändert. Wollen wir das Matrizelement wieder reduzieren, so müssen wir beachten, dass nun $M = 0$ kein möglicher Zustand mehr ist. Wir arbeiten stattdessen mit $M = 1/2$ und müssen die Formeln dementsprechend abändern.

Da dieser Beitrag wie die anderen nicht von \vec{k} abhängt, können wir wieder die Integration nach d^3k mit (3.27) und (3.3) ausführen. Wir bekommen für diesen Beitrag

$$\begin{aligned} \delta E_{L,r \times \sigma} &= iZ\alpha \frac{2\alpha}{3\pi m^3} \sum_n (E_n - E_S) \ln \left(\frac{|E_n - E_S|}{(Z\alpha)^2 m} \right) \sum_{j,l,m,q} (-1)^q \\ &\times \langle NJLSM | \nabla_q | njlsm \rangle \langle njlsm | \frac{(\vec{r} \times \vec{\sigma})_{-q}}{r^3} | NJLSM \rangle. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Es gilt

$$\langle NJLSM | \nabla_q | njlsm \rangle = (-1)^{-M+\frac{1}{2}} \frac{\begin{pmatrix} J & 1 & j \\ -M & q & m \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} J & 1 & j \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}} \left\langle NJLS \frac{1}{2} \left| \nabla_0 \right| njls \frac{1}{2} \right\rangle \quad (3.38)$$

und

$$\langle njlsm | \frac{(\vec{r} \times \vec{\sigma})_{-q}}{r^3} | NJLSM \rangle = (-1)^{-m+\frac{1}{2}} \frac{\begin{pmatrix} j & 1 & J \\ -m & -q & M \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} j & 1 & J \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}} \left\langle njls \frac{1}{2} \left| \frac{(\vec{r} \times \vec{\sigma})_0}{r^3} \right| NJLS \frac{1}{2} \right\rangle. \quad (3.39)$$

Wir formen eines der beiden erhaltenen $3j$ -Symbole wieder um:

$$\begin{pmatrix} J & 1 & j \\ -M & q & m \end{pmatrix} = (-1)^{j+1+J} \begin{pmatrix} J & j & 1 \\ -M & m & q \end{pmatrix}. \quad (3.40)$$

Durch diese Umformung führt man auch die beiden $3j$ -Symbole im Nenner ineinander über. Somit lassen sich die $3j$ -Symbole mit Hilfe von (3.21) zusammenfassen zu

$$\begin{aligned} &\sum_{mq} (-1)^{-m+1-M+q} (-1)^{j+1+J} \begin{pmatrix} J & j & 1 \\ -M & m & q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & 1 & J \\ -m & -q & M \end{pmatrix} \\ &= (-1)^{J-M+1} \sum_{mq} (-1)^{1+j-m-q} \begin{pmatrix} J & j & 1 \\ -M & m & q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & 1 & J \\ -m & -q & M \end{pmatrix} \\ &= (-1)^{2J+1} \frac{1}{2J+1}, \end{aligned} \quad (3.41)$$

wobei wir ausnutzen, dass $(-1)^q = (-1)^{-q}$ gilt, weil q ganzzahlig ist. Für das p -Matrizelement

mit Spin-Kugelflächenfunktionen ergibt Gl. (7.1.24) aus [32], wobei $s = S = \frac{1}{2}$ gilt:

$$\begin{aligned}
 \sum_{j,l} \left\langle njls \frac{1}{2} \left| \nabla_0 \right| NJLS \frac{1}{2} \right\rangle &= \sum_j (-1)^{J+L+S} \sqrt{(2J+1)(L+1)} \begin{Bmatrix} J & j & 1 \\ L+1 & L & S \end{Bmatrix} \\
 &\times C_{J\frac{1}{2}10}^{j\frac{1}{2}} \int_0^\infty dx x^2 R_{nL+1}(x) \left(\frac{d}{dx} - \frac{L}{x} \right) R_{NL}(x) \\
 &+ \sum_j (-1)^{J+L+S+1} \sqrt{(2J+1)L} \begin{Bmatrix} J & j & 1 \\ L-1 & L & S \end{Bmatrix} \\
 &\times C_{J\frac{1}{2}10}^{j\frac{1}{2}} \int_0^\infty dx x^2 R_{nL-1}(x) \left(\frac{d}{dx} + \frac{L+1}{x} \right) R_{NL}(x).
 \end{aligned} \tag{3.42}$$

Da dieses Matrixelement reell ist, können wir es einfach statt des konjugiert-komplexen von (3.38) verwenden. Für die Berechnung des $\vec{r} \times \vec{\sigma}$ -Matrixelements benutzen wir Gl. (7.1.28) aus [32], um erstmal die Wirkung des Spinoperators auf die Wellenfunktion zu betrachten. Auf die verbleibenden Kugelflächenfunktionen wird nun der Operator r_μ angewendet. Mit Hilfe von Gl. (7.1.26) aus [32] ergibt sich somit für das Produkt

$$\begin{aligned}
 \frac{r_\mu \sigma_{-\mu}}{r^3} \{ \Phi(r) Y_{JM}^{LS} \} &= (-1)^{L+1} 2 \frac{\Phi(r)}{r^2} \sqrt{(2J+1)S(S+1)(2S+1)} \left((-1)^{J-1+S} \right. \\
 &\times \begin{Bmatrix} J & J-1 & 1 \\ S & S & L \end{Bmatrix} (-1)^{J-1+S+1} \sqrt{(2J-1)(2L+1)} \\
 &\times C_{JM1-\mu}^{J-1M-\mu} \left\{ (-1)^{L-1} \begin{Bmatrix} J-1 & J-1 & 1 \\ L-1 & L & S \end{Bmatrix} C_{L010}^{L-10} \right. \\
 &\times C_{J-1M-\mu 1\mu}^{J-1M} Y_{J-1M}^{L-1S} + (-1)^{L+1} \begin{Bmatrix} J-1 & J & 1 \\ L+1 & L & S \end{Bmatrix} C_{L010}^{L+10} \\
 &\times C_{J-1M-\mu 1\mu}^{JM} Y_{JM}^{L+1S} \left. \right\} + (-1)^{J+S} \begin{Bmatrix} J & J & 1 \\ S & S & L \end{Bmatrix} \\
 &\times C_{JM1-\mu}^{JM-\mu} (-1)^{J+S+1} \sqrt{(2J+1)(2L+1)} \left\{ (-1)^{L-1} \right. \\
 &\times \begin{Bmatrix} J & J-1 & 1 \\ L-1 & L & S \end{Bmatrix} C_{L010}^{L-10} C_{JM-\mu 1\mu}^{J-1M} Y_{J-1M}^{L-1S} \\
 &+ (-1)^{L-1} C_{L010}^{L-10} \begin{Bmatrix} J & J & 1 \\ L-1 & L & S \end{Bmatrix} C_{JM-\mu 1\mu}^{JM} Y_{JM}^{L-1S} \\
 &+ (-1)^{L+1} \begin{Bmatrix} J & J & 1 \\ L+1 & L & S \end{Bmatrix} C_{L010}^{L+10} C_{JM-\mu 1\mu}^{JM} Y_{JM}^{L+1S} \\
 &+ (-1)^{L+1} \begin{Bmatrix} J & J+1 & 1 \\ L+1 & L & S \end{Bmatrix} C_{L010}^{L+10} C_{JM-\mu 1\mu}^{J+1M} \\
 &\times Y_{J+1M}^{L+1S} \left. \right\} + (-1)^{J+1+S} \begin{Bmatrix} J & J+1 & 1 \\ S & S & L \end{Bmatrix} C_{JM1-\mu}^{J+1M-\mu} \\
 &(-1)^{J+1+S+1} \sqrt{(2J+3)(2L+1)} \left\{ (-1)^{L-1} \right. \\
 &\times \begin{Bmatrix} J+1 & J & 1 \\ L-1 & L & S \end{Bmatrix} C_{L010}^{L-10} C_{J+1M-\mu 1\mu}^{JM} Y_{JM}^{L-1S} + (-1)^{L+1} \\
 &\times \left. \begin{Bmatrix} J+1 & J+1 & 1 \\ L+1 & L & S \end{Bmatrix} C_{L010}^{L+10} C_{J+1M-\mu 1\mu}^{J+1M} Y_{J+1M}^{L+1S} \right\}.
 \end{aligned} \tag{3.43}$$

Wir schreiben nur eine vereinfachte Formel für das gesamte Matrixelement auf, da dies aufgrund der Komplexität des Ausdrucks sonst sehr unübersichtlich wäre. Dabei lassen wir die Teil-Matrixelemente in ihrer symbolischen Form stehen und geben ihre explizite Form nicht an. Bei praktischen Rechnungen werden die Vorfaktoren für jedes Teil-Matrixelement einzeln berechnet und erst danach zusammengefasst:

$$\begin{aligned} \beta_{r \times \sigma} &= Z\alpha \frac{2}{3m^4} \frac{N^3}{(Z\alpha)^6} \sum_n (E_n - E_S) \ln \left(\frac{|E_n - E_S|}{(Z\alpha)^2 m} \right) \frac{(-1)^{2J+1}}{2J+1} \sum_j \frac{1}{\begin{pmatrix} j & 1 & J \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}^2} \\ &\times \left\{ \left\langle n j L + 1 \frac{1}{2} \frac{1}{2} \middle| \nabla_0 \middle| N J L \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle n j L + 1 \frac{1}{2} \frac{1}{2} \middle| \frac{r_1 \sigma_{-1} - r_{-1} \sigma_1}{r^3} \middle| N J L \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \right. \\ &\left. + \left\langle n j L - 1 \frac{1}{2} \frac{1}{2} \middle| \nabla_0 \middle| N J L \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle n j L - 1 \frac{1}{2} \frac{1}{2} \middle| \frac{r_1 \sigma_{-1} - r_{-1} \sigma_1}{r^3} \middle| N J L \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \right\}. \end{aligned} \quad (3.44)$$

3.4 $p^i \dots (\vec{k} \cdot \vec{r}) \vec{k} \times \vec{\sigma}$ -Matrixelement

Zum ersten Mal haben wir es bei (2.96) auch mit einem von \vec{k} abhängigen Beitrag zu tun. Hier müssen wir uns also mit der Winkelintegration beschäftigen, wobei wir ausgehen von

$$\begin{aligned} \delta E_{L,krk \times \sigma} &= -e^2 \int_{|\vec{k}| < \epsilon} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2|\vec{k}|} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\vec{k}^2} \right) \\ &\times \langle \Phi | \frac{p^i}{m} \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{(\vec{k} \cdot \vec{r}) (\vec{k} \times \vec{\sigma})^j}{m} | \Phi \rangle. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Wir benutzen für die Rechnung die Indexnotation:

$$\begin{aligned} \delta E_{L,krk \times \sigma} &= -e^2 \int_{|\vec{k}| < \epsilon} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2m^2 |\vec{k}|} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\vec{k}^2} \right) \\ &\times \langle \Phi | p^i \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} k^a r^a \epsilon^{jcd} k^c \sigma^d | \Phi \rangle. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Wir ziehen $\omega = |\vec{k}|$ aus dem ersten \vec{k} heraus und bekommen

$$\begin{aligned} \delta E_{L,krk \times \sigma} &= -e^2 \int_{|\vec{k}| < \epsilon} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2m^2 |\vec{k}|} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\vec{k}^2} \right) \langle \Phi | p^i \frac{\omega}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{k^a}{|\vec{k}|} r^a \epsilon^{jcd} k^c \sigma^d | \Phi \rangle \\ &= -e^2 \int_{|\vec{k}| < \epsilon} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2m^2 |\vec{k}|} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\vec{k}^2} \right) \\ &\times \langle \Phi | p^i \left(\frac{\omega - E_S + H_S}{H_S - (E_S - \omega)} - \frac{H_S - E_S}{H_S - (E_S - \omega)} \right) \frac{k^a}{|\vec{k}|} r^a \epsilon^{jcd} k^c \sigma^d | \Phi \rangle. \end{aligned} \quad (3.47)$$

Beim ersten der beiden Terme in Klammern kürzt sich der Bruch gerade heraus. Er ist nach der Integration proportional zu ϵ und trägt damit nicht in der Ordnung ϵ^0 bei, weswegen wir ihn weglassen. Wir benutzen noch die Relation

$$(H_S - E_S) r^i | \Phi \rangle = -i \frac{p^i}{m} | \Phi \rangle + r^i (E_S - E_S) | \Phi \rangle = -i \frac{p^i}{m} | \Phi \rangle,$$

deren Gültigkeit man durch einfaches Differenzieren zeigen kann, und erhalten

$$\begin{aligned} \delta E_{L,krk \times \sigma} &= -e^2 \int_{|\vec{k}| < \epsilon} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2m^3 |\vec{k}|} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\vec{k}^2} \right) \\ &\times \langle \Phi | p^i \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{k^a}{|\vec{k}|} (-i p^a) \epsilon^{jcd} k^c \sigma^d | \Phi \rangle. \end{aligned} \quad (3.48)$$

Wir ziehen nun $\omega = |\vec{k}|$ auch aus dem zweiten \vec{k} heraus und gehen analog zum ersten Mal vor:

$$\begin{aligned}
 \delta E_{L,krk\times\sigma} &= -e^2 \int_{|\vec{k}|<\epsilon} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2m^3|\vec{k}|^3} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\vec{k}^2} \right) \\
 &\quad \times \langle \Phi | p^i \frac{\omega}{H_S - (E_S - \omega)} k^a (-i p^a) \epsilon^{jcd} k^c \sigma^d | \Phi \rangle \\
 &= e^2 \int_{|\vec{k}|<\epsilon} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2m^3|\vec{k}|^3} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\vec{k}^2} \right) \\
 &\quad \times \langle \Phi | p^i \frac{H_S - E_S}{H_S - (E_S - \omega)} k^a (-i p^a) \epsilon^{jcd} k^c \sigma^d | \Phi \rangle.
 \end{aligned} \tag{3.49}$$

Diesmal wird

$$[(H_S - E_S), p^a] = iZ\alpha \frac{r^a}{r^3},$$

verwendet. Es bleibt also

$$\begin{aligned}
 \delta E_{L,krk\times\sigma} &= e^2 \int_{|\vec{k}|<\epsilon} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2m^3|\vec{k}|^3} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\vec{k}^2} \right) \\
 &\quad \times \langle \Phi | p^i \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{Z\alpha}{r^3} k^a r^a \epsilon^{jcd} k^c \sigma^d | \Phi \rangle.
 \end{aligned} \tag{3.50}$$

Um die Winkelintegration von k auszuführen, können wir die Terme mit k aus dem Matrixelement herausziehen. Somit erhalten wir

$$\begin{aligned}
 \delta E_{L,krk\times\sigma} &= e^2 \int_{\omega<\epsilon} \frac{d\omega}{(2\pi)^3} \frac{1}{2m^3} \int d\Omega_k \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\vec{k}^2} \right) \frac{k^a k^c}{\vec{k}^2} \\
 &\quad \times \langle \Phi | p^i \frac{\omega}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{Z\alpha}{r^3} r^a \epsilon^{jcd} \sigma^d | \Phi \rangle.
 \end{aligned} \tag{3.51}$$

Für die Winkelintegration nutzen wir die folgenden Identitäten:

$$\int d\Omega_k \frac{k^i k^j}{\vec{k}^2} = \frac{4\pi}{3} \delta^{ij}, \tag{3.52}$$

$$\int d\Omega_k \frac{k^i k^j}{\vec{k}^2} \frac{k^a k^c}{\vec{k}^2} = \frac{4\pi}{15} (\delta^{ij} \delta^{ac} + \delta^{ia} \delta^{jc} + \delta^{ic} \delta^{ja}) \tag{3.53}$$

und erhalten damit

$$\begin{aligned}
 \delta E_{L,krk\times\sigma} &= 4\pi\alpha \int_{\omega<\epsilon} \frac{d\omega}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{2m^3} \left(\frac{1}{3} \langle \Phi | p^i \frac{\omega}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{Z\alpha}{r^3} \epsilon^{iad} r^a \sigma^d | \Phi \rangle \right. \\
 &\quad + \frac{1}{15} \langle \Phi | p^i \frac{\omega}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{Z\alpha}{r^3} \epsilon^{iad} r^a \sigma^d | \Phi \rangle \\
 &\quad + \frac{1}{15} \langle \Phi | p^i \frac{\omega}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{Z\alpha}{r^3} \epsilon^{jjd} r^i \sigma_d | \Phi \rangle \\
 &\quad \left. + \frac{1}{15} \langle \Phi | p^i \frac{\omega}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{Z\alpha}{r^3} \epsilon^{aid} r^a \sigma^d | \Phi \rangle \right).
 \end{aligned} \tag{3.54}$$

Wegen der totalen Antisymmetrie des ϵ -Tensors verschwindet der dritte der Terme identisch und der zweite hebt sich mit dem vierten auf. Es verbleibt

$$\begin{aligned}
 \delta E_{L,krk\times\sigma} &= \int_{\omega<\epsilon} d\omega \frac{\alpha}{3\pi m^3} \langle \Phi | p^i \frac{\omega}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{Z\alpha}{r^3} \epsilon^{iad} r^a \sigma^d | \Phi \rangle \\
 &= \int_{\omega<\epsilon} d\omega \frac{\alpha}{3\pi m^3} \langle \Phi | p^i \frac{\omega}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{Z\alpha}{r^3} (\vec{r} \times \vec{\sigma})^i | \Phi \rangle \\
 &= -\frac{1}{2} \delta E_{L,r\times\sigma}
 \end{aligned} \tag{3.55}$$

und somit auch

$$\beta_{krk\sigma} = -\frac{1}{2}\beta_{r\lambda\sigma}. \quad (3.56)$$

3.5 Der nichtrelativistische Quadrupol

Dieser Beitrag ergibt sich durch die Entwicklung von $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$. Er hat nach (2.97) die Form

$$\begin{aligned} \delta E_{L,nq} = & -e^2 \int_{|\vec{k}|<\epsilon} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2|\vec{k}|} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{k^2} \right) \\ & \times \left\{ \langle \Phi | \frac{p^i}{m} (i\vec{k} \cdot \vec{r}) \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{p^j}{m} (-i\vec{k} \cdot \vec{r}) | \Phi \rangle \right. \\ & \left. - \langle \Phi | \frac{p^i}{m} (\vec{k} \cdot \vec{r})^2 \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{p^j}{m} | \Phi \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (3.57)$$

Da man in diesem Fall auf der rechten Seite immer beachten muss, p und r richtig zu kommutieren, benutzen wir die Relation

$$[p^j, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}] = k^j e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = k^j + ik^j(\vec{k} \cdot \vec{r}) - \frac{1}{2}k^j(\vec{k} \cdot \vec{r})^2 + \dots \quad (3.58)$$

Der erste der Terme kommutiert mit H , wodurch sein Matrixelement verschwindet. Die anderen beiden sind in zu hoher Ordnung in $Z\alpha$, weshalb wir sie weglassen. Das heißt wir können hier p mit $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ kommutieren. Wenn wir zur Indexnotation über gehen, lässt es sich schreiben als

$$\begin{aligned} \delta E_{L,nq} = & -e^2 \int_{|\vec{k}|<\epsilon} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2|\vec{k}|m^2} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{k^2} \right) \left\{ \langle \Phi | p^i k^a r^a \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} p^j k^b r^b | \Phi \rangle \right. \\ & \left. - \langle \Phi | p^i k^a k^b r^a r^b \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} p^j | \Phi \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (3.59)$$

Durch Umformen erhält man daraus

$$\begin{aligned} \delta E_{L,nq} = & -e^2 \int_{\omega<\epsilon} d\Omega_k \frac{d\omega}{(2\pi)^3} \frac{1}{2m^2} \frac{k^a k^b}{k^2} \left\{ \langle \Phi | p^i r^a \frac{\omega^3}{H_S - (E_S - \omega)} p^j r^b | \Phi \rangle \right. \\ & - \langle \Phi | p^i r^a r^b \frac{\omega^3}{H_S - (E_S - \omega)} p^j | \Phi \rangle - \frac{k^i k^j}{k^2} \langle \Phi | p^i r^a \frac{\omega^3}{H_S - (E_S - \omega)} p^j r^b | \Phi \rangle \\ & \left. + \frac{k^i k^j}{k^2} \langle \Phi | p^j r^a r^b \frac{\omega^3}{H_S - (E_S - \omega)} p^i | \Phi \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (3.60)$$

Wir benutzen die Relationen (3.52) und (3.53), um die Integration nach $d\Omega_k$ auszuführen. Ersetzen wir ebenfalls noch den Impulsoperator, so ergibt dies

$$\begin{aligned} \delta E_{L,nq} = & - \int_{\omega<\epsilon} d\omega \frac{\alpha}{\pi m^2} \left\{ -\frac{4}{15} \langle \Phi | \nabla^i r^j \frac{\omega^3}{H_S - (E_S - \omega)} r^j \nabla^i | \Phi \rangle \right. \\ & + \frac{1}{15} \langle \Phi | \nabla^i r^i \frac{\omega^3}{H_S - (E_S - \omega)} r^i \nabla^i | \Phi \rangle + \frac{1}{15} \langle \Phi | \nabla^i r^j \frac{\omega^3}{H_S - (E_S - \omega)} r^i \nabla^j | \Phi \rangle \\ & \left. + \frac{4}{15} \langle \Phi | \nabla^i r^2 \frac{\omega^3}{H_S - (E_S - \omega)} \nabla^i | \Phi \rangle - \frac{2}{15} \langle \Phi | \nabla^i r^i r^j \frac{\omega^3}{H_S - (E_S - \omega)} \nabla^j | \Phi \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (3.61)$$

In den nächsten Abschnitten werden wir die Winkelanteile der fünf einzelnen Terme des Quadrupols berechnen und abschließend die verbleibende Integration nach ω durchführen.

3.5.1 $p^i r^j \dots r^j p^i$ -Matrixelement

Wir gehen aus vom ersten Term in (3.61)

$$M_a = \langle \Phi | \nabla^i r^j \frac{\omega^3}{H_S - (E_S - \omega)} r^j \nabla^i | \Phi \rangle \quad (3.62)$$

und führen eine vollständige Basis in Form der Schrödinger-Eigenfunktionen des Wasserstoff-Atoms ein. Die äußere Wellenfunktion ist ebenfalls eine Eigenfunktion dieses Hamiltonians. Wir erhalten demnach

$$M_a = \sum_{n'l'm'} \langle NLM | \nabla^i r^j | n'l'm' \rangle \frac{\omega^3}{E_{n'} - (E_S - \omega)} \langle n'l'm' | r^j \nabla^i | NLM \rangle. \quad (3.63)$$

Dies lässt sich analog zu den bisherigen Elementen auf den Fall $M = 0$ reduzieren, ebenso gehen wir von kartesischen zu sphärischen Vektoren über. Somit ist

$$M_a = \sum_{n'l'm'} \sum_{q,q'} (-1)^q (-1)^{q'} \langle NLO | \nabla^q r^{q'} | n'l'm' \rangle \frac{\omega^3}{E_{n'} - (E_S - \omega)} \langle n'l'm' | r^{-q'} \nabla^{-q} | NLO \rangle. \quad (3.64)$$

Weiter führen wir zwischen r und ∇ jeweils eine vollständige Winkelbasis ein, was auf

$$\begin{aligned} M_a &= \sum_{n',l',m'} \sum_{q,q'} \sum_{l'',m'',l,m} (-1)^q (-1)^{q'} \langle NLO | \nabla^q | l''m'' \rangle \langle l''m'' | r^{q'} | n'l'm' \rangle \\ &\quad \times \frac{\omega^3}{E_{n'} - (E_S - \omega)} \langle n'l'm' | r^{-q'} | lm \rangle \langle lm | \nabla^{-q} | NLO \rangle \end{aligned} \quad (3.65)$$

führt. Wir reduzieren die einzelnen Matrixelemente und gruppieren die Terme von q und q' zusammen; damit erhalten wir

$$\begin{aligned} M_a &= \sum_{n',l',m'} \sum_{l'',m'',l,m} \sum_q (-1)^q (-1)^m (-1)^{m''} \langle NLO | \nabla^0 | l''0 \rangle \langle l0 | \nabla^0 | NLO \rangle \\ &\quad \times \frac{\begin{pmatrix} L & 1 & l'' \\ 0 & q & m'' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & 1 & L \\ -m & -q & 0 \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} L & 1 & l'' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & 1 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}} \sum_{q'} (-1)^{q'} (-1)^{m'} \frac{\omega^3}{E_{n'} - (E_S - \omega)} \\ &\quad \times \langle l''0 | r^0 | n'l'0 \rangle \langle n'l'0 | r^0 | l0 \rangle \frac{\begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ -m' & -q' & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l'' & 1 & l' \\ -m'' & q' & m' \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l'' & 1 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}}. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Wir beginnen damit, zuerst die Summe über q' zusammenzufassen. Dazu verwenden wir erst Regel (8.4.5/6) und danach (12.1.3) aus [32] und erhalten schließlich

$$\begin{aligned} &\sum_{q',m'} (-1)^{q'} (-1)^{m'} \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ -m' & -q' & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l'' & 1 & l' \\ -m'' & q' & m' \end{pmatrix} \\ &= \sum_{q',m'} (-1)^{q'} (-1)^{m'} \begin{pmatrix} l'' & 1 & l' \\ -m'' & q' & m' \end{pmatrix} (-1)^{1+l'+l} \begin{pmatrix} 1 & l' & l \\ -q' & -m' & m \end{pmatrix} \\ &= \frac{(-1)^m}{2l+1} \delta_{l,l''} \delta_{m,m''}. \end{aligned} \quad (3.67)$$

Durch das Kronecker-Delta lässt sich auch die Summe über q auf gleiche Weise zusammenfassen, was uns

$$\begin{aligned} & \sum_{q,m} (-1)^q (-1)^m \begin{pmatrix} l & 1 & L \\ -m & -q & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & 1 & l \\ 0 & q & m \end{pmatrix} \\ &= \sum_{q,m} (-1)^q (-1)^m (-1)^{1+L+l} \begin{pmatrix} 1 & l & L \\ -q & -m & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & 1 & l \\ 0 & q & m \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2L+1} \end{aligned} \quad (3.68)$$

liefert. Durch diese Vereinfachungen können wir das Matrixelement schreiben als

$$\begin{aligned} M_a &= \frac{1}{2L+1} \sum_{n',l',l} \frac{1}{2l+1} \begin{pmatrix} l & 1 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^{-2} \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^{-2} \frac{\omega^3}{E_{n'} - (E_S - \omega)} \\ &\quad \times \langle NLO | \nabla^0 | l0 \rangle \langle l0 | r^0 | n'l'0 \rangle \langle n'l'0 | r^0 | l0 \rangle \langle l0 | \nabla^0 | NLO \rangle . \end{aligned} \quad (3.69)$$

Das Auswerten der $3j$ -Symbole nach (3.23) und der Matrixelemente nach (3.24) und (3.25) sowie analoger Formeln aus [32] für r , führt schließlich zu

$$\begin{aligned} M_a &= \sum_{n'} \frac{\omega^3}{E_{n'} - (E_S - \omega)} \left\{ \frac{L+1}{2L+1} \frac{L+2}{2L+3} \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{n'L+2}(r) \left(r \frac{d}{dr} - L \right) R_{NL}(r) \right)^2 \right. \\ &\quad + \frac{L+1}{2L+1} \frac{L+1}{2L+3} \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{n'L}(r) \left(r \frac{d}{dr} - L \right) R_{NL}(r) \right)^2 \\ &\quad + \frac{L}{2L+1} \frac{L}{2L-1} \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{n'L}(r) \left(r \frac{d}{dr} + (L+1) \right) R_{NL}(r) \right)^2 \\ &\quad \left. + \frac{L}{2L+1} \frac{L-1}{2L-1} \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{n'L-2}(r) \left(r \frac{d}{dr} + (L+1) \right) R_{NL}(r) \right)^2 \right\} . \end{aligned} \quad (3.70)$$

3.5.2 $p^i r^i \dots r^j p^j$ -Matrixelement

Wir wollen hier auf den zweiten Term in (3.61) eingehen; er lautet

$$M_b = \langle \Phi | \nabla^i r^i \frac{\omega^3}{H_S - (E_S - \omega)} r^j \nabla^j | \Phi \rangle . \quad (3.71)$$

Wir führen zusätzliche Basissätze ein und benutzen sphärische Vektoren, was uns auf

$$\begin{aligned} M_b &= \sum_{n',l',m'} \sum_{q,q'} \sum_{l'',m'',l,m} (-1)^q (-1)^{q'} \langle NLO | \nabla^q | l'' m'' \rangle \langle l'' m'' | r^{-q} | n' l' m' \rangle \\ &\quad \times \frac{\omega^3}{E_{n'} - (E_S - \omega)} \langle n' l' m' | r^{q'} | l m \rangle \langle l m | \nabla^{-q'} | NLO \rangle \end{aligned} \quad (3.72)$$

führt. Durch Reduzierung der Matrixelemente kommen wir zu

$$\begin{aligned}
 M_b &= \sum_{n',l',m'} \sum_{l'',m'',l,m} \sum_{q,q'} (-1)^q (-1)^m (-1)^{m''} (-1)^{q'} (-1)^{m'} \langle NL0 | \nabla^0 | l''0 \rangle \\
 &\times \langle l''0 | r^0 | n'l'0 \rangle \frac{\begin{pmatrix} L & 1 & l'' \\ 0 & q & m'' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l'' & 1 & l' \\ -m'' & -q & m' \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} L & 1 & l'' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l'' & 1 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}} \frac{\omega^3}{E_{n'} - (E_S - \omega)} \\
 &\times \langle n'l'0 | r^0 | l0 \rangle \langle l0 | \nabla^0 | NL0 \rangle \frac{\begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ -m' & q' & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & 1 & L \\ -m & -q' & 0 \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & 1 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}}.
 \end{aligned} \tag{3.73}$$

Diesmal fassen wir die Summen über die $3j$ -Symbole wie folgt zusammen:

$$\begin{aligned}
 &\sum_{q',m'} (-1)^{q'} (-1)^{m'+m} \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ -m' & q' & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & 1 & L \\ -m & -q' & 0 \end{pmatrix} \\
 &= \sum_{q',m'} (-1)^{q'} (-1)^{m'+m} \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ -m' & q' & m \end{pmatrix} (-1)^{1+L+l} \begin{pmatrix} 1 & l & L \\ -q' & -m & 0 \end{pmatrix} \\
 &= \frac{(-1)^{m'}}{2L+1} \delta_{L,l'} \delta_{0,m'},
 \end{aligned} \tag{3.74}$$

wobei wieder Gl. (12.1.3) aus [32] benutzt wurde. Erneute Anwendung auf die zweite Summe führt uns unter Ausnutzung der Kronecker-Deltas zu

$$\begin{aligned}
 &\sum_{q,m''} (-1)^q (-1)^{m''} \begin{pmatrix} L & 1 & l'' \\ 0 & q & m'' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l'' & 1 & L \\ -m'' & -q & 0 \end{pmatrix} \\
 &= \sum_{q,m} (-1)^q (-1)^m \begin{pmatrix} L & 1 & l'' \\ 0 & q & m'' \end{pmatrix} (-1)^{1+L+l''} \begin{pmatrix} 1 & l'' & L \\ -q & -m'' & 0 \end{pmatrix} \\
 &= \frac{1}{2L+1}.
 \end{aligned} \tag{3.75}$$

Wir setzen die Formeln für die reduzierten Matrixelemente ein und fassen die Terme geschickt zusammen, was uns auf

$$M_b = \sum_{n'} \frac{\omega^3}{E_{n'} - (E_S - \omega)} \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{n'L}(r) r \frac{d}{dr} R_{NL}(r) \right)^2 \tag{3.76}$$

führt.

3.5.3 $p^i r^j \dots r^i p^j$ -Matrixelement

Der Ausgangspunkt ist diesmal der dritte Term in (3.61)

$$M_c = \langle \Phi | \nabla^i r^j \frac{\omega^3}{E_S - (E_S - \omega)} r^i \nabla^j | \Phi \rangle. \tag{3.77}$$

Die Vorgehensweise ist analog zum ersten Term: Basissätze einführen und zu sphärischen Vektoren übergehen. Diese gibt

$$\begin{aligned}
 M_c &= \sum_{n',l',m'} \sum_{q,q'} \sum_{l'',m'',l,m} (-1)^q (-1)^{q'} \langle NL0 | \nabla^q | l''m'' \rangle \langle l''m'' | r^{q'} | n'l'm' \rangle \\
 &\times \frac{\omega^3}{E_{n'} - (E_S - \omega)} \langle n'l'm' | r^{-q} | lm \rangle \langle lm | \nabla^{-q'} | NL0 \rangle.
 \end{aligned} \tag{3.78}$$

Erneut reduzieren wir die einzelnen Matrixelemente, so dass wir

$$\begin{aligned}
M_c = & \sum_{n',l',m'} \sum_{l'',m'',l,m} \sum_{q,q'} (-1)^q (-1)^m (-1)^{m''} (-1)^{q'} (-1)^{m'} \langle NL0 | \nabla^0 | l''0 \rangle \\
& \times \langle l''0 | r^0 | n'l'0 \rangle \frac{\begin{pmatrix} L & 1 & l'' \\ 0 & q & m'' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l'' & 1 & l' \\ -m'' & q' & m' \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} L & 1 & l'' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l'' & 1 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}} \frac{\omega^3}{E_{n'} - (E_S - \omega)} \\
& \times \langle n'l'0 | r^0 | l0 \rangle \langle l0 | \nabla^0 | NL0 \rangle \frac{\begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ -m' & -q & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & 1 & L \\ -m & -q' & 0 \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & 1 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}}
\end{aligned} \tag{3.79}$$

erhalten. Wir können nun nach einer Umformung mit Hilfe von (12.1.8) aus [32] zusammenfassen zu

$$\begin{aligned}
& \sum_{q,q',m,m',m''} (-1)^{q+q'+m+m'+m''} \begin{pmatrix} L & 1 & l'' \\ 0 & q & m'' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l'' & 1 & l' \\ -m'' & q' & m' \end{pmatrix} \\
& \times \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ -m' & -q & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & 1 & L \\ -m & -q' & 0 \end{pmatrix} \\
= & \sum_{q,q',m,m',m''} (-1)^{q+q'+m+m'+m''+1+l+L+l''+1+l'} \begin{pmatrix} L & 1 & l'' \\ 0 & q & m'' \end{pmatrix} \\
& \times \begin{pmatrix} 1 & l & l' \\ -q & m & -m' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & L & 1 \\ -m & 0 & -q' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & l'' & l' \\ q' & -m'' & m' \end{pmatrix} \\
= & (-1)^{2L} \frac{1}{2L+1} \begin{Bmatrix} 1 & l'' & L \\ 1 & l & l' \end{Bmatrix}.
\end{aligned} \tag{3.80}$$

In den Gesamtausdruck eingesetzt führt dies zu

$$\begin{aligned}
M_c = & \frac{1}{2L+1} \sum_{n',l'',l',l} \begin{Bmatrix} 1 & l'' & L \\ 1 & l & l' \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} l & 1 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^{-1} \frac{\omega^3}{E_{n'} - (E_S - \omega)} \\
& \times \begin{pmatrix} L & 1 & l'' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} l'' & 1 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^{-1} \langle NL0 | \nabla^0 | l''0 \rangle \langle l''0 | r^0 | n'l'0 \rangle \langle n'l'0 | r^0 | l0 \rangle \langle l0 | \nabla^0 | NL0 \rangle.
\end{aligned} \tag{3.81}$$

Durch Auswerten der Symbole und Matrixelemente kommen wir zum Ergebnis

$$\begin{aligned}
 M_c = \sum_{n'} \frac{\omega^3}{E_{n'} - (E_S - \omega)} & \left\{ \frac{L+1}{2L+1} \frac{L+2}{2L+3} \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{n'L+2}(r) \left(r \frac{d}{dr} - L \right) R_{NL}(r) \right)^2 \right. \\
 & + \frac{L+1}{(2L+1)^2} \frac{1}{2L+3} \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{n'L}(r) \left(r \frac{d}{dr} - L \right) R_{NL}(r) \right)^2 \\
 & + 2 \frac{L}{2L+1} \frac{L+1}{2L+1} \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{n'L}(r) \left(r \frac{d}{dr} + (L+1) \right) R_{NL}(r) \right) \\
 & \times \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{n'L}(r) \left(r \frac{d}{dr} - L \right) R_{NL}(r) \right) \\
 & + \frac{L}{(2L+1)^2} \frac{1}{2L-1} \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{n'L}(r) \left(r \frac{d}{dr} + (L+1) \right) R_{NL}(r) \right)^2 \\
 & \left. + \frac{L}{2L+1} \frac{L-1}{2L-1} \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{n'L-2}(r) \left(r \frac{d}{dr} + (L+1) \right) R_{NL}(r) \right)^2 \right\}. \tag{3.82}
 \end{aligned}$$

3.5.4 $p^i r^2 \dots p^i$ -Matrixelement

Damit erreichen wir den vierten Term von (3.61):

$$M_d = \langle \Phi | \nabla^i r^2 \frac{\omega^3}{H_S - (E_S - \omega)} \nabla^i | \Phi \rangle. \tag{3.83}$$

Da es sich bei r^2 um eine skalare Größe handelt, können wir das Resultat aus Kap. 3.1 benutzen. Der einzige Unterschied ist, dass eine der Radialgleichungen mit r^2 multipliziert wird. Somit erhalten wir für dieses Matrixelement als Ergebnis

$$\begin{aligned}
 M_d = \sum_{n'} \frac{\omega^3}{E_{n'} - (E_S - \omega)} & \left\{ \frac{L}{2L+1} \int_0^\infty dr r^2 R_{n'L-1}(r) \left(r^2 \frac{d}{dr} + (L+1)r \right) R_{NL}(r) \right. \\
 & \times \int_0^\infty dr r^2 R_{n'L-1}(r) \left(\frac{d}{dr} + \frac{L+1}{r} \right) R_{NL}(r) + \frac{L+1}{2L+1} \\
 & \left. \times \int_0^\infty dr r^2 R_{n'L+1}(r) \left(\frac{d}{dr} - \frac{L}{r} \right) R_{NL}(r) \int_0^\infty dr r^2 R_{n'L+1}(r) \left(r^2 \frac{d}{dr} - Lr \right) R_{NL}(r) \right\}. \tag{3.84}
 \end{aligned}$$

3.5.5 $p^i r^i r^j \dots p^j$ -Matrixelement

Der letzte Term des Quadrupols ist nach (3.61) gegeben durch

$$M_e = \langle \Phi | \nabla^i r^i r^j \frac{\omega^3}{H_S - (E_S - \omega)} \nabla^j | \Phi \rangle. \tag{3.85}$$

Seine Berechnung geschieht durch Ausnutzen der in Kap. 3.1 und 3.5.2 bereits getätigten Rechnungen. Aus Kap. 3.5.2 wissen wir, dass es sich bei $p^i r^i$ um eine skalare Größe handelt, nämlich

einfach um $x \frac{d}{dx}$. Der Winkelanteil lässt sich dann wie in Kap. 3.1 ausrechnen und wir erhalten

$$\begin{aligned}
M_e &= \sum_{n'} \frac{\omega^3}{E_{n'} - (E_S - \omega)} \left\{ \frac{L+1}{2L+1} \int_0^\infty dr r^2 R_{n'L+1}(r) r^2 \frac{d}{dr} R_{NL}(r) \right. \\
&\quad \times \int_0^\infty dr r^2 R_{n'L+1}(r) \left(\frac{d}{dr} - \frac{L}{r} \right) R_{NL}(r) + \frac{L}{2L+1} \\
&\quad \left. \times \int_0^\infty dr r^2 R_{n'L-1}(r) r^2 \frac{d}{dr} R_{NL}(r) \int_0^\infty dr r^2 R_{n'L-1}(r) \left(\frac{d}{dr} + \frac{L+1}{r} \right) R_{NL}(r) \right\}. \tag{3.86}
\end{aligned}$$

3.5.6 Zusammenfassung der Quadrupol-Terme

Wir konnten aus allen Teilbeiträgen den ω -abhängigen Teil herausziehen. Um Aufwand zu sparen, bezeichnen wir das verbleibende Matrixelement, ohne den Ausdruck mit ω , mit $M_{n'}$. Es ergibt sich somit

$$\begin{aligned}
\delta E_{L,nq} &= \frac{\alpha}{\pi m} \frac{1}{m} \int_0^\epsilon d\omega \sum_{n'} \frac{\omega^3}{E_{n'} - (E_S - \omega)} M_{n'} \\
&= \frac{\alpha}{\pi m^2} \sum_{n'} \int_0^\epsilon d\omega \left\{ \frac{\omega - E_S + E_{n'}}{E_{n'} - E_S + \omega} \omega^2 - \omega^2 \frac{E_{n'} - E_S}{E_{n'} - E_S + \omega} \right\} M_{n'} \\
&= \frac{\alpha}{\pi m^2} \sum_{n'} \int_0^\epsilon d\omega \left\{ \omega^2 - \omega(E_{n'} - E_S) \frac{\omega - E_S + E_{n'}}{E_{n'} - E_S + \omega} + (E_{n'} - E_S)^2 \frac{\omega}{E_{n'} - E_S + \omega} \right\} M_{n'} \\
&= \frac{\alpha}{\pi m^2} \sum_{n'} M_{n'} \left\{ \frac{\epsilon^3}{3} - \frac{\epsilon^2}{2} (E_{n'} - E_S) + \epsilon (E_{n'} - E_S)^2 - (E_{n'} - E_S)^3 \ln \left(\frac{\epsilon}{(Z\alpha)^2 m} \right) \right. \\
&\quad \left. + (E_{n'} - E_S)^3 \ln \left(\frac{|E_{n'} - E_S|}{(Z\alpha)^2 m} \right) \right\}. \tag{3.87}
\end{aligned}$$

Zum relativistischen Bethe-Logarithmus trägt nur der Term der Ordnung ϵ^0 bei.

Wir fassen nun zum Ende dieses Abschnitts die einzelnen Beiträge des Quadrupols zu einem

zusammen. Als Beitrag des Quadrupols erhalten wir damit

$$\begin{aligned}
 \beta_{nq} = & \frac{N^3}{(Z\alpha)^6 m^3} \sum_{n'} (E_{n'} - E_S)^3 \ln \left(\frac{|E_{n'} - E_S|}{(Z\alpha)^2 m} \right) \frac{1}{15} \left[-3 \frac{L+2}{2L+3} \frac{(L+1)}{2L+1} \right. \\
 & \times \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{n'L+2}(r) \left(r \frac{d}{dr} - L \right) R_{NL}(r) \right)^2 + 4 \frac{L+1}{2L+1} \\
 & \times \int_0^\infty dr r^2 R_{n'L+1}(r) \left(\frac{d}{dr} - \frac{L}{r} \right) R_{NL}(r) \int_0^\infty dr r^2 R_{n'L+1}(r) \left(r^2 \frac{d}{dr} - Lr \right) R_{NL}(r) \\
 & - 2 \frac{L+1}{2L+1} \int_0^\infty dr r^2 R_{n'L+1}(r) r^2 \frac{d}{dr} R_{NL}(r) \int_0^\infty dr r^2 R_{n'L+1}(r) \left(\frac{d}{dr} - \frac{L}{r} \right) R_{NL}(r) \\
 & - \left(4 \frac{L+1}{2L+1} \frac{L+1}{2L+3} - \frac{L+1}{(2L+1)^2} \frac{1}{2L+3} \right) \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{n'L}(r) \left(r \frac{d}{dr} - L \right) R_{NL}(r) \right)^2 \\
 & - 2 \frac{L}{2L+1} \frac{L+1}{2L+1} \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{n'L}(r) \left(r \frac{d}{dr} + (L+1) \right) R_{NL}(r) \right) \\
 & \times \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{n'L}(r) \left(r \frac{d}{dr} - L \right) R_{NL}(r) \right) + \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{n'L}(r) r \frac{d}{dr} R_{NL}(r) \right)^2 \\
 & - \left(4 \frac{L}{2L+1} \frac{L}{2L-1} - \frac{L}{(2L+1)^2} \frac{1}{2L-1} \right) \\
 & \times \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{n'L}(r) \left(r \frac{d}{dr} + (L+1) \right) R_{NL}(r) \right)^2 \\
 & + 4 \frac{L}{2L+1} \int_0^\infty dr r^2 R_{n'L-1}(r) \left(r^2 \frac{d}{dr} + (L+1)r \right) R_{NL}(r) \\
 & \times \int_0^\infty dr r^2 R_{n'L-1}(r) \left(\frac{d}{dr} + \frac{L+1}{r} \right) R_{NL}(r) - 2 \frac{L}{2L+1} \\
 & \times \int_0^\infty dr r^2 R_{n'L-1}(r) r^2 \frac{d}{dr} R_{NL}(r) \int_0^\infty dr r^2 R_{n'L-1}(r) \left(\frac{d}{dr} + \frac{L+1}{r} \right) R_{NL}(r) \\
 & \left. - 3 \frac{L}{2L+1} \frac{L-1}{2L-1} \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{n'L-2}(r) \left(r \frac{d}{dr} + (L+1) \right) R_{NL}(r) \right)^2 \right]. \tag{3.88}
 \end{aligned}$$

3.6 Korrektur zur Energie

In diesem Abschnitt wollen wir den Korrekturterm berechnen, der sich durch die relativistische Energie ergibt. Dieser ergab sich nach (2.98) zu

$$\delta E_{L,\delta E} = -e^2 \int_{|\vec{k}| < \epsilon} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2|\vec{k}|} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{k^2} \right) \langle \Phi | \frac{p^i}{m} \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \delta E \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{p^j}{m} | \Phi \rangle. \tag{3.89}$$

Wir fügen vollständige Basen ein und erhalten

$$\begin{aligned} \delta E_{L,\delta E} &= -e^2 \int_{|\vec{k}| < \epsilon} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2m^2 |\vec{k}|} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\vec{k}^2} \right) \sum_{n,j,l,m,n',j',l',m'} \langle NJLM | p^i | njlm \rangle \\ &\quad \times \langle njlm | \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} | njlm \rangle \langle njlm | \delta E | n' j' l' m' \rangle \\ &\quad \times \langle n' j' l' m' | \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} | n' j' l' m' \rangle \langle n' j' l' m' | p^j | NJLM \rangle . \end{aligned} \quad (3.90)$$

Wir nutzen nun aus, dass δE nur eine Zahl ist, nämlich die relativistische Energiekorrektur des Referenzzustandes. Dadurch sehen wir, dass wir nur über n, j, m summieren müssen, da das Matrixelement mit n', j', m' nur dann von 0 verschieden ist, wenn $n = n'$ usw. gilt.

$$\begin{aligned} \delta E_{L,\delta E} &= -e^2 \int_{|\vec{k}| < \epsilon} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{\delta E}{2m^2 |\vec{k}|} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\vec{k}^2} \right) \sum_{n,j,l,m,q} (-1)^q \langle njlm | p^i | NJLM \rangle \\ &\quad \times \left(\frac{1}{E_n - (E_S - \omega)} \right)^2 \langle njlm | p^j | NJML \rangle . \end{aligned} \quad (3.91)$$

Bis auf einen Faktor entspricht dies dem Matrixelement von Kap. 3.1. Der einzige Unterschied ist, dass hier der Gesamtdrehimpuls J eine Rolle spielt, was aber am Ergebnis nichts ändert. Für die Energiekorrektur gibt uns die einschlägige Literatur z.B. [39]

$$\delta E = \frac{(Z\alpha)^4 m c^2}{2N^3} \left(\frac{3}{4N} - \frac{1}{J + \frac{1}{2}} \right), \quad J = L \pm \frac{1}{2}. \quad (3.92)$$

Wir können also wie in Kap. 3.1 die Integration nach $d\Omega_k$ durchführen. Die Integration nach ω ist anders und ergibt

$$\begin{aligned} \delta E_{L,\delta E} &= -\frac{2\alpha}{3\pi m^2} \delta E \int_0^\epsilon d\omega \sum_n \frac{\omega}{(E_n - E_S + \omega)^2} M_n \\ &= -\frac{2\alpha}{3\pi m^2} \delta E \sum_n \int_0^\epsilon d\omega \left\{ \frac{\omega - E_S + E_n}{(E_n - E_S + \omega)^2} - \frac{E_n - E_S}{(E_n - E_S + \omega)^2} \right\} M_n \\ &= -\frac{2\alpha}{3\pi m^2} \delta E \sum_n \int_0^\epsilon d\omega \left\{ \frac{1}{E_n - E_S + \omega} - \frac{E_n - E_S}{(E_n - E_S + \omega)^2} \right\} M_n \\ &= -\frac{2\alpha}{3\pi m^2} \frac{(Z\alpha)^4 m c^2}{2N^3} \left(\frac{3}{4N} - \frac{1}{J + \frac{1}{2}} \right) \sum_n \left\{ \ln \left(\frac{\epsilon}{(Z\alpha)^2 m} \right) \right. \\ &\quad \left. - \ln \left(\frac{|E_n - E_S|}{(Z\alpha)^2 m} \right) - 1 + \frac{1}{\epsilon} \right\} M_n, \end{aligned} \quad (3.93)$$

wobei M_n wieder das Matrixelement aus (3.27) ist. Als endlichen Niedrigenergiebeitrag erhalten wir also

$$\begin{aligned} \beta_{\delta E} &= \frac{c^2}{3m^2 (Z\alpha)^2} \left(\frac{3}{4N} - \frac{1}{J + \frac{1}{2}} \right) \sum_n \left[\ln \left(\frac{|E_n - E_S|}{(Z\alpha)^2 m} \right) + 1 \right] \\ &\quad \times \left\{ \frac{L+1}{2L+1} \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{nL+1}(r) \left(\frac{d}{dr} - \frac{L}{r} \right) R_{nL}(r) \right)^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{L}{2L+1} \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{nL-1}(r) \left(\frac{d}{dr} + \frac{L+1}{r} \right) R_{nL}(r) \right)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (3.94)$$

3.7 Korrektur zur Wellenfunktion

Die nächste Korrektur, mit der wir uns befassen wollen, ist der Beitrag aufgrund der Störung der Wellenfunktion (2.100), bei dem wir erneut die Integration nach $d\Omega_k$ durchgeführt haben, was

$$\delta E_{L,\delta\Phi} = -\frac{4\alpha}{3\pi m^2} \int_{\omega < \epsilon} d\omega \langle \Phi | p^i \frac{\omega}{H_S - (E_S - \omega)} p^i | \delta\Phi \rangle \quad (3.95)$$

ergibt. Die Korrektur zur Wellenfunktion ist notwendig, weil wir den Dirac-Hamiltonian als Schrödinger-Hamiltonian mit Störung aufgefasst haben und dabei auch die Wellenfunktion gestört wird. $\delta\Phi$ ist nach (2.88) gegeben durch

$$|\delta\Phi\rangle = \frac{1}{(E_S - H_S)'} \delta H |\Phi\rangle. \quad (3.96)$$

Durch Übergang zur Darstellung in Eigenfunktionen des Wasserstoff-Hamiltonians ergibt sich die, z.B. aus [39], bekannte Darstellung

$$|\delta\Phi\rangle = \sum_{k \neq N} |kJLM\rangle \frac{1}{E_S - E_k} \langle kJLM | \delta H | NJLM \rangle. \quad (3.97)$$

Über die anderen Quantenzahlen j, l, m wird hier nicht summiert, da δH in ihnen diagonal ist und sie somit denen des Referenzzustandes entsprechen. Das setzen wir nun in das Matrixelement ein, führen eine weitere vollständige Basis ein, gehen zu sphärischen Koordinaten über und erhalten dann

$$\begin{aligned} \delta E_{L,\delta\Phi} &= -\frac{4\alpha}{3\pi m^2} \int_{\omega < \epsilon} d\omega \sum_{\substack{k,n,j,l,m,q \\ k \neq N}} (-1)^q \langle NJLM | \nabla_{1q} | njlm \rangle \langle njlm | \frac{\omega}{H_S - (E_S - \omega)} | njlm \rangle \\ &\quad \times \langle njlm | \nabla^{1-q} | kJLM \rangle \frac{1}{E_S - E_k} \langle kJLM | \delta H | kJLM \rangle. \end{aligned} \quad (3.98)$$

Die beiden ∇ -Matrixelemente lassen sich analog zu den bisherigen Rechnungen behandeln; beim Matrixelement mit δH ist aufgrund der Diagonalität keine Winkelalgebra außer dem Auswerten von $\vec{\sigma} \cdot \vec{L}$ erforderlich. Indem wir noch (2.86) einsetzen, erhalten wir

$$\begin{aligned} \delta E_{L,\delta\Phi} &= \frac{2\alpha}{3\pi m^2} \int_{\omega < \epsilon} d\omega \sum_{k \neq N, n} \frac{1}{E_S - E_k} \frac{\omega}{E_n - E_S + \omega} \\ &\quad \times \langle kJLM | \frac{p^4}{4m^3} - \frac{Z\alpha}{2m^2 r^3} \vec{\sigma} \cdot \vec{L} | NJLM \rangle \left\{ \frac{L+1}{2L+1} \right. \\ &\quad \times \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{nL+1}(r) \left(\frac{d}{dr} - \frac{L}{r} \right) R_{kL}(r) \right) \\ &\quad \times \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{nL+1}(r) \left(\frac{d}{dr} - \frac{L}{r} \right) R_{NL}(r) \right) \\ &\quad + \frac{L}{2L+1} \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{nL-1}(r) \left(\frac{d}{dr} + \frac{L+1}{r} \right) R_{kL}(r) \right) \\ &\quad \left. \times \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{nL-1}(r) \left(\frac{d}{dr} + \frac{L+1}{r} \right) R_{NL}(r) \right) \right\}. \end{aligned} \quad (3.99)$$

Wir schreiben das verbleibende Matricelement ebenfalls in ein Radialintegral um und führen die ω -Integration aus. Damit erhalten wir hier als endlichen Beitrag

$$\begin{aligned}
\beta_{\delta\Phi} &= \frac{2N^3}{3m^3(Z\alpha)^4} \sum_n \sum_{k \neq N} \frac{E_n - E_S}{E_S - E_k} \ln \left(\frac{|E_n - E_S|}{(Z\alpha)^2 m} \right) \\
&\times \int_0^\infty dr r^2 R_{kL}(r) \left[\frac{1}{4m^3} \left(\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{L(L+1)}{r^2} \right)^2 - \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{L}}{2m^2 r^3} \right] R_{NL}(r) \\
&\times \left\{ \frac{L+1}{2L+1} \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{nL+1}(r) \left(\frac{d}{dr} - \frac{L}{r} \right) R_{kL}(r) \right) \right. \\
&\times \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{nL+1}(r) \left(\frac{d}{dr} - \frac{L}{r} \right) R_{NL}(r) \right) \\
&+ \frac{L}{2L+1} \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{nL-1}(r) \left(\frac{d}{dr} + \frac{L+1}{r} \right) R_{kL}(r) \right) \\
&\left. \times \left(\int_0^\infty dr r^2 R_{nL-1}(r) \left(\frac{d}{dr} + \frac{L+1}{r} \right) R_{NL}(r) \right) \right\}. \tag{3.100}
\end{aligned}$$

Die beiden möglichen Werte von $\vec{\sigma} \cdot \vec{L}$ für $J = L \pm \frac{1}{2}$ sind dabei:

$$\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{L}}{2} \left| NL - \frac{1}{2} LM \right\rangle = -\frac{L+1}{2} \left| NL - \frac{1}{2} LM \right\rangle, \tag{3.101}$$

$$\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{L}}{2} \left| NL + \frac{1}{2} LM \right\rangle = \frac{L}{2} \left| NL + \frac{1}{2} LM \right\rangle. \tag{3.102}$$

3.8 *LS*-Korrektur des Hamiltonians

Zum Abschluss müssen wir noch den Beitrag von (2.99) behandeln. Es bietet sich an, diesen hier in zwei Teile aufzuspalten, da bei der Korrektur durch *LS* der Spin zu berücksichtigen ist. Das ist bei p^4 nicht der Fall. Wir haben also

$$\begin{aligned}
\delta E_{L, \delta H(LS)} &= e^2 \int_{|\vec{k}| < \epsilon} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2|\vec{k}|} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{k^2} \right) \langle \Phi | \frac{p^i}{m} \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \\
&\times \frac{Z\alpha}{4m^2 r^3} \left(\vec{L} \cdot \vec{\sigma} \right) \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{p^j}{m} | \Phi \rangle \tag{3.103}
\end{aligned}$$

zu berechnen. Die Korrekturen zum Hamiltonian stellten sich als schwer zu berechnen heraus, da hier zwei Propagatoren nötig sind und der Operator auf die virtuellen Zwischenzustände wirkt. Deshalb verwenden wir hier einen etwas anderen Ansatz aus [36], in dem wir einen neuen Hamiltonian definieren

$$H(\eta) = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{Z\alpha}{r} + \eta \frac{Z\alpha}{4m^2 r^3} \vec{\sigma} \cdot \vec{L}. \tag{3.104}$$

Damit berechnen wir analog zum nichtrelativistischen Dipol

$$\beta(\eta) = -\frac{4}{3} \ln k_0(\eta). \tag{3.105}$$

Es ist dabei zu beachten, dass wir hier, wie bei den weiteren Korrekturen, im Logarithmus $(Z\alpha)m$ als Skala verwenden. Wir benutzen die Operatoridentität

$$-\frac{\partial}{\partial\eta} \frac{1}{H(\eta) - E_S + \omega} \Big|_{\eta=0} = \frac{1}{H - E_S + \omega} \frac{Z\alpha}{4m^2r^3} \vec{\sigma} \cdot \vec{L} \frac{1}{H - E_S + \omega}, \quad (3.106)$$

wobei $H = H(\eta = 0)$ dem Schrödinger-Hamiltonian entspricht. Wir sehen, dass die Ableitung dieser Korrektur nach η genau dem zu berechnenden Ausdruck für die LS -Korrektur des Hamiltonians entspricht. Es ist zu beachten, dass E_S weiter die Schrödinger-Energie des Referenzzustands ist. Wir vertauschen nun Integration und Differentiation und wenden damit die Differentiation auf den komplett integrierten Ausdruck an, also auf $\beta(\eta)$. Die LS -Korrektur zum Hamiltonian erhalten wir damit durch

$$\beta_{LS} = -\frac{\partial\beta(\eta)}{\partial\eta}. \quad (3.107)$$

Um aber nicht für die beiden unterschiedlichen Gesamtdrehimpulse die Berechnung zweimal ausführen zu müssen, errechnen wir die Vorfaktoren, mit denen die Terme für $L - 1$ und $L + 1$ aufgrund der Racah-Algebra multipliziert werden. Wir betrachten erstmal

$$M_{\delta H(LS)} = \langle \Phi | p^i \frac{1}{H(\eta) - (E_S - \omega)} p^i | \Phi \rangle. \quad (3.108)$$

Dazu gehen wir analog zu den Abschnitten 3.1 und 3.3 vor; der Spin ist dabei selbstverständlich zu berücksichtigen. Wir führen zuerst eine vollständige Basis von $H(\eta)$ ein und benutzen dann (3.42) und (3.41):

$$\begin{aligned} M_{\delta H(LS)} &= \sum_{n,j,l,m,q} (-1)^q \langle NJLSM | \nabla_{1q} | njlsm \rangle' \\ &\quad \times \langle njlsm | \frac{1}{H(\eta) - E_S + \omega} | njlsm \rangle' \langle njlsm | \nabla_{1-q} | NJLSM \rangle \\ &= \sum_{n,j,l,m,q} |\langle njlsm | \nabla_{1-q} | NJLSM \rangle|^2 \frac{1}{E_n(\eta) - E_S + \omega}. \end{aligned} \quad (3.109)$$

Der Strich soll dabei bedeuten, dass es sich bei den so gekennzeichneten Zuständen um Eigenzustände von $H(\eta)$ handelt und nicht um Eigenzustände von H_S . Wir können den LS -Term aus dem Hamiltonian herausziehen und haben dann die gesamte Drehimpulsabhängigkeit in der Racah-Algebra und davon ist das neue $E'_n(\eta)$ dann unabhängig:

$$\begin{aligned} M_{\delta H(LS)} &= \frac{(-1)^{2J+1}}{2J+1} \sum_{n,j} \frac{1}{\left(\begin{array}{ccc} j & 1 & J \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{array} \right)^2} \frac{1}{E'_n(\eta) - E_S + \omega} \\ &\quad \times \left\{ (-1)^{2J+1} (2J+1)(L+1) \left[j(j+1) - (L+1)(L+2) - \frac{3}{4} \right] \right. \\ &\quad \times \left[\int_0^\infty dr r^2 R'_{nL+1}(r, \eta) \left(\frac{d}{dr} - \frac{L}{r} \right) R_{NL}(r) \right]^2 \\ &\quad \times \left\{ \begin{array}{ccc} J & j & 1 \\ L+1 & L & \frac{1}{2} \end{array} \right\}^2 \left(C_{J\frac{1}{2}10}^{j\frac{1}{2}} \right)^2 + (-1)^{2J+1} (2J+1)L \\ &\quad \times \left[j(j+1) - L(L-1) - \frac{3}{4} \right] \left\{ \begin{array}{ccc} J & j & 1 \\ L-1 & L & \frac{1}{2} \end{array} \right\}^2 \left(C_{J\frac{1}{2}10}^{j\frac{1}{2}} \right)^2 \\ &\quad \left. \times \left[\int_0^\infty dr r^2 R'_{nL-1}(r, \eta) \left(\frac{d}{dr} + \frac{L+1}{r} \right) R_{NL}(r) \right]^2 \right\}. \end{aligned} \quad (3.110)$$

Wir betrachten nun die zwei möglichen Fälle für J , nämlich $J = L - \frac{1}{2}$ und $J = L + \frac{1}{2}$. Desweiteren bezeichnen wir die Ergebnisse für $L \rightarrow L - 1$ und $L \rightarrow L + 1$ ohne den Faktor $\vec{L} \cdot \vec{\sigma}$ mit Q_{L-1} bzw. Q_{L+1} . Im Falle $J = L - \frac{1}{2}$ gibt es für $L \rightarrow L + 1$ nur die Möglichkeit $j \rightarrow J + 1$, d.h. die Summe für $L \rightarrow L + 1$ enthält nur einen Term und man erhält

$$\begin{aligned} (\vec{L} \cdot \vec{\sigma}) Q_{L+1} &= \left((L+1)^2 - \frac{1}{4} - L^2 - 3L - 2 - \frac{3}{4} \right) Q_{L+1} \\ &= -(L+2)Q_{L+1}. \end{aligned} \quad (3.111)$$

Bei $L \rightarrow L - 1$ gibt es nun allerdings zwei Terme, die gewichtet mit $\vec{L} \cdot \vec{\sigma}$ addiert werden; da dieses Vorfaktoren enthält, die auch in Q_{L-1} stecken, ist noch durch diese zu dividieren. Wir berechnen in diesem Fall also

$$VQ = \frac{(\vec{L} \cdot \vec{\sigma}) A + (\vec{L} \cdot \vec{\sigma}) B}{A + B}, \quad (3.112)$$

wobei A und B die Vorfaktoren sind, die sich ohne $\vec{L} \cdot \vec{\sigma}$ durch die Winkelalgebra ergeben. So erhalten wir

$$VQ = \frac{(L-1)(1-L-2L^2)}{L(2L-1)} Q_{L-1} = -\frac{(L+1)(L-1)}{L} Q_{L-1}. \quad (3.113)$$

Bei $J = L + \frac{1}{2}$ geht die Rechnung analog, nur gibt es hier für $L \rightarrow L - 1$ nur einen Term und für $L \rightarrow L + 1$ zwei. Wir bekommen nun

$$\begin{aligned} (\vec{L} \cdot \vec{\sigma}) Q_{L-1} &= \left(L^2 - \frac{1}{4} - L^2 + L - \frac{3}{4} \right) Q_{L-1} \\ &= (L-1)Q_{L-1} \end{aligned} \quad (3.114)$$

$$VQ = \frac{(L+2)(1-(L+1)(2L+1))}{(L+1)(2L+3)} Q_{L+1} = \frac{L(L+2)}{L+1} Q_{L+1} \quad (3.115)$$

heraus. Nachdem die weiteren Integrale ausgeführt wurden, erhalten wir den endlichen Beitrag zum relativistischen Bethe-Logarithmus zu

$$\begin{aligned} \beta_{\delta H(LS)} &= \frac{2N^3}{3(Z\alpha)^6 m^3} \frac{\partial}{\partial \eta} \sum_n (E_n(\eta) - E_S) \ln \left(\frac{|E_n(\eta) - E_S|}{(Z\alpha)^2 m} \right) \\ &\times \left\{ \left[(L+2)\delta_{J,L-\frac{1}{2}} - \frac{L(L+2)}{L+1}\delta_{J,L+\frac{1}{2}} \right] \right. \\ &\times \frac{L+1}{2L+1} \left(\int_0^\infty dr r^2 R'_{nL+1}(r, \eta) \left(\frac{d}{dr} - \frac{L}{r} \right) R_{NL}(r) \right)^2 \\ &+ \left[\frac{(L+1)(L-1)}{L}\delta_{J,L-\frac{1}{2}} - (L-1)\delta_{J,L+\frac{1}{2}} \right] \\ &\times \left. \frac{L}{2L+1} \left(\int_0^\infty dr r^2 R'_{nL-1}(r, \eta) \left(\frac{d}{dr} + \frac{L+1}{r} \right) R_{NL}(r) \right)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (3.116)$$

3.9 p^4 -Korrektur des Hamiltonians

Der Ansatz zur Berechnung des zweiten Anteils der Korrektur zum Hamiltonian

$$\begin{aligned} \delta E_{L, \delta H(p^4)} &= -e^2 \int_{|\vec{k}| < \epsilon} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{2|\vec{k}|} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{k^2} \right) \langle \Phi | \frac{p^i}{m} \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \\ &\times \frac{(\vec{p}^2)^2}{8m^3} \frac{1}{H_S - (E_S - \omega)} \frac{p^j}{m} | \Phi \rangle \end{aligned} \quad (3.117)$$

ist analog dem des ersten. Wir definieren diesmal

$$H(\eta) = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{Z\alpha}{r} - \eta \frac{p^4}{8m^3} \quad (3.118)$$

als neuen Hamiltonian und berechnen $\beta(\eta)$. Auch hier gilt, dass die Ableitung nach η die ursprüngliche Korrektur ergibt, also

$$-\frac{\partial}{\partial \eta} \frac{1}{H(\eta) - E_S + \omega} \Big|_{\eta=0} = -\frac{1}{H - E_S + \omega} \frac{p^4}{8m^3} \frac{1}{H - E_S + \omega}. \quad (3.119)$$

Es ist damit

$$M_{\delta H(p^4)} = \langle \Phi | p^i \frac{1}{H(\eta) - (E_S - \omega)} p^i | \Phi \rangle \quad (3.120)$$

zu berechnen. Die Winkelintegration führen wir auf gewohnte Weise durch und erhalten nach der Integration nach ω für den endlichen Beitrag

$$\begin{aligned} \beta_{\delta H(p^4)} = & -\frac{2N^3}{3(Z\alpha)^6 m^3} \frac{\partial}{\partial \eta} \sum_n (E'_n(\eta) - E_S) \ln \left(\frac{|E'_n(\eta) - E_S|}{(Z\alpha)^2 m} \right) \left\{ \frac{L+1}{2L+1} \right. \\ & \times \left(\int_0^\infty dr r^2 R'_{nL+1}(r, \eta) \left(\frac{d}{dr} - \frac{L}{r} \right) R_{NL}(r) \right)^2 + \frac{L}{2L+1} \\ & \left. \times \left(\int_0^\infty dr r^2 R'_{nL-1}(r, \eta) \left(\frac{d}{dr} + \frac{L+1}{r} \right) R_{NL}(r) \right)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (3.121)$$

Ab hier gehen wir nun anders vor als bei der Korrektur aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung. Die hier als R' dargestellten Funktionen sind Eigenfunktionen zum gestörten Hamiltonian $H(\eta)$. Für die p^4 -Korrektur werden wir allerdings nicht mit den exakten Eigenfunktionen rechnen, da es sich in der Praxis als einfacher herausgestellt hat, die Störungstheorie zu benutzen. In erster Ordnung ist die gestörte Wellenfunktion damit nach [39] und Kap. 3.7 gegeben durch

$$|njlm\rangle' = |njlm\rangle - \eta \sum_{k \neq n} |kjl m\rangle \frac{1}{E_n - E_k} \langle kjl m | \frac{p^4}{8m^3} |njlm\rangle. \quad (3.122)$$

Wie in Kap. 3.7 beschrieben, ist p^4 diagonal in allen Quantenzahlen außer n . Im obigen Matrixelement lässt sich somit die Winkelintegration direkt ausführen und wir erhalten eine Strörungsreihe nur für den Radialteil. Dabei verfahren wir ähnlich wie in [39] und schreiben

$$\frac{p^4}{8m^3} = \frac{1}{2m} \left(\frac{p^2}{2m} \right)^2 = \frac{1}{2m} \left(H_0 + \frac{Z\alpha}{r} \right)^2.$$

Wir setzen dies ein und erhalten

$$\begin{aligned} R'_{nl}(r, \eta) = & R_{nl}(r) - \frac{\eta}{2m} \sum_{k \neq n} R_{kl}(r) \frac{1}{E_n - E_k} \left(E_k E_n \delta_{k,n} \right. \\ & \left. + \int_0^\infty dr r^2 R_{kl}(r) \left((E_k + E_n) \frac{Z\alpha}{r} + \frac{(Z\alpha)^2}{r^2} \right) R_{nl}(r) \right). \end{aligned} \quad (3.123)$$

Wie man in (3.121) sieht, muss man natürlich auch noch die Störung der Energie der virtuellen Zwischenzustände in erster Ordnung mitnehmen. Aus der Literatur (z.B. [39]) findet man

$$E'_n = E_n - \eta \langle njlm | \frac{p^4}{8m^3} |njlm\rangle, \quad (3.124)$$

was sich analog zur Wellenfunktion zu

$$E_n(\eta) = E_n - \frac{\eta}{2m} \left(E_n^2 + \int_0^\infty dr r^2 \left(2E_n \frac{Z\alpha}{r} + \frac{(Z\alpha)^2}{r^2} \right) R_{nl}^2(r) \right) \quad (3.125)$$

umformen lässt.

Kapitel 4

Numerische Berechnung von relativistischen Bethe-Logarithmen

Mit Hilfe der Rechnungen in Kapitel 3 konnten wir die Ausdrücke für die relativistischen Bethe-Logarithmen soweit vereinfachen, dass wir es nur noch mit eindimensionalen Radialintegralen zu tun haben. Dies geschah, indem wir die separierten Lösungen der Schrödinger-Gleichung des Wasserstoff-Atoms ausgenutzt haben. Außerdem konnte durch die Ausführung der Winkelintegration und das Ausnutzen algebraischer Beziehungen erreicht werden, dass die Summe über alle Quantenzahlen der vollständigen Basis, zu einer allein über die Hauptquantenzahl vereinfacht werden konnte.

Wir stehen nun allerdings vor dem Problem, dass sich die Radialintegrale zwar für einzelne gebundene Zustände leicht berechnen lassen, aber für unendlich viele auch ungebundene nicht. Man könnte nun fragen, warum wir vollständige Basen eingeführt haben, anstatt z.B. den Ansatz von [21] zu verfolgen. Bei diesem werden die Ausdrücke allerdings für höhere Hauptquantenzahlen immer länger, so dass sie kaum mehr berechenbar sind. Dafür ist der Propagator mitverantwortlich. Durch die vollständige Basis lässt er sich stark vereinfachen für den Preis, dass die nötige Berechnung aller Radialintegrale sowie die anschließende Aufsummierung nur numerisch möglich ist.

Die Lösung bietet nun ein in [34] vorgestelltes Verfahren, mit dem sich die erhaltenen Integrale und auch die Summe über sie leicht berechnen lassen. Dabei diskretisieren wir den zu berechnenden Ausdruck und setzen ihn auf ein Gitter. Dazu benutzen wir ein in Fortran 90 geschriebenes Programm. Im ersten Abschnitt beschäftigen wir uns mit der allgemeinen Methode, wie die Schrödinger-Gleichung auf das Gitter übertragen wird und, wie wir aus ihr die vollständige Basis bestimmen. Im zweiten Teil stellen wir dar, wie wir mit unserem Programm und der diskreten Schrödinger-Gleichung den relativistischen Bethe-Logarithmus bestimmen.

Der Grund, warum wir Fortran 90 verwenden, liegt darin, dass es uns für dieses Problem sehr gut geeignete und gleichzeitig schnelle Routinen an die Hand gibt, um die hier auftretenden Terme zu berechnen.

4.1 Diskretisierung der Schrödinger-Gleichung

Um den Bethe-Logarithmus zu berechnen, brauchen wir die vollständige Basis. In diesem Abschnitt wird gezeigt, wie man diese als Lösung einer diskretisierten Schrödinger-Gleichung mit Hilfe der Methoden von [34] bestimmen kann. Bei anderen Methoden wird der Basissatz sehr häufig mit endlich vielen gebundenen und endlich vielen Kontinuumszuständen beschrieben. Dies

hat allerdings die Nachteile, dass der Basissatz so nicht vollständig ist, und auch, dass versucht wird, den kompletten Raum damit zu beschreiben. Die Wellenfunktionen eines gebundenen Zustands fallen aber ab einer gewissen Entfernung vom Ursprung so stark ab, dass in einem gewissen Abstand eigentlich keine Aufenthaltswahrscheinlichkeit mehr vorhanden ist. Für Kontinuumszustände gilt dies auch, da auch sie nur in einem gewissen Bereich um die Störung von einer freien Lösung abweichen. Somit können wir das Atom auch in eine sphärische Box einsperren, die groß genug ist, dass die Wellenfunktion am Rand schon stark genug abgefallen ist und so die Zustände nicht durch den Rand gestört werden. Gehen wir nun von kontinuierlichen Koordinaten innerhalb der Sphäre zu diskreten, bestehend aus N Gitterpunkten, über, so erhält man einen Basissatz aus N Zuständen, der innerhalb der Sphäre und in dem diskreten Raum vollständig ist. Wir gehen aus von der radialen Schrödinger-Gleichung des Wasserstoff-Atoms

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 L(L+1)}{2r^2} - \frac{Z\alpha}{r} \right] R_L(r) = ER_L(r), \quad (4.1)$$

die man z.B. in [39] finden kann. Wir benutzen atomare Einheiten und setzen $P_L = rR_L$. Damit bekommen wir

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{L(L+1)}{2r^2} - \frac{Z}{r} \right] P_L(r) = EP_L(r). \quad (4.2)$$

Statt des üblichen linearen Gitters mit

$$r = ax,$$

verwenden wir ein logarithmisches Gitter mit

$$r = r_0(e^{ax} - 1).$$

Die Ursache dafür ist das Verhalten der radialen Wellenfunktion, die mit e^{-r} abfällt. Damit hat das Gitter einen geringeren Abstand der Punkte, dort, wo die Wellenfunktion nicht vom exponentiellen Abfall dominiert wird und approximiert dort genauer. Weiter außen ist der Abstand der Punkte größer, dort ist dann die Wellenfunktion schon stark durch die Exponentialfunktion unterdrückt, womit hier nicht so viele Punkte zur guten Approximation notwendig sind.

Bei der vollständigen Basis ist es wünschenswert, dass sie auch noch ein Orthonormalsystem bildet. Dies lässt sich für ein symmetrisches Eigenwertproblem garantieren. Es sollte nun also unser Ziel sein, dass die Schrödinger-Gleichung diskretisiert zu einem symmetrischen Problem führt. Wie in [34] dargestellt, muss man allerdings bei einem logarithmischen Gitter erst die folgende Transformation durchführen, damit der durch die Schrödinger-Gleichung gegebene Hamiltonian symmetrisch wird:

$$P_L(r) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{r+r_0}} P_L(x).$$

Wir betrachten nur die Transformation auf die Ableitung, da bei den anderen Termen nur der Wurzelfaktor dazukommt. Dort bekommen wir

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dr^2} \frac{1}{\sqrt{r+r_0}} P_L(x) &= \left(\frac{d^2}{dr^2} \frac{1}{\sqrt{r+r_0}} \right) P_L(x) + 2 \left(\frac{d}{dr} \frac{1}{\sqrt{r+r_0}} \right) \left(\frac{d}{dr} P_L(x) \right) \\ &\quad + \frac{1}{\sqrt{r+r_0}} \left(\frac{d^2}{dr^2} P_L(x) \right) \\ &= \frac{3}{4(r+r_0)^{\frac{5}{2}}} P_L(x) - \frac{2}{(r+r_0)^{\frac{5}{2}}} \left(\frac{d}{dx} P_L(x) \right) + \frac{1}{(r+r_0)^{\frac{5}{2}}} \left(\frac{d^2}{dx^2} P_L(x) \right). \end{aligned} \quad (4.3)$$

Wir setzen in den Hamiltonian (4.2) ein und es ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{r+r_0}} EP_L(x) &= -\frac{3}{8(r+r_0)^{\frac{5}{2}}} P_L(x) + \frac{1}{(r+r_0)^{\frac{5}{2}}} \left(\frac{d}{dx} P_L(x) \right) \\ &\quad - \frac{1}{2(r+r_0)^{\frac{5}{2}}} \left(\frac{d^2}{dx^2} P_L(x) \right) + \frac{1}{\sqrt{r+r_0}} \left(\frac{L(L+1)}{2r^2} - \frac{Z}{r} \right) P_L(x). \end{aligned} \quad (4.4)$$

Damit transformiert sich der Hamiltonian zu

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{1}{r+r_0} \frac{d^2}{dx^2} \frac{1}{r+r_0} + \frac{L(L+1)}{2r^2} - \frac{Z}{r} + \frac{1}{8(r+r_0)^2} \right] P_L(x) = EP_L(x).$$

Die Ableitung wird durch eine Interpolationsformel für die zweite Ableitung berechnet. Statt der in [34] benutzten Fünfpunktformel, verwenden wir allerdings eine Elfpunktformel, deren Herleitung man in App. A.2 finden kann. Es ist dabei zu beachten, dass man dank der Transformation nun die Ableitungsformeln eines linearen Problems verwenden muss. Man erhält somit

$$\begin{aligned} y''(x) = \frac{1}{50400h^2} & \left(-8y(x-5h) + 125y(x-4h) - 1000y(x-3h) + 6000y(x-2h) \right. \\ & - 42000y(x-h) + 73766y(x) - 42000y(x+h) + 6000y(x+2h) \\ & \left. - 1000y(x+3h) + 125y(x+4h) - 8y(x+5h) \right) + \mathcal{O}(h^{10}). \end{aligned} \quad (4.5)$$

Dabei bezeichnet h den linearen Gitterabstand und $y(x) = \frac{1}{r+r_0} P_L(x)$. Setzen wir dies in den Hamiltonian ein, so führt uns dies auf ein symmetrisches $N \times N$ Eigenwertproblem

$$(A + D)\vec{P}_L = E\vec{P}_L, \quad (4.6)$$

wobei wir \vec{P} definieren als

$$\vec{P}_L = (P_L(x_1), P_L(x_2), \dots, P_L(x_N)). \quad (4.7)$$

A ist durch die Diagonalmatrix

$$A_{i,j} = \left(-\frac{Z}{r_i} + \frac{L(L+1)}{2r_i^2} + \frac{1}{8(r_i+r_0)^2} \right) \delta_{ij} \quad (4.8)$$

gegeben. Die Ableitung liefert uns die symmetrische Bandmatrix

$$D = \frac{1}{50400h^2} \begin{pmatrix} \frac{73766}{R_1 R_1} & -\frac{42000}{R_1 R_2} & \frac{6000}{R_1 R_3} & -\frac{1000}{R_1 R_4} & \frac{125}{R_1 R_5} & -\frac{8}{R_1 R_6} & 0 & 0 & \dots \\ -\frac{42000}{R_2 R_1} & \frac{73766}{R_2 R_2} & -\frac{42000}{R_2 R_3} & \frac{6000}{R_2 R_4} & -\frac{1000}{R_2 R_5} & \frac{125}{R_2 R_6} & -\frac{8}{R_2 R_7} & 0 & \dots \\ \frac{6000}{R_3 R_1} & -\frac{42000}{R_3 R_2} & \frac{73766}{R_3 R_3} & -\frac{42000}{R_3 R_4} & \frac{6000}{R_3 R_5} & -\frac{1000}{R_3 R_6} & \frac{125}{R_3 R_7} & -\frac{8}{R_3 R_8} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (4.9)$$

wobei wir hier $R_i = r_i + r_0$ zur Abkürzung verwenden. Für die Ableitung am inneren Rand des Gitters berücksichtigt man noch den Einfluss von Punkten, die näher am Ursprung liegen. Wie dies funktioniert, wird in [34] beschrieben. Auf diese Weise erhalten wir einen vollständigen Satz von Eigenfunktionen und -werten, die das vollständige Eigensystem dieser Matrix bilden. Es lässt sich dabei ausnutzen, dass es sich um eine reelle, symmetrische Blockdiagonalmatrix handelt. Denn für solche existieren in der Fortran-Library LAPACK spezielle Diagonalisierungsroutinen, die uns schnell die Eigenfunktionen und -werte bestimmen. Es ist aber zu beachten, dass man diese Diagonalisierung für jedes L separat durchführen muss.

4.2 Programm zur Berechnung

In diesem Abschnitt wollen wir den Aufbau und die Funktionsweise des von uns geschriebenen Fortran 90 Programms darstellen. Außerdem soll beschrieben werden, wie wir den relativistischen Bethe-Logarithmus berechnen. Wenn wir im Folgenden etwas in **typewriter font** angeben,

handelt es sich um Auszüge aus dem Fortran 90 Programm. Alle relevanten Größen werden in DOUBLE PRECISION angegeben, die dann mittels Kompilierung zu QUADRUPOLE PRECISION erhoben werden.

Das Programm soll uns die in Abschnitt 3 erhaltenen Beiträge auswerten, die im Allgemeinen folgende Struktur haben:

$$\beta = CN^3 \sum_{n,l} \text{Log}(|E_n - E|) (E_n - E) \text{VF}(l) \times \int_0^\infty dr r^2 R_{nl}(r) O_1 R_{N,L}(r) \int_0^\infty dr r^2 R_{nl}(r) O_2 R_{N,L}(r), \quad (4.10)$$

wobei der Ausdruck in atomaren Einheiten angegeben ist.

4.2.1 Erzeugung der vollständigen Basis

Den benötigten vollständigen Satz von Eigenfunktionen erhalten wir, indem wir für jeden, der nach Kap. 3 erlaubten Drehimpulswerte, einen Hamiltonian erzeugen. Das geschieht über die Routine HAMIL. Dort wird zuerst eine Matrix erzeugt, die einen Teil der Werte von D beinhaltet:

```

NN = 1.D0/(50400.D0*H**2)
X = RESHAPE((/50400.D0, -29400.D0, 1890.D0, -320.D0, 125.D0/2.D0,
-   -4.D0, 63000.D0, -35700.D0, 3570.D0, -500.D0, 125.D0/2.D0,
-   -4.D0, 68600.D0, -39060.D0, 4890.D0, -640.D0, 125.D0/2.D0,
-   -4.D0, 71750.D0, -41160.D0, 5520.D0, -820.D0, 85.D0,
-   -4.D0, 73766.D0, -42000.D0, 6000.D0, -1000.D0, 125.D0,
-   -8.D0, 73766.D0, -42000.D0, 6000.D0, -1000.D0, 125.D0,
-   -8.D0/), (/6,6/))

```

Wir nutzen aus, dass die Bandmatrix D symmetrisch ist und nehmen nur eine der Nebendiagonalseiten in die Matrix auf. Hier sieht man auch den weiter oben beschriebenen Fall, dass man am unteren Rand nicht die volle Ableitung benutzen kann, sondern den Effekt hereinnimmt, der von Punkten mit kleinerem r kommt. Mit dieser Matrix füllen wir nun unseren Hamiltonian auf, allerdings nutzen wir die Struktur aus, dass es sich um eine symmetrische Bandmatrix handelt. Wir erzeugen eine komprimierte Darstellung des Hamiltonians, bei der wir nur die Haupt- und Nebendiagonalen als Zeilen in ihn aufnehmen. Die erste Zeile ist dabei die Hauptdiagonale, die zweite die erste obere Nebendiagonale usw. Die unteren Nebendiagonalen sind den oberen gleich und werden darum nicht extra aufgenommen. Somit erzeugen wir den Hamiltonian über diesen Code:

```

HH(1:M+1,1:M+1) = X
DO I=M+2,N
HH(1:M+1,I) = X(1:M+1,M+1)
ENDDO

```

Dabei wird der innere Teil direkt mit der Matrix X gefüllt und die restlichen Spalten werden mit der letzten Spalte von X gefüllt, da man dort ohne Schwierigkeiten die volle Elfpunkte-Ableitungsformel verwenden kann. Am äußeren Rand kann sie zwar, wie am inneren, nicht mit allen Punkten benutzt werden, aber da die Wellenfunktion dort sehr klein ist, ist der dadurch gemachte Fehler nicht relevant. Um die Ableitung zu komplettieren, muss noch durch R_i geteilt und mit NN multipliziert werden:

```

HH = NN*HH
DO I=1,N
RI(I) = 1.D0/R(I)

```

```

RIO(I)= 1.DO/(R(I)+R0)
ENDDO
DO J=0,M
DO I=1,N-J
HH(J+1,I) = HH(J+1,I)*RIO(J+I)*RIO(I)
ENDDO
ENDDO

```

Zum Abschluss ist noch die Diagonalmatrix A zu addieren. Dies bedeutet in dieser gepackten Schreibweise, dass zur ersten Zeile die Terme aus A addiert werden. Dies geschieht durch den folgenden Code:

```

DO I=1,N
HH(1,I) = HH(1,I) - Z*RI(I) + 0.5D0*L*(L+1.DO)*RI(I)**2 +
- 0.125D0*RIO(I)**2
ENDDO

```

Nun müssen wir noch die Eigenfunktionen und -werte dieser Matrix bestimmen. Dazu bietet die Fortran Library LAPACK die richtigen Routinen an, insbesondere eine Routine, die für reelle, symmetrische Bandmatrizen gemacht ist. Diese Routine kann gerade eine solche gepackte Eingabe verarbeiten, wie wir sie bei der Matrix HH benutzt haben. Wir verwenden die LAPACK-Routine $DSBEVD$, die einen "Divide and Conquer"-Algorithmus benutzt, um damit die Eigenvektoren und -werte in `DOUBLE PRECISION` zu bestimmen. Auch die verwendeten LAPACK Routinen wurden in `QUADRUPOLE PRECISION` kompiliert, womit auch hier das Ergebnis in `QUADRUPOLE PRECISION` herauskommt. Wir erhalten auf diese Weise eine Menge von N Eigenwerten $W(I)$ und N Eigenvektoren $Z(J,I)$. Dabei nummeriert I die Eigenwerte/-vektoren durch und J bezeichnet die Stelle auf dem Gitter. Damit können wir in (4.10) E_n durch $W(I)$ und $rR_{n,l}(r)$ bzw. $P_{n,l}(r)$ durch $Z(J,I)$ ersetzen. Im Programm wird das hier Dargestellte durch den Aufruf zweier Routinen erledigt:

```

CALL HAML(HH,R,M,N,L,H,R0)
CALL DSBEVD('V','L',N,M,HH,M+1,W,Z,N,WORK,LWORK,IWORK,LIWORK,INFO)

```

4.2.2 Diskretisierung der äußeren Wellenfunktion

Die äußere Wellenfunktion diskretisieren wir nach Wirken der entsprechenden Operatoren auf sie. Das bedeutet, wir wenden zum Beispiel im Falle des p -Operators diesen erst auf die kontinuierliche Wellenfunktion an und berechnen sie entsprechend. Abschließend diskretisieren wir dann das Resultat. Dadurch erhalten wir eine höhere Genauigkeit als wenn wir die diskretisierte Wellenfunktion mittels diskreter Ableitungsrountinen ableiten würden. Beim Diskretisieren muss die Dimension erhalten bleiben. Es soll also gelten:

$$\int d^3x \rightarrow \int r^2 dr \rightarrow a \sum r^2. \quad (4.11)$$

Neben einer Multiplikation mit r , um das richtige Integralmaß zu erhalten, benötigen wir also noch eine Multiplikation mit der Gitterkonstanten a , die als der Abstand zweier Gitterpunkte definiert ist. Da es sich bei unseren Integralen immer um quadratische Formen handelt, also immer zwei Wellenfunktionen miteinander multipliziert integriert werden, gilt für die einzelnen Wellenfunktionen

$$R_{NL}(r) = \sqrt{a} \hat{R}_{NL}(i),$$

wobei i für den entsprechenden Gitterpunkt steht. Die vollständigen Zwischenfunktionen sind bereits diskret und enthalten auch schon das r sowie aufgrund ihrer Berechnung auch schon \sqrt{a} .

In unserem logarithmischen Gitter ist der Abstand zweier Punkte gegeben durch

$$\begin{aligned} a &= r_{i+1} - r_i = r_0 \left(e^{h*(i+1)} - 1 \right) - r_0 \left(e^{h*i} - 1 \right) \\ &= r_0 e^{h*i} (e^h - 1) \approx r_0 e^{h*i} (1 + h - 1) \\ &= r_0 e^{h*i} h = h (r_0 + r_i) . \end{aligned} \quad (4.12)$$

Desweiteren wird auch der von L abhängige Vorfaktor direkt in die äußere Wellenfunktion gesteckt, die damit gegeben ist durch

$$V(\mathbf{I}) = \text{VF}(L) \sqrt{h(r_0 + r_i)} r_i (OR_{NL})(r_i), \quad (4.13)$$

wobei O den auf die Wellenfunktion wirkenden Operator bezeichnet. Die korrekte Berechnung und Diskretisierung überprüfen wir, indem wir die diskrete Norm der äußeren Wellenfunktion nehmen und mit der aus einer analytischen Rechnung vergleichen. Im Falle des p -Operators ist bekannt, dass $\langle \Phi | p^2 | \Phi \rangle = \frac{1}{N^2}$ gilt. Wir bestimmen dies mit der folgenden Routine:

$$\text{TN} = \text{SQRT}((L+1.DO)/(2.DO*L+1.DO))/\text{QN}/\text{SQRT}(\text{DOT_PRODUCT}(V,V))$$

QN bezeichnet dabei N und der Faktor $\text{SQRT}((L+1.DO)/(2.DO*L+1.DO))$ ergibt sich aus dem L -abhängigen Vorfaktor, der durch die Winkelintegration entstand. Die Routine $\text{DOT_PRODUCT}(V,V)$ ist eine von Fortran 90 bereitgestellte Routine, die das Skalarprodukt zweier Vektoren berechnet. In unserem Fall berechnet sie also

$$\vec{V} \cdot \vec{V} = \sum_{i=0}^N V_i V_i \approx \int_0^{\infty} dr r^2 (OR_{NL}(r))^2, \quad (4.14)$$

wobei wir hier in gewisser Weise die bei (4.11) und (4.13) gemachten Schritte wieder rückgängig machen. Weiter verwenden wir, wie am Anfang beschrieben, dass wir zwar nur über eine endliche sphärische Box integrieren, dies aber dem vollen Integral von null bis unendlich entspricht. Die Routine DOT_PRODUCT benutzen wir also zur Ausführung des Radialintegrals. Ist die Größe TN nun gleich eins, so wurde die Wellenfunktion korrekt berechnet und diskretisiert. Durch die Diskretisierung ist diese Zahl natürlich nicht genau eins, sondern es gibt eine minimale Abweichung (selbst mit nur grober Diskretisierung aber nur $\approx 10^{-4}$). Man stellt fest, dass diese Abweichung mit feinerer Unterteilung immer kleiner wird und damit eine grobe Einschätzung über die Genauigkeit der Diskretisierung ermöglicht. Weiter kann man so auch kontrollieren, dass die Box, die eigentlich den maximalen in die Integration einflussenden Abstand angibt, groß genug gewählt wurde. Sollte nämlich TN trotz sehr feiner Unterteilung von eins verschieden sein, so ist das zu frühe Abschneiden der Wellenfunktion eine wahrscheinliche Ursache. Fehler bei der Eingabe der Wellenfunktion lassen sich so selbstverständlich auch finden. Wir multiplizieren diesen Faktor schließlich noch mit der Wellenfunktion, um diese noch ein wenig zu glätten, auch wenn dies für die von uns benutzten genauen Gitter eher nur kosmetische Gründe hat und das Ergebnis nicht relevant verändert.

4.2.3 Berechnung des relativistischen Bethe-Logarithmus

Nach dieser Vorarbeit ist die eigentliche Berechnung der relativistischen Bethe-Logarithmen recht einfach. Wir machen die Rechnung für jeden Wert von l separat, da wir ja auch für jedes l eine eigene vollständige Basis zu bestimmen haben. Desweiteren benutzen wir für jede Störung ein separates Programm. Im Allgemeinen haben wir nur für die Werte $l = L \pm 1$ einen Beitrag. Die einzige Ausnahme bildet der Term des nichtrelativistischen Quadrupols, bei dem l , mit $L \pm 2$, $L \pm 1$ und L , fünf Werte annehmen kann und wir dementsprechend fünf Terme bestimmen müssen.

Für jedes l beginnt die Berechnung mit der oben beschriebenen Erzeugung der vollständigen Basis, dann diskretisiert man den Ausdruck, der Operator wirkt auf die äußere Wellenfunktion, und überprüft nun dessen Normierung. Den Ausdruck (4.10) berechnen wir durch den Code:

```

DO I=1,N
POL = POL+DOT_PRODUCT(Z(1:N,I),V)*DOT_PRODUCT(Z(1:N,I),U)*
1      (W(I)-ES)*LOG(ABS(W(I)-ES))
ENDDO
POL1 = QN**3 * POL/2

```

Die Beiträge jedes l_s werden am Ende aufsummiert und mit dem Vorfaktor $2C$ multipliziert, so dass man damit genau (4.10) diskretisiert hat.

4.2.4 Spezielle Beiträge

Für bestimmte Beiträge sind allerdings noch spezielle weitere Routinen notwendig, nämlich dann, wenn wir zur Berechnung die Störungstheorie benutzt haben. Bei der Korrektur zur Wellenfunktion ist es erforderlich, die Störungsreihe diskret zu bestimmen und dann auf die Funktion noch den Impulsoperator wirken zu lassen. Bei der Korrektur zum Hamiltonian aufgrund der relativistischen kinetischen Energie, ist es ebenso nötig, die Störung zur Wellenfunktion diskret zu berechnen. Der Unterschied zu $\delta\psi$ ist allerdings, dass dies für jeden der Zwischenzustände gemacht werden muss und nicht nur für die äußere Wellenfunktion. Das Vorgehen bei der Berechnung der LS -Korrektur zum Hamiltonian werden wir hier ebenfalls beschreiben.

Bei der Rechnung für $\delta\psi$ betrachten wir die Wirkung des Operators auf die Referenzwellenfunktion. Dazu lassen wir zuerst einmal p^4 und einmal $1/r^3$ auf die Wellenfunktion wirken und erhalten so zwei Funktionen. Das Matrixelement mit den anderen Wellenfunktionen führen wir wieder durch `DOT_PRODUCT` aus. Es ist dabei zu beachten, dass man den Referenzzustand aus der Summe herausnimmt, was wir mit Hilfe eines IF-Konstruktes erledigen. Der Wert von LS ist noch an die mit $1/r^3$ behandelte Wellenfunktion zu multiplizieren; die möglichen Ergebnisse sind bereits in Kap. 3.8 aufgelistet. Die gestörte Wellenfunktion muss dann mit dem Impulsoperator behandelt werden. Hier müssen wir nun eine diskrete Routine benutzen, was wir bei den Referenzzuständen sonst nicht getan haben:

```

POL=0
DO J=1,N
CALL DIFFDFOB(N,M,PM(1:N,J),VD,R,H,RO,L)
DO I=1,N
IF ( J .NE. (QN-L) ) THEN
POL = POL+DOT_PRODUCT(Z(1:N,I),V)/(ES-EM(J))*SQRT((L+1.DO)/
-      (2.DO*L+1.DO))*DOT_PRODUCT(Z(1:N,I),VD)*(W(I)-ES)*
-      LOG(ABS(W(I)-ES))*DOT_PRODUCT(PM(1:N,J),A)
POL = POL+DOT_PRODUCT(Z(1:N,I),V)/(ES-EM(J))*SQRT((L+1.DO)/
-      (2.DO*L+1.DO))*DOT_PRODUCT(Z(1:N,I),VD)*(W(I)-ES)*
-      LOG(ABS(W(I)-ES))*DOT_PRODUCT(PM(1:N,J),U)*
-      (L+1.DO)/2.DO
ELSE
POL = POL
ENDIF
ENDDO
ENDDO

```

Die Herleitung dieser diskreten Ableitung findet man in App. A.1. Dabei hat man zu berücksichtigen, dass wir es nun mit $rR_{NL}(r)$ zu tun haben und sich diese Formel etwas von z.B. (3.24) unterscheidet:

```

SUBROUTINE DIFFDFOB(N,M,VT,VD,R,H,RO,L)
IMPLICIT NONE
INTEGER M,N,I,L

```

```

DOUBLE PRECISION V(N+5),VD(N),R(N),H,RO,RI(N),RIO(N),VT(N)
C
DO I=1,N
RI(I) = 1.DO/R(I)
RIO(I)= 1.DO/SQRT(R(I)+RO)
V(I) = VT(I)*RIO(I)
ENDDO
V(N+1) = 0.DO
V(N+2) = 0.DO
V(N+3) = 0.DO
V(N+4) = 0.DO
V(N+5) = 0.DO
C
SELECT CASE (M)
CASE(5)
VD(1) = (-137*V(1))/60+(5*V(2))-(5*V(3))+(10*V(4))/3-(5*V(5))
- /4+V(6)/5
VD(2) = (-1*V(1))/6-(77*V(2))/60+(5*V(3))/2-(5*V(4))/3+
- (5*V(5))/6-V(6)/4+V(7)/30
VD(3) = (1*V(1))/42-V(2)/3-(47*V(3))/60+(5*V(4))/3-(5*V(5))/6
- +V(6)/3-V(7)/12+V(8)/105
VD(4) = (-1*V(1))/168+V(2)/14-V(3)/2-(9*V(4))/20+(5*V(5))/4-
- V(6)/2 + V(7)/6 - V(8)/28 + V(9)/280
VD(5) = V(1)/504 - V(2)/42 + V(3)/7 - (2*V(4))/3 - V(5)/5 +
- V(6) - V(7)/3 + (2*V(8))/21 - V(9)/56 + V(10)/630
DO I=6,N
VD(I) = (-2*V(I-5)+25*V(I-4)-150*V(I-3)+600*V(I-2)-2100*V(I-1)
- +2100*V(I+1)-600*V(I+2)+150*V(I+3)-25*V(I+4)+2*V(I+5))/2520
ENDDO
C
CASE DEFAULT
STOP 'INAPPROPRIATE M'
END SELECT
C
DO I=1,N
VD(I) = -(L+1.DO)*VT(I)*RI(I)+VD(I)*RIO(I)/H
ENDDO

```

Bei der $\delta H(LS)$ -Korrektur diagonalisieren wir den mit η gestörten Hamiltonian

$$\begin{aligned}
\text{HH}(1, I) &= \text{HH}(1, I) - Z \cdot \text{RI}(I) + 0.5\text{D}0 \cdot L \cdot (L+1.\text{D}0) \cdot \text{RI}(I) ** 2 + \\
&- 0.125\text{D}0 \cdot \text{RIO}(I) ** 2 + 0.5\text{D}0 \cdot \text{ET} / 4.\text{D}0 \cdot \text{RI}(I) ** 3
\end{aligned}$$

für unterschiedliche Werte von η :

```

CALL HAPLS(HH,R,M,N,L+1,H,RO,ET)
CALL DSBEVD('V','L',N,M,HH,M+1,W,Z,N,WORK,LWORK,IWORK,LIWORK,INFO)

```

Dass wir hier die volle Diagonalisierung benutzen, ist auch der Grund, warum wir nur eine Zweipunktableitung benutzen. Andernfalls wird die Rechenzeit zu groß. Mit diesen Funktionen berechnen wir nun zwei Werte für den Beitrag des jeweiligen Drehimpulses und bestimmen aus ihnen mit

$$\text{POLP} = (\text{POL1} - \text{POL2}) / \text{ET}$$

die Ableitung nach η , was uns den gewünschten Beitrag gibt. Wie in Kap. 3.8 beschrieben, multiplizieren wir dies nun mit den durch die Winkelalgebra errechneten Werten und zwar für beide Werte von $J = L \pm \frac{1}{2}$. So müssen wir das Programm nicht zweimal laufen lassen, was uns einiges an Rechenzeit erspart.

Bei der p^4 -Korrektur berechnen wir, wie in Kap. 3.9 beschrieben die Störungsgreihe über den folgenden Code:

```

DO J = 1, N
  WS(J) = 0.DO
  ZS(1:N,J) = 0.DO
  CORR(1:N,J) = 0.ODO
  DO K = 1, N
    V1 = 0.ODO
    V2 = 0.ODO
    DO I = 1, N
      V1 = V1 - Z(I,J) * Z(I,K) / R(I)
      V2 = V2 + Z(I,J) * Z(I,K) / R(I)**2
    ENDDO
    P4 = 4.ODO * ( - (W(J) + W(K)) * V1 + V2)
    IF (J .EQ. K) THEN
      P4 = P4 + 4.ODO * W(K)**2
    ENDIF
    P4MATRIX(J,K) = P4
  ENDDO
ENDDO

C
C +ETA
C
DO J = 1, N
  DO K = 1, N
    IF (J .NE. K) THEN
      CORR(1:N, J) = CORR(1:N, J) +
1  1.ODO/(W(J)-W(K)) * P4MATRIX(K,J) * Z(1:N,K)
    ENDIF
  END DO
  ZS(1:N, J) = Z(1:N, J) - ETA/8.ODO * CORR(1:N, J)
  WS(J) = W(J) - ETA/8.DO * P4MATRIX(J,J)
END DO

```

Wir tun dies für jeweils vier verschiedene Werte von η und bilden wieder die Ableitung nach η , hier aber mit einer Vierpunktformel:

$$\text{POLP} = (-1.\text{DO}/6.\text{DO} * \text{POL1} + 4.\text{DO}/3.\text{DO} * \text{POL2} - \\ - 4.\text{DO}/3.\text{DO} * \text{POL3} + 1.\text{DO}/6.\text{DO} * \text{POL4})/\text{ETA}$$

Am Ende summieren wir dann die beiden Werte von $L - 1$ und $L + 1$ auf und erhalten so den gesuchten Wert für diese Korrektur.

Kapitel 5

Der Hochenergie-Anteil der Selbstenergie

Hier betrachtet man nun den Bereich, bei dem die Energie der virtuellen Photonen im Bereich der Elektronenmasse liegt und der Impuls des gebundenen Elektrons im Bereich von $Z\alpha$. Der Hochenergie-Anteil lässt sich auf zwei Arten berechnen. Bei der ersten entwickeln wir den Propagator in Potenzen des Potentials V . Bei der zweiten gehen wir vom effektiven Dirac-Hamiltonian mit Formfaktoren aus.

5.1 Entwicklung des Propagators

Hier ist der Ausgangspunkt der Hochenergie-Anteil mit dem nach Pauli-Villars regularisierten Photonen-Propagator und der Massenrenormierung:

$$E_H = -ie^2 \int_{C_H} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \left[\frac{1}{k^2} - \frac{1}{k^2 - \Lambda^2} \right] \langle \bar{\psi} | \gamma^\mu \frac{1}{\not{p} - \not{k} - m - \gamma^0 V} \gamma_\mu | \psi \rangle - \langle \bar{\psi} | \delta m | \psi \rangle . \quad (5.1)$$

Den Elektronen-Propagator im Matrixelement

$$\tilde{P} = \langle \bar{\psi} | \gamma^\mu \frac{1}{\not{p} - \not{k} - m - \gamma^0 V} \gamma_\mu | \psi \rangle \quad (5.2)$$

kann man in Potenzen des Potentials entwickeln, da die Energie größer als der Überlappungsparameter und damit deutlich größer als die Effekte des Potentials ist. Weil für gebundene Zustände $V = -\frac{Z\alpha}{r}$ gilt, ist es von der Ordnung $(Z\alpha)^2$. Darum reicht es, um zu der von uns gewünschten Ordnung $\alpha(Z\alpha)^6$ zu gelangen, bis zur Ordnung V^3 zu entwickeln. Zur Entwicklung benutzen wir die Identität

$$\frac{1}{A - Y} = \frac{1}{A} + \frac{1}{A} Y \frac{1}{A} + \frac{1}{A} Y \frac{1}{A} Y \frac{1}{A} + \dots$$

und definieren

$$A = \not{p} - \not{k} - m .$$

Durch diese Entwicklung und die Relation $\langle \bar{\psi} | = \langle \psi | \gamma^0$ erhält man eine Reihe von Matrixelementen

$$\begin{aligned} \langle \psi | \gamma^0 \gamma^\mu \frac{1}{\not{p} - \not{k} - m - \gamma^0 V} \gamma_\mu | \psi \rangle &= \langle \psi | \gamma^0 \gamma^\mu \frac{1}{A - \gamma^0 V} \gamma_\mu | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \gamma^0 \gamma^\mu \frac{1}{A} + \frac{1}{A} \gamma^0 V \frac{1}{A} + \frac{1}{A} \gamma^0 V \frac{1}{A} \gamma^0 V \frac{1}{A} \\ &\quad + \frac{1}{A} \gamma^0 V \frac{1}{A} \gamma^0 V \frac{1}{A} \gamma^0 V \frac{1}{A} + \mathcal{O}(V^4) \gamma_\mu | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | M_0 | \psi \rangle + \langle \psi | M_1 | \psi \rangle + \langle \psi | M_2 | \psi \rangle + \langle \psi | M_3 | \psi \rangle . \end{aligned} \quad (5.3)$$

Die Anzahl der V s in den Matrixelementen gibt die Anzahl der Interaktionsvertices mit dem Kernfeld an. M_0 gibt damit den 0-Vertex-Anteil an, M_1 den 1-Vertex-Anteil usw. Um diese auszuwerten, benutzt man die Möglichkeit, die Matrizen M_i in einen Basissatz von 16 Matrizen Γ^s zu entwickeln:

$$M_i = \sum_s a_s \Gamma^s. \quad (5.4)$$

Diese 16 Matrizen ergeben sich aus verschiedenen Produkten von γ -Matrizen. Die Entwicklungskoeffizienten entwickelt man dann in $(Z\alpha)$ bis zur Ordnung $(Z\alpha)^6$. Das führt auf Ausdrücke der Form

$$\langle \Phi | M_i | \Phi \rangle = \sum_{s=0}^{15} \sum_{j=0}^6 (Z\alpha)^j \langle \Phi | \Gamma^s b_j(a_s) | \Phi \rangle. \quad (5.5)$$

Diese Entwicklungen, ebenso wie die Auswertungen, lassen sich durch symbolische Programme in *Mathematica* [41] durchführen. Abschließend ist noch die Integration nach d^4k erforderlich, die durch weitere mathematische Hilfsmittel ebenfalls computergestützt ausgewertet werden kann. Eine genauere Beschreibung der Methode findet man in [18, 21].

5.2 Effektiver Dirac-Hamiltonian

Wie angedeutet, können die Strahlungskorrekturen durch hochenergetische Photonen auch durch die Formfaktoren des Elektrons (B.16) beschrieben werden, was uns zum effektiven Dirac-Hamilton-Operator (B.37) bringt:

$$H_D^{(m)} = \vec{\alpha} \cdot \left[\vec{p} - eF_1(\Delta)\vec{A} \right] + \beta m + eF_1(\Delta)\phi + F_2(\Delta)\frac{e}{2m} \left(i\vec{\gamma} \cdot \vec{E} - \beta \vec{\Sigma} \cdot \vec{B} \right). \quad (5.6)$$

Die Formfaktoren sind zwar eigentlich nur für Elektronen auf der Massenschale gültig, lassen sich hier aber auch näherungsweise anwenden, da die gebundenen Zustände nahezu auf der Massenschale liegen. Auch Effekte durch Rückstoßkorrekturen und die Vakuumpolarisation sind im effektiven Hamiltonian nicht enthalten. Während die Formfaktoren im Niedrigenergie-Anteil keine Rolle spielen, sind es ihre Effekte bei diesen Energien, die zur Lamb-Verschiebung beitragen. Da sich das Atom weder in einem äußeren Feld noch in einem expliziten Magnetfeld befinden soll, setzen wir $\vec{A} = \vec{B} = 0$. Damit entsteht der erste Beitrag im Vergleich zum unmodifizierten Dirac-Hamiltonian (2.1) durch

$$E_1 = eF_1(\Delta)\phi = F_1(\Delta)V. \quad (5.7)$$

Mit Hilfe einer Fourier-Transformation wechseln wir vom Orts- in den Impulsraum, wobei Δ in $-\vec{q}^2$ übergeht und die Fourier-transformierte des Coulomb-Potentials gegeben ist durch $V = -\frac{4\pi Z\alpha}{\vec{q}^2}$. So erhalten wir

$$\begin{aligned} E_1 &= F_1'(\Delta)(-\vec{q}^2) \left(-\frac{4\pi Z\alpha}{\vec{q}^2} \right) \\ &= F_1'(\Delta)4\pi Z\alpha, \end{aligned} \quad (5.8)$$

wobei wir F_1 noch in \vec{q}^2 entwickelt haben. Transformiert man wieder zurück in den Ortsraum, so führt dies zu

$$E_1 = F_1'(\Delta)4\pi Z\alpha\delta^{(3)}(\vec{r}). \quad (5.9)$$

Aufgrund der δ -Distribution liefert dies wieder bis zu der von uns betrachteten Ordnung nur einen Beitrag für S -Zustände. Der zweite Beitrag entsteht durch den magnetischen Formfaktor F_2 in (5.6) und liefert

$$E_2 = \langle \psi^+ | F_2(\Delta)\frac{1}{2m}i\vec{\gamma} \cdot \vec{E} | \psi \rangle. \quad (5.10)$$

Das elektrische Feld darin, ist das, gemäß $\vec{E} = -\vec{\nabla}V$ generierte, Feld des Atomkerns. Dieser Beitrag lässt sich als einzelner Operator berechnen, der auf die volle relativistische Dirac-Wellenfunktion (in Potenzen von $Z\alpha$ entwickelt) angewendet wird. Für F_2 setzen wir dabei den von Schwinger bestimmten Ein-Schleifen-Wert von $F_2 = \frac{\alpha}{2\pi}$ [42] ein. Dies liefert ein sehr kompaktes Resultat. Denn das resultierende Matrixelement kann mit dem als $C_{n\kappa, n\kappa}^{-2}$ bezeichneten Integral auf Seite 4483 von [43] in Verbindung gebracht werden und schließlich durch verallgemeinerte Virialtheoreme der Dirac-Gleichung berechnet werden [40]. Das führt zu dem in $Z\alpha$ entwickelten Ergebnis

$$\begin{aligned}\Xi &= \frac{N^3}{(Z\alpha)^4} \left\langle \psi^+ \left| i \frac{\vec{\gamma} \cdot \vec{E}}{4m^2} \right| \psi \right\rangle \\ &= -\frac{1}{2\kappa(2L+1)} + (Z\alpha)^2 \left(-\frac{12\kappa^2 - 1}{2(2J+1)\kappa^2(2\kappa-1)(2\kappa+1)^2} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{n} \frac{3}{4\kappa^2(2\kappa+1)} + \frac{1}{n^2} \frac{8\kappa-3}{2(2J+1)(2\kappa-1)(2\kappa+1)} \right) \\ &= -\frac{1}{2\kappa(2L+1)} + (Z\alpha)^2 \Xi_2,\end{aligned}\tag{5.11}$$

wobei es nur bis zu der von uns betrachteten Ordnung notiert wird. Die Dirac-Quantenzahl κ ist dabei gegeben durch

$$\kappa = 2(L - J)(J + \frac{1}{2}).$$

Dadurch sind die Beiträge von maximal einer Interaktion mit dem Kernfeld abgedeckt. Ein weiterer Beitrag, der sich nicht über die Formfaktoren erhalten lässt, entsteht durch den Zwei-Vertex-Operator. Er wurde in dimensionaler Regularisierung gefunden in [25]. In Photon-Energieregularisierung ist er gegeben durch [40]

$$H(\epsilon) = \frac{\alpha}{\pi} \left[\frac{2}{3} \ln \left(\frac{m}{2\epsilon} \right) - \frac{2}{3\epsilon} + \frac{34}{45} \right] \frac{(\vec{\nabla}V)^2}{m^3}\tag{5.12}$$

und wird hier ohne Herleitung angegeben. Man könnte nun fragen, warum hier nicht auch ein Drei-Vertex-Anteil zu finden ist. Der Grund dafür ist, dass der Drei-Vertex-Anteil in der Entwicklung nur notwendig ist, um Divergenzen in den niedrigeren Ordnungen zu beseitigen, die durch die Entwicklung entstehen. Durch Einsetzen der Beiträge in F erhalten wir für den Hochenergie-Anteil von Zuständen mit Bahndrehimpuls $L \geq 2$

$$F_{\text{hep}}(\epsilon) = \Xi + (Z\alpha)^2 A_{61} \left[\ln \left(\frac{m}{2\epsilon} \right) - \frac{1}{\epsilon} + \frac{17}{15} \right],\tag{5.13}$$

mit dem in (1.5) definierten A_{61} -Koeffizienten. Diesen können wir durch Bestimmen des Matrixelements in (5.12) berechnen. Berücksichtigt man den in der Definition von F herausgenommenen Vorfaktor ordnungsgemäß, so erhält man für A_{61} das Matrixelement

$$\begin{aligned}A_{61} &= \frac{2}{3} \frac{N^3}{(Z\alpha)^4} \left\langle \phi \left| \frac{1}{(mr)^4} \right| \phi \right\rangle \\ &= \frac{3N^2 - L(L+1)}{3N^2(L + \frac{3}{2})(L+1)(L + \frac{1}{2})L(L - \frac{1}{2})},\end{aligned}\tag{5.14}$$

das sich mit der nichtrelativistischen Wellenfunktion für $L \geq 2$ mithilfe der bekannten Identität (siehe z. B. [39])

$$(s+1) \frac{(Z\alpha)^2}{N^2} \langle r^s \rangle_{NL} - (2s+1)Z\alpha \langle r^{s-1} \rangle_{NL} + \frac{s}{4} [(2L+1)^2 - s^2] \langle r^{s-2} \rangle_{NL} = 0$$

und den bekannten Ergebnissen für $\langle r^{-2} \rangle_{NL}$ und $\langle r^{-3} \rangle_{NL}$ (siehe [39]) berechnen lässt.

Addiert man nun den Hoch- (5.13) und den Niedrigenergie-Anteil (2.101), so erkennt man, dass sich die Terme mit ϵ gerade aufheben. Im Logarithmus verbleibt die atomare Bindungsenergie als natürliche Skala:

$$\begin{aligned}
 F_{\text{lep}}(\epsilon) + F_{\text{hep}}(\epsilon) &= -\frac{4}{3} \ln k_0 + (Z\alpha)^2 \left\{ A_{61} \left[\ln \left(\frac{\epsilon}{(Z\alpha)^2 m} \right) + \frac{1}{\epsilon} \right] + \mathcal{L} \right\} \\
 &\quad + \Xi + (Z\alpha)^2 A_{61} \left[\ln \left(\frac{m}{2\epsilon} \right) - \frac{1}{\epsilon} + \frac{17}{15} \right] \\
 &= \Xi - \frac{4}{3} \ln k_0 + (Z\alpha)^2 \left\{ A_{61} \left[\ln \left(\frac{m}{(Z\alpha)^2 m} \right) + \frac{17}{15} \right] + \mathcal{L} \right\}. \quad (5.15)
 \end{aligned}$$

Kapitel 6

Numerische Ergebnisse für den A_{60} -Koeffizienten

6.1 Hochangeregte D -Zustände

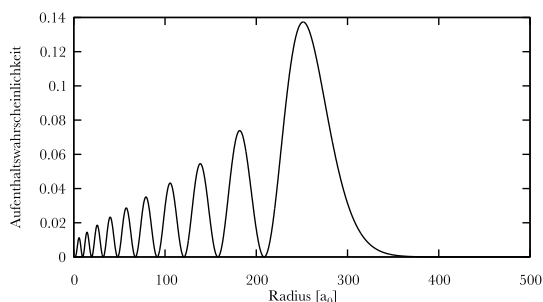


Abbildung 6.1: Radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit des $12D$ -Zustands. Durch die große Anzahl an Knoten braucht man viele Gitterpunkte, um die radiale Wellenfunktion gut zu diskretisieren.

Mit unserem numerischen Verfahren haben wir den A_{60} -Koeffizienten einiger Zustände berechnet. In diesem Abschnitt geht es dabei um Zustände mit $L = 2$. Sie werden allgemein als D -Zustände bezeichnet und sind erst für $N \geq 3$ möglich. Ihre Radialwellenfunktion hat für $N = 3$ dann genau einen Knoten in $r = 0$. Die Zahl der Knoten nimmt mit der Hauptquantenzahl N zu, so hat der Radialteil für $N = 8$ schon sechs Knoten. Wir benötigen bei höher angeregten Zuständen also eine immer höhere Anzahl von Gitterpunkten, um die gleiche Genauigkeit wie bei Zuständen mit weniger Knoten zu erzielen. Bisher existieren Ergebnisse für den A_{60} -Koeffizienten von D -Zuständen bis $N = 8$. Die Werte für diese Zustände wurden mit unserem Programm ebenfalls berechnet und zeigen nahezu vollständige Übereinstimmung. Wir wollen diese einmal exemplarisch für den $8D$ -Zustand angeben. Im Gegensatz zu den bisherigen Methoden ist es uns aber möglich, auch für noch höher angeregte D -Zustände bis $N = 12$ Ergebnisse zu erhalten, auch wenn dies aufgrund der durch die vielen Knoten bedingten komplizierten Gestalt der Radialwellenfunktion eine schwierige numerische Aufgabe ist. Die zur Berechnung des A_{60} -Koeffizienten notwendigen Werte aus dem Hochenergie-Anteil findet man in [22, 25]. Damit erhalten wir

$$A_{60}(ND_{3/2}) = -\frac{157}{30240} - \frac{3}{80N} + \frac{3007}{37800N^2} - \frac{4}{315} \left(1 - \frac{2}{N^2}\right) \ln 2 + \mathcal{L} \quad (6.1)$$

und

$$A_{60}(ND_{5/2}) = \frac{379}{18900} + \frac{1}{60N} - \frac{1759}{18900N^2} - \frac{4}{315} \left(1 - \frac{2}{N^2}\right) \ln 2 + \mathcal{L}. \quad (6.2)$$

\mathcal{L} ist der relativistische Bethe-Logarithmus, der durch

$$\mathcal{L} = \beta_{\delta E} + \beta_{\delta\psi} + \beta_{\delta H(p^A)} + \beta_{\delta H(LS)} + \frac{1}{2}\beta_{r\times\sigma} + \beta_{pp^2} + \beta_{nq} \quad (6.3)$$

gegeben ist. Der Beitrag von $r\times\sigma$ trägt dabei nur mit einem Faktor 1/2 bei, weil man ihn nach (3.56) noch mit dem Beitrag von $krk\times\sigma$ verrechnet. Die Ergebnisse werden dabei in der Notation von [25] angegeben. Wir geben hier nur einen Überblick über die Ergebnisse für \mathcal{L} und A_{60} ; die Werte für die einzelnen Beiträge findet man im Appendix D.

Hauptquantenzahl	$\mathcal{L}(D_{3/2})$	$\mathcal{L}(D_{5/2})$
8	0.024 886 99(5)	0.022 452 26(5)
9	0.025 043 91(5)	0.022 564 66(5)
10	0.025 185 92(5)	0.022 669 65(5)
11	0.025 280 93(5)	0.022 733 86(5)
12	0.025 353 59(5)	0.022 780 80(5)
Hauptquantenzahl	$A_{60}(D_{3/2})$	$A_{60}(D_{5/2})$
8	0.007 723 86(5)	0.034 607 49(5)
9	0.008 083 01(5)	0.034 735 88(5)
10	0.008 413 79(5)	0.034 832 71(5)
11	0.008 681 09(5)	0.034 876 38(5)
12	0.008 909 60(5)	0.034 896 67(5)

Tabelle 6.1: Relativistische Bethe-Logarithmen \mathcal{L} und A_{60} - Koeffizienten für hoch angeregte D -Zustände.

Zur Fehlerabschätzung haben wir ein paar Terme mit einer kleineren Schrittweite und mehr Stützstellen berechnet. Den Unterschied beider Werte benutzen wir als Einschätzung des Fehlers. Weiterhin berechnen wir mit den gleichen Gittereinstellungen den Bethe-Logarithmus und können durch Vergleich mit dessen bekannten Werten eine Überprüfung unserer Fehlerabschätzung durchführen. Unsere Fehlerabschätzung multiplizieren wir noch mit einem Sicherheitsfaktor Fünf, um sicher zu stellen, dass wir den Fehler nicht zu gering einschätzen. Allerdings ist die so bereits erzielte Genauigkeit für eine experimentelle Überprüfung mehr als ausreichend.

6.2 Rydberg-Zustände mit nahezu maximalem Bahndrehimpuls

Neben den D -Zuständen verwenden wir das numerische Gitterverfahren auch, um den A_{60} -Koeffizienten einiger Rydberg-Zustände mit nahezu maximalem Bahndrehimpuls zu bestimmen. Auch für diese Werte existieren bislang keine theoretischen Berechnungen. Dazu führen wir eine verallgemeinerte spektroskopische Notation ein:

- S -Zustände stehen dabei für Zustände mit Bahndrehimpuls $L = 0$.

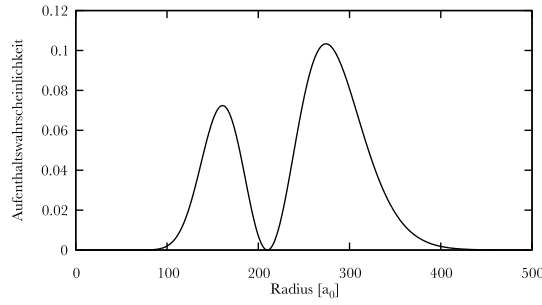


Abbildung 6.2: Radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit des $15X$ -Zustandes. Man erkennt nur zwei Knoten, weswegen sich die radiale Wellenfunktion mit relativ wenig Gitterpunkten diskretisieren lässt.

- P bezeichnet Zustände mit Bahndrehimpuls $L = 1$.
- Wir schreiben V für $L = 11$, W für $L = 12$, X für $L = 13$, Y für $L = 14$ und Z für $L = 15$.

Wie wir in Abb. 6.2 sehen, brauchen wir hier im Allgemeinen nicht so viele Gitterpunkte wie bei den D -Zuständen, da wir nur die Fälle $L = n - 1/n - 2$ betrachten, bei denen die Wellenfunktion maximal zwei Knoten hat. Außerdem sind die Radialwellenfunktionen erst ab $r \approx 1a.u.$ merklich von null verschieden, so dass wir auch wenige Punkte nahe am Ursprung benötigen, was uns aufgrund des logarithmischen Gitters, trotz einer geringeren Anzahl von Gitterpunkten eine kleinere Schrittweite erlaubt. Die Kugelflächenfunktionen haben zwar eine komplizierte Gestalt, dank der in Kap. 3 entwickelten algebraischen Formeln lassen sich die Winkelanteile aber auch für diese Funktionen leicht berechnen. Die benötigten Werte aus dem Hochenergie-Anteil für den A_{60} -Koeffizienten erhalten wir aus [36] oder direkt aus Kap. 5. Die Ergebnisse für den A_{60} -Koeffizienten geben wir in Tab. 6.2 an; die einzelnen Werte findet man im Appendix D.

Hauptquantenzahl	A_{60} für $L = N - 2, J = L - \frac{1}{2}$	A_{60} für $L = N - 1, J = L - \frac{1}{2}$
13	$0.679\ 575(5) \times 10^{-5}$	$0.469\ 973(5) \times 10^{-5}$
14	$0.410\ 825(5) \times 10^{-5}$	$0.296\ 641(5) \times 10^{-5}$
15	$0.252\ 108(5) \times 10^{-5}$	$0.189\ 309(5) \times 10^{-5}$
16	$0.155\ 786(5) \times 10^{-5}$	$0.121\ 749(5) \times 10^{-5}$
Hauptquantenzahl	A_{60} für $L = N - 2, J = L + \frac{1}{2}$	A_{60} für $L = N - 1, J = L + \frac{1}{2}$
13	$4.318\ 998(5) \times 10^{-5}$	$2.729\ 475(5) \times 10^{-5}$
14	$2.979\ 937(5) \times 10^{-5}$	$1.945\ 279(5) \times 10^{-5}$
15	$2.116\ 050(5) \times 10^{-5}$	$1.420\ 631(5) \times 10^{-5}$
16	$1.540\ 181(5) \times 10^{-5}$	$1.059\ 674(5) \times 10^{-5}$

Tabelle 6.2: A_{60} -Koeffizienten für hochangeregte Rydberg-Zustände im Bereich $N = 13$ bis $N = 16$ mit nahezu maximalem Bahndrehimpuls. Die Fälle $J = L - \frac{1}{2}$ und $J = L + \frac{1}{2}$ werden unterschieden.

Kapitel 7

Diskussion und Ausblick

7.1 Was wurde erreicht?

In dieser Arbeit haben wir uns mit dem Ein-Photon-Beitrag zur Lamb-Verschiebung beschäftigt. Dabei konnte eine Reihe von Ergebnissen erzielt werden. So geben wir hier eine weitere unabhängige Bestätigung der vielfach zu findenden Foldy-Wouthuysen-Transformation des Dirac-Hamilton-Operators, aber auch der entsprechenden Transformation der relativistischen Stromkorrektur [21, 25]. Wir haben auch überprüft, dass sich diese Korrektur über zwei Wege erhalten lässt. Dies ist zwar bekannt, aber eine erneute Kontrolle dient der Sicherheit bei der Verwendung dieser Methodik.

Im Niedrigenergie-Anteil waren wir durch das Einführen einer vollständigen Basis in der Lage, die Energie-Integration auszuführen und dabei den Hauptwert des Integrals zu verwenden. Bei den so entstandenen Matrixelementen konnten, wir durch algebraische Relationen die Integration der Kugelflächenfunktionen über den Raumwinkel, auch für Zustände mit hoher Drehimpulsquantenzahl ausführen. So gelang es uns, die Matrixelemente in reine Radialintegrale umzuformen und in einen Ausdruck zu bringen, der für eine numerische Behandlung geeignet ist.

Mit Hilfe der von uns benutzten und weiterentwickelten, numerischen Gitterrechnung ist es möglich, die relativistischen Bethe-Logarithmen schnell und genau zu berechnen. Im Vergleich zu den bisherigen Methoden, die eine Sturm'sche Zerlegung des vollen Propagators benutzen, braucht unsere Methode wesentlich weniger Zeit zur Berechnung eines einzelnen Beitrags. Außerdem lässt sie sich auch für Hauptquantenzahlen jenseits von $N = 8$ noch problemlos anwenden. Dies war bisher nicht möglich, da der Aufwand zur Berechnung der dabei entstehenden Mengen an Termen in den Zwischenschritten, die im Bereich von 10^5 liegen [22], zu groß wird. Denn bei analytischen bzw. nahezu analytischen Rechnungen, wie sie z.B. in [21, 22] für den Niedrigenergie-Anteil durchgeführt wurden, sind die zu bestimmenden Ausdrücke sehr komplex. Zum einen, wie erwähnt, durch die schiere Menge an Termen, zum anderen auch durch die Komplexität der Integrale. Gerade für hochangeregte Zustände gibt es durch den Propagator z.B. viele Pole. Wir umgehen diese Probleme bei unserer Methode, indem wir eine diskrete vollständige Basis benutzen, wodurch der Propagator sehr einfach wird. So lässt sich bei der Energieintegration direkt der Hauptwert verwenden. Dadurch sind wir in der Lage, auch für hohe Hauptquantenzahlen den A_{60} -Koeffizienten zu berechnen.

So konnten wir Ergebnisse für hochangeregte D -Zustände und Rydberg-Zustände mit nahezu maximalem Bahndrehimpuls erhalten. Ebenso konnten wir die Ergebnisse, die bis $N = 8$ gemacht wurden, mit unserer Methode reproduzieren und so die bisherigen Resultate einer Prüfung unterziehen. Dies ist sehr wichtig, da viele dieser Zustände von großer Bedeutung für die Spektroskopie sind, insbesondere die $8D$ - [27] und $12D$ -Zustände [28]. Aufgrund ihrer geringen Zerfallsbreite sollen in naher Zukunft Rydberg-Zustände zur genauen spektroskopischen Messung der Übergangsfrequenzen benutzt werden. Aus ihnen soll durch Verwendung der Rydberg-Konstante aus

anderen spektroskopischen Messungen die Feinstruktur-Konstante α bestimmt werden [29], um sie mit den Messungen aus anderen Effekten der QED zu vergleichen. Für diese Messungen sind die hier erzielten Resultate für den A_{60} -Koeffizienten von großer Bedeutung. Die Messung von α in vielen verschiedenen Experimenten ist ein wichtiger Test der Konsistenz der QED.

7.2 Verhalten der D -Zustände

Hauptquantenzahl	$\mathcal{L}(ND_{3/2})$	$\mathcal{L}(ND_{5/2})$
9	0.025 043 91(5)	0.022 564 66(5)
10	0.025 185 92(5)	0.022 669 65(5)
11	0.025 280 93(5)	0.022 733 86(5)
12	0.025 353 59(5)	0.022 780 80(5)
Hauptquantenzahl	$A_{60}(ND_{3/2})$	$A_{60}(ND_{5/2})$
9	0.008 083 01(5)	0.034 735 88(5)
10	0.008 413 79(5)	0.034 832 71(5)
11	0.008 681 09(5)	0.034 876 38(5)
12	0.008 909 60(5)	0.034 896 67(5)

Tabelle 7.1: Relativistische Bethe-Logarithmen \mathcal{L} und A_{60} -Koeffizienten für hochangeregte D -Zustände.

In [22] wurden bereits erste Betrachtungen der Asymptotik des relativistischen Bethe-Logarithmus von D -Zuständen angestellt. Durch diese weiteren Resultate für höher angeregte D -Zustände können wir zum einen die dort gemachten Aussagen überprüfen und zum anderen mit den neuen Resultaten einen neuen Fit berechnen. Diese Asymptotik ist hilfreich, da man neue Resultate, die ihr nicht gehorchen, schnell erkennt und man sich so auf die Suche nach den Ursachen dafür machen kann. Dabei ist besonders der dort erwartete konstante Wert für $N \rightarrow \infty$ von Interesse. Wir verwenden dieselbe Fitfunktion wie in [22], nämlich

$$\mathcal{L}(NL_J) = L_1(L_J) + \frac{L_2(L_J)}{N} + \frac{L_3(L_J)}{N^2}. \quad (7.1)$$

Wir benutzen jeweils drei Werte für \mathcal{L} und berechnen damit die L_i aus einem Gleichungssystem. Aus den so erhaltenen Werten schätzen wir den besten Fit für $\lim_{n \rightarrow \infty} L_i$ ab. Die Ergebnisse sind in Tabelle 7.2 zu finden. Dabei konzentrieren wir uns nur auf den Wert L_1 , welcher der erwartete, konstante Grenzwert für $N \rightarrow \infty$ ist.

Die Werte zeigen jeweils nur eine Abweichung im Bereich von drei Prozent und stimmen damit im Rahmen unseres eher groben Fits überein.

7.3 Rydberg-Zustände

Die hier gewonnenen Ergebnisse sind konsistent mit der in [22] gemachten Vermutung, dass der Wert des A_{60} -Koeffizienten mit zunehmenden N und L immer kleiner wird und gegen null konvergiert. Außerdem zeigt sich auch hier die bereits bei niedrigeren N und L gemachte Feststellung, dass die A_{60} -Koeffizienten für $J = L + \frac{1}{2}$ deutlich größer sind als für $J = L - \frac{1}{2}$.

Zustand	L_1^a	L_1^b
$D_{3/2}$	0.0258	0.0264
$D_{5/2}$	0.0230	0.0235

Tabelle 7.2: Vergleich des Koeffizienten L_1^a aus einem Fit unserer Daten in Tabelle 7.1 mit dem in [22] bestimmten Wert, den wir hier mit L_1^b bezeichnen. Der Wert von L_1 aus dem globalen Fit sollte den Grenzwert $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{L}(NL_J)$ in Gl. (7.1) approximieren.

Hauptquantenzahl	A_{60} für $L = N - 2, J = L - \frac{1}{2}$	A_{60} für $L = N - 1, J = L - \frac{1}{2}$
13	$0.679\ 575(5) \times 10^{-5}$	$0.469\ 973(5) \times 10^{-5}$
14	$0.410\ 825(5) \times 10^{-5}$	$0.296\ 641(5) \times 10^{-5}$
15	$0.252\ 108(5) \times 10^{-5}$	$0.189\ 309(5) \times 10^{-5}$
16	$0.155\ 786(5) \times 10^{-5}$	$0.121\ 749(5) \times 10^{-5}$
Hauptquantenzahl	A_{60} für $L = N - 2, J = L + \frac{1}{2}$	A_{60} für $L = N - 1, J = L + \frac{1}{2}$
13	$4.318\ 998(5) \times 10^{-5}$	$2.729\ 475(5) \times 10^{-5}$
14	$2.979\ 937(5) \times 10^{-5}$	$1.945\ 279(5) \times 10^{-5}$
15	$2.116\ 050(5) \times 10^{-5}$	$1.420\ 631(5) \times 10^{-5}$
16	$1.540\ 181(5) \times 10^{-5}$	$1.059\ 674(5) \times 10^{-5}$

Tabelle 7.3: A_{60} -Koeffizienten für hochangeregte Rydberg-Zustände im Bereich $N = 13$ bis $N = 16$ mit nahezu maximalem Bahndrehimpuls. Die Fälle $J = L - \frac{1}{2}$ und $J = L + \frac{1}{2}$ werden unterschieden.

7.4 Ausblick

Mit unserer Methode ist auch eine systematische Berechnung vieler weiterer Zustände mit $L \geq 2$ möglich. So wurde das Programm bereits für manche Beiträge des $20D$ -Zustands getestet. Um Fehler bei der Eingabe der Wellenfunktionen zu vermeiden, wäre es auch möglich, die Übertragung der Wellenfunktion in das Fortran-Programm durch ein Skript ausführen zu lassen. Die Anpassung des Gitters bedarf aber auch dann noch unserer Aufmerksamkeit, um für jeden Zustand die bestmögliche Genauigkeit zu erzielen. Bei so einem großen Projekt wäre auch eine weitere Optimierung unserer Programme sinnvoll, da zum Beispiel bisher keine Parallelisierungs-Routinen benutzt wurden. Dies würde die Laufzeit der Programme deutlich verkürzen. Neben der weiteren Verbesserung der Programme ist es auch unser Ziel, weitere wichtige Korrekturen zu bestimmen. Dabei ist die relativistische Rückstoßkorrektur der Ordnung $m/M(Z\alpha)^6$ als nächstes ins Augenmerk gerückt. Die nichtrelativistische Rückstoßkorrektur zeigt eine Abhängigkeit vom Bethe-Logarithmus. Darum scheint die Vermutung angebracht, dass die relativistische Rückstoßkorrektur eine Abhängigkeit vom relativistischen Bethe-Logarithmus zeigt. Damit wären unsere Ergebnisse auch für diese Korrektur von Belang.

Anhang A

Berechnung der diskreten Ableitungen

Für die Berechnung der Eigenfunktionen des Hamiltonians in den Zwischenzuständen sowie bei Wirkung der Ableitung auf diese, benötigen wir eine diskrete Berechnung der Ableitung. Bei den Referenzwellenfunktionen wird anders verfahren. Dort wird die Funktion erst nach dem Ableiten diskretisiert, so dass die normalen Ableitungsregeln zur Anwendung kommen. Ähnlich, wie bei den meisten derartigen numerischen Verfahren, gehen wir auch hier von der Taylorentwicklung der Funktion und von einer bestimmten Anzahl an Stützstellen aus. Außerdem wird eine konstante Schrittweite h angenommen.

A.1 Erste Ableitung

Wir wollen mit der Berechnung der ersten Ableitung beginnen. Dabei gehen wir von der Definition aus:

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}. \quad (\text{A.1})$$

Wir betrachten erstmal die Taylorentwicklung dieses Ausdrucks:

$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h} = \frac{1}{h}f(x) + f'(x) + hf''(x) + \mathcal{O}(h^2) - \frac{1}{h}f(x) = f'(x) + hf''(x) + \mathcal{O}(h^2). \quad (\text{A.2})$$

Da man in der Numerik immer mit endlichen Schrittweiten rechnet und den eher abstrakten Limes $h \rightarrow 0$ nicht ausführen kann, erhalten wir auf diese Weise die erste Ableitung mit einem von h abhängigen Fehler. Unser Ziel ist es nun, die Ordnung dieses Fehlers durch geschickte Hinzunahme weiterer Stützstellen zu verringern. Als einfaches Beispiel der Vorgehensweise nehmen wir nun eine weitere Stelle hinzu. Wir gehen also aus von einer Summe

$$\frac{af(x+h) + bf(x) + cf(x-h)}{h},$$

mit beliebigen reellen Koeffizienten. Wir führen nun eine Taylorentwicklung dieses Ausdrucks um x durch und bekommen

$$ahf''(x) + af'(x) + \frac{af(x) + bf(x) + cf(x)}{h} - cf'(x) + chf''(x) + \mathcal{O}(h^2). \quad (\text{A.3})$$

Durch Koeffizientenvergleich können wir nun ein lineares Gleichungssystem zur Berechnung von a, b und c erstellen, wobei wir verlangen, dass auch der Term der zweiten Ableitung in (A.3)

verschwindet. Es ergibt sich folgendes System

$$\begin{aligned} a + b + c &= 0 \\ a - c &= 1 \\ a + c &= 0 \end{aligned} \tag{A.4}$$

mit der eindeutigen Lösung

$$a = \frac{1}{2} \quad b = 0 \quad c = -\frac{1}{2}. \tag{A.5}$$

Anhand der Lösung sieht man auch, warum wir $x - h$ anstatt $x + 2h$ als weitere Stützstelle gewählt haben. Man stellt fest, dass bei allen so aufgebauten Verfahren immer der Koeffizient von $f(x)$ verschwindet und man somit eine Stelle weniger zu berechnen hat, was Aufwand spart. So kriegt man hier mit demselben Aufwand wie bei (A.2), nämlich zwei Funktionsauswertungen, eine um eins höhere Ordnung des Verfahrens.

Wir geben nun noch grob die Vorgehensweise bei einem allgemeinen $2n + 1$ -stufigen Verfahren an. Dabei geht man aus von

$$\frac{a_{2n+1}f(x + nh) + \dots + a_{n+1}f(x) + a_n f(x - h) + \dots + a_1 f(x - nh)}{h}.$$

Es wird wieder eine Taylorentwicklung der Ausdrücke ausgeführt und daraus über Koeffizientenvergleich ein lineares Gleichungssystem erzeugt:

$$\begin{aligned} a_{2n+1} + \dots + a_1 &= 0 \\ na_{2n+1} + (n-1)a_{2n} + \dots + a_{n+2} - a_{n-1} - \dots - na_1 &= 1 \\ n^2 a_{2n+1} + (n-1)^2 a_{2n} + \dots + a_{n+2} + a_{n-1} + \dots + n^2 a_1 &= 0 \\ &\vdots = 0 \\ n^{2n} a_{2n+1} + \dots + a_{n+2} + a_{n-1} + \dots + n^{2n} a_1 &= 0. \end{aligned} \tag{A.6}$$

Da wir es mit $2n + 1$ Unbekannten zu tun haben, benötigen wir ebenso viele Gleichungen. Dabei nimmt die Ordnung mit jeder weiteren Gleichung um eins zu. Somit erhalten wir ein Verfahren, bei dem der Fehler von der Ordnung $\mathcal{O}(h^{2n})$ ist.

A.2 Zweite Ableitung

Wir wollen nun auch ein Verfahren für die Berechnung der zweiten Ableitung herleiten. Die zweite Ableitung taucht in der Taylorentwicklung als Term zweiter Ordnung auf. Für einen ersten Ansatz verwenden wir den Ansatz, der uns im letzten Abschnitt die erste Ableitung bis zu dieser Ordnung ergeben hat. Wir müssen nur die Gleichungen modifizieren, da nun der Term der zweiten Ableitung nicht mehr verschwinden soll, dafür aber der der ersten Ableitung. Wir verwenden daher

$$\frac{af(x+h) + bf(x) + cf(x-h)}{h^2},$$

woraus sich durch Taylorentwicklung die Bestimmungsgleichungen für a, b und c ergeben. Da die zweite Ableitung bei uns immer nur in Termen der Form

$$\frac{p^2}{2m} = -\frac{\Delta}{2m}$$

vorkommt, bestimmen wir die Koeffizienten so, dass wir $-1/2$ mal die zweite Ableitung erhalten. Demnach bekommen wir das System

$$\begin{aligned} a + b + c &= 0 \\ a - c &= 0 \\ a + c &= -1 \end{aligned} \tag{A.7}$$

mit der eindeutigen Lösung

$$a = -\frac{1}{2} \quad b = 1 \quad c = -\frac{1}{2}. \quad (\text{A.8})$$

Auch hier ist die symmetrische Wahl der Stützstellen wieder von Vorteil. Wenn wir das Ergebnis betrachten, fällt auf, dass die Koeffizienten a und c gleich sind, was wegen $a - c = 0$ auch klar erkennbar ist. So kann man aber erkennen, dass, wenn man diese Koeffizienten auch bei weiteren Termen symmetrisch wählt, die Gleichungen für die ungeraden Ordnungen automatisch erfüllt sind. Somit können wir die Zahl der Gleichungen und Unbekannten direkt nahezu halbieren. Das Verfahren für beliebige symmetrische $2n + 1$ Stützstellen ist

$$\frac{a_n f(x + nh) + \dots + a_0 f(x) + a_1 f(x - h) + \dots + a_n f(x - nh)}{h^2}.$$

Aus einer Taylorentwicklung ergeben sich die Gleichungen

$$\begin{aligned} 2a_n + \dots + a_0 &= 0 \\ na_n + (n-1)a_{n-1} + \dots + a_1 - a_1 - \dots - na_n &= 0 \\ n^2 a_n + (n-1)^2 a_{n-1} + \dots + a_1 + a_1 + \dots + n^2 a_n &= -1 \\ &\vdots = 0 \\ n^{2n} a_n + \dots + a_1 + a_1 + \dots + n^{2n} a_n &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Die zweite Gleichung haben wir noch einmal hingeschrieben, um klar zu machen, dass die Gleichungen ungerader Ordnung aufgrund der Symmetrie der Koeffizienten automatisch erfüllt sind. Bei der dritten Gleichung ist zu beachten, dass der gewünschte Faktor $1/2$ durch die Taylorentwicklung in der zweiten Ordnung zu Stande kommt. Sie trägt nämlich genau diesen Faktor bei.

Anhang B

QED Herleitung der Selbstenergie

B.1 Vakuumpolarisation

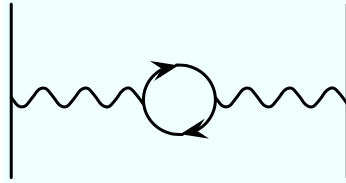


Abbildung B.1: Vakuumpolarisation

Ein erster Beitrag zur Lamb-Verschiebung entsteht dadurch, dass die zwischen Elektron und Kern ausgetauschten Photonen virtuelle Elektron-Positron-Paare bilden können. Dieser als Vakuumpolarisation bezeichnete Effekt führt zu einer Änderung des Photonen-Propagators. Durch diese Korrektur wird der Propagator modifiziert zu

$$\begin{aligned} iD_{\mu\nu}^I(q) &= iD_{\mu\nu}(q) + iD_{\mu\lambda}(q)i\Pi^{\lambda\sigma}(q)iD_{\sigma\nu}(q) \\ &+ iD_{\mu\lambda}(q)i\Pi^{\lambda\sigma}(q)iD_{\sigma\kappa}(q)i\Pi^{\kappa\rho}(q)iD_{\rho\nu}(q) + \dots \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

Für die einfachste Schleife erhält man mit Hilfe der Feynman-Regeln [42]

$$i\Pi^{\mu\nu} = (-ie)^2(-1) \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \text{Tr} \left[\gamma^\mu \frac{i}{\not{k} - m} \gamma^\nu \frac{i}{\not{k} + \not{q} - m} \right]. \quad (\text{B.2})$$

Ein Problem bei allen Korrekturen, die wir hier vornehmen wollen, ist, dass sie keine kleinen Korrekturen sind, sondern allesamt divergieren. Hier ergibt eine grobe Abzählung der k -Potenzen im Integranden eine quadratische Divergenz.

$\Pi^{\mu\nu}$ als Tensor kann nur aus Tensorbeiträgen $g^{\mu\nu}$ und $q^\mu q^\nu$ aufgebaut sein. Die Ward-Identität (siehe [42, 44])

$$q_\mu \Pi^{\mu\nu}(q) = 0$$

führt dazu, dass $\Pi^{\mu\nu}$ proportional zu $(g^{\mu\nu} - q^\mu q^\nu / q^2)$ sein muss. Man schreibt darum allgemein

$$\Pi^{\mu\nu}(q) = (q^2 g^{\mu\nu} - q^\mu q^\nu) \Pi(q^2), \quad (\text{B.3})$$

wobei $\Pi(q^2)$ regulär bei $q^2 = 0$ ist [42]. Ein weiterer Term in der Form $Dg^{\mu\nu}$ ist nicht möglich, da dies die geforderte Eichinvarianz der Theorie verletzen würde [44]. Der exakte Propagator kann

nun durch Aufsummieren der Reihe (B.1) erhalten werden. So kommt man unter Verwendung der Ward-Identität (siehe [42]) zu

$$iD_{\mu\nu}^I(q) = \frac{-g_{\mu\nu}}{q^2(1 - \Pi(q^2))}. \quad (\text{B.4})$$

Da $\Pi(q^2)$ regulär in $q^2 = 0$ ist, hat auch der exakte Photonen-Propagator seinen Pol bei $q^2 = 0$, wodurch das Photon masselos in allen Ordnungen der Störungstheorie bleibt. Das Residuum des Pols bei $q^2 = 0$ ist

$$\frac{1}{1 - \Pi(0)} = Z_3.$$

Diesen Wert kann man in die physikalisch observable Ladung des Elektrons absorbieren, da man die Ladung nie ohne den Einfluss des Strahlungsfelds messen kann

$$e^R = \sqrt{Z_3}e_0.$$

Für den Wert von Z_3 erhält man aus [44] das Ergebnis

$$Z_3 = 1 - \frac{\alpha}{3\pi} \ln \frac{\Lambda^2}{m^2}$$

durch Regularisierung nach Pauli-Villars, bei der man den Photonen-Propagator gemäß

$$\frac{1}{k^2} \rightarrow \frac{1}{k^2} - \frac{1}{k^2 - \Lambda^2} \quad (\text{B.5})$$

regularisiert. Dieser Beitrag wird, wie erwähnt, in die physikalische Ladung aufgenommen, da er sich nicht von der nackten Ladung trennen lässt. Es gibt aber auch einen sehr wohl messbaren Impuls abhängigen Beitrag von $\Pi(q^2)$. Dieser verändert das elektromagnetische Potential einer Punktladung zu [42]

$$V(\vec{r}) = -\frac{Z\alpha}{r} - \frac{4Z\alpha^2}{15m^2} \delta^{(3)}(\vec{r}).$$

Dieser Effekt wurde 1935 von Uehling entdeckt [9] und ist ein geringer Beitrag zur Lamb-Verschiebung, denn die Korrektur ist zum einen wegen der δ -Funktion nur für S -Zustände relevant, zum anderen ist die dadurch hervorgerufene Frequenzverschiebung mit [44]

$$\nu = \frac{E_{2S} - E_{2P}}{2\pi\hbar} = -27.1\text{MHz}$$

kaum relevant gegenüber der gesamten Lamb-Verschiebung von [10]

$$\nu_{\text{exp}} = +1057.8\text{MHz}.$$

Der Hauptteil der Lamb-Verschiebung kommt also von den weiteren Strahlungskorrekturen, die wir in den nächsten Abschnitten betrachten werden.

B.2 Selbstenergie des Elektrons

Ähnlich dem Photonen-Propagator ist auch der Elektronen-Propagator durch den Einfluss virtueller Photonen zu modifizieren. In Ordnung α wird dies dargestellt durch die Aussendung und den Einfang eines virtuellen Photons. Man kann erneut eine Reihe der Modifikationen zum vollen Propagator schreiben

$$S_F^I(p) = S_F(p) + S_F(p)\Sigma(p)S_F(p) + S_F(p)\Sigma(p)S_F(p)\Sigma(p)S_F(p) + \dots \quad (\text{B.6})$$



Abbildung B.2: Selbstenergie

Aus Abb. B.2 erhält man durch Ausnutzung der Feynman-Regeln die bekannte Selbstenergiefunktion (siehe [44])

$$\Sigma(p) = ie^2 \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} D_{\mu\nu}(k) \gamma^\mu \frac{1}{\not{p} - \not{k} - m_0 + i\epsilon} \gamma^\nu. \quad (\text{B.7})$$

Auch sie ist wie die Korrektur im vorherigen Abschnitt wieder divergent; diesmal allerdings nur linear. Trotzdem kann die Störungsreihe wieder formal aufsummiert werden, was

$$S_F^I(p) = \frac{1}{\not{p} - m_0 - \Sigma(p) + i\epsilon} \quad (\text{B.8})$$

ergibt. Die Position des Pols gibt dabei die physikalische Masse des Elektrons m an. Sie ist als Lösung der Gleichung

$$[\not{p} - m_0 - \Sigma(p)]_{\not{p}=m} = 0 \quad (\text{B.9})$$

gegeben. Man fasst sie als Massenrenormierung auf, also

$$\delta m = \Sigma(\not{p} = m) \approx \Sigma(\not{p} = m_0),$$

wodurch das Elektron die physikalisch beobachtbare Masse

$$m = m_0 + \delta m$$

erhält, da man diesen Effekt bei Messungen nicht abstellen kann und somit die nackte Masse m_0 nicht allein messbar ist. Die Massenrenormierung berechnet man, indem man den Photon-Propagator gemäß Pauli-Villars regularisiert (B.5). Man erhält [44]

$$\delta m = \alpha \frac{3m}{4\pi} \left[\ln \left(\frac{\Lambda^2}{m_0^2} \right) + \frac{1}{2} \right]. \quad (\text{B.10})$$

Die Korrektur trägt zwar einen Faktor α , ist aber trotzdem logarithmisch divergent, was zwar weniger ist als unsere anfängliche Schätzung ergab, aber letztlich immer noch unendlich groß. Der Logarithmus wird aber erst, wenn $\Lambda \approx m \cdot 10^{280}$ [44] ist, merklich von eins verschieden. Aber nicht nur die Position des Pols verändert sich, auch das Residuum bleibt nicht gleich, wodurch sich die physikalische Ladung des Elektrons zu

$$e'_R = Z_2 \sqrt{Z_3} e$$

ändert, mit der Renormierungskonstanten

$$Z_2^{-1} = 1 - \left. \frac{\partial \Sigma(p)}{\partial \not{p}} \right|_{\not{p}=m}.$$

Um sie zu bestimmen, ist es nötig, den Photon-Propagator sowohl im Infraroten als auch im Ultravioletten zu regularisieren. Das geschieht durch die folgende Ersetzung:

$$\frac{1}{k^2} \rightarrow \frac{1}{k^2 - \mu^2} - \frac{1}{k^2 - \Lambda^2}. \quad (\text{B.11})$$

Damit erhält man nun

$$Z_2 = 1 - \frac{\alpha}{2\pi} \left[\frac{1}{2} \ln \left(\frac{\Lambda^2}{m^2} \right) + \ln \left(\frac{\mu^2}{m^2} \right) + \frac{9}{4} \right]. \quad (\text{B.12})$$

Das Ergebnis ist allerdings in vielerlei Hinsicht unbefriedigend, da es sowohl für $\mu \rightarrow 0$ als auch für $\Lambda \rightarrow \infty$ logarithmisch divergent ist. Weiterhin weist es nicht die gewünschte Eichinvarianz auf und hängt auch noch von der fiktiven Photonenmasse μ ab. Wie sich diese Probleme lösen lassen, werden wir im nächsten Abschnitt sehen.

B.3 Vertexkorrektur

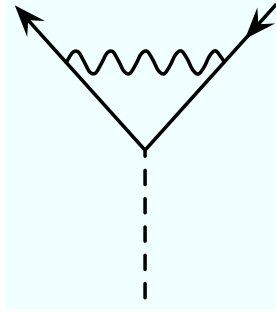


Abbildung B.3: Vertexkorrektur

Die letzte Korrektur ergibt sich, wenn in einem Vertex ein virtuelles Photon ausgetauscht wird. Dazu ersetzt man

$$-ie\gamma_\mu \rightarrow -ie\gamma_\mu - ie\Gamma_\mu(p, p'). \quad (\text{B.13})$$

Die in der Korrektur enthaltene Vertexfunktion Γ_μ bestimmt man erneut durch die Feynman-Regeln zu [44]

$$\Gamma_\mu(p, p') = -ie^2 \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \frac{1}{k^2} \left(\gamma^\nu \frac{1}{\not{p}' - \not{k} - m} \gamma_\mu \frac{1}{\not{p} - \not{k} - m} \gamma_\nu \right). \quad (\text{B.14})$$

Wiedereinmal haben wir einen divergenten Ausdruck vor uns, wobei die Divergenz diesmal nur logarithmisch ist. Ähnlich wie in App. B.1 nutzen wir hier die Tensorstruktur aus, um die möglichen Beiträge zu Γ^μ zu finden. Γ^μ verhält sich wie ein Lorentz-Vektor und kann damit nur von solchen abhängen. Dies führt uns auf

$$\Gamma^\mu(p', p) = A\gamma^\mu + B(p'^\mu + p^\mu) + C(p'^\mu - p^\mu). \quad (\text{B.15})$$

Es lässt sich unter Ausnutzung der Gordon-Identität zeigen [42], dass

$$\Gamma_\mu(p', p) = \gamma_\mu F_1(q^2) + \frac{i\Sigma^{\mu\nu}q_\nu}{2m} F_2(q^2) \quad (\text{B.16})$$

gilt, mit dem elektrischen Formfaktor F_1 , dem magnetischen F_2 und $q^\mu = p'^\mu - p^\mu$. Da die Berechnung dieses Ausdrucks recht komplex ist, wenden wir uns nur dem divergenten Anteil zu. Durch eine Entwicklung des Elektronen-Propagators findet man den divergenten Anteil bei $p = p'$, was auf

$$\Gamma_\mu(p, p) = \gamma_\mu F_1(0) \quad (\text{B.17})$$

führt. Darum führen wir eine weitere Ladungsrenormierung durch:

$$-ie\gamma_\mu \rightarrow -ie\gamma_\mu - ie\gamma_\mu F_1(0) - ie\Gamma_\mu^R(p', p) = -ie(1 + F_1(0))\Gamma_\mu^R(p', p). \quad (\text{B.18})$$

Γ^R bezeichnet dabei die renormierte Vertexfunktion, aus der diese Divergenz entfernt wurde. Somit erhält man als dreifach renormierte Elektronenladung

$$e''_R = Z_1^{-1} Z_2 \sqrt{Z_3} e_0 \quad (\text{B.19})$$

mit

$$Z_1^{-1} = 1 + F_1(0) \quad \text{oder} \quad Z_1 = 1 - F_1(0). \quad (\text{B.20})$$

Die Bestimmung von Γ_μ ist durch Ausnutzung der Ward-Identität möglich:

$$\Gamma_\mu(p, p) = - \left. \frac{\partial \Sigma(p)}{\partial p^\mu} \right|_{\not{p}=m}. \quad (\text{B.21})$$

Damit erhalten wir

$$F_1(0) \gamma_\mu = \Gamma_\mu(p, p) = - \left. \frac{\partial \Sigma(p)}{\partial p^\mu} \right|_{\not{p}=m} = - \gamma_\mu \left. \frac{\partial \Sigma(p)}{\partial \not{p}} \right|_{\not{p}=m} \quad (\text{B.22})$$

und somit

$$F_1(0) = - \left. \frac{\partial \Sigma(p)}{\partial \not{p}} \right|_{\not{p}=m} \quad \text{also} \quad Z_1 = Z_2. \quad (\text{B.23})$$

Das ist ein sehr erfreuliches Ergebnis, da es aufgrund von

$$e''_R = Z_1^{-1} Z_2 \sqrt{Z_3} e_0 = Z_1^{-1} Z_1 \sqrt{Z_3} e_0 = \sqrt{Z_3} e_0 \quad (\text{B.24})$$

bedeutet, dass sich die beiden nicht eichinvarianten Renormierungen Z_1 und Z_2 gerade heraus kürzen. Damit erhalten wir eine eichinvariante und renormierte Elektronenladung. Man definiert darum F_1 so, dass es neben der Vertexkorrektur auch den Selbstenergie-Beitrag zur Ladung bereits einschließt und verwendet $F_1(0) = 0$ als Renormierungsbedingung. Diese Definition werden wir auch im Folgenden anwenden.

B.4 Selbstenergie in einem gebundenen Zustand

In App. B.2 haben wir nur die Selbstenergie für ein freies Elektron bestimmt. Für die Berechnung der Lamb-Verschiebung ist es aber erforderlich, dies für ein gebundenes Elektron durchzuführen. Durch unsere Vorarbeit ist das jedoch nicht mehr so schwierig und die Selbstenergie enthält auch automatisch die Vertexkorrektur. Wir verwenden wieder die Reihendarstellung des vollen Propagators

$$S_F^I(p) = S_F(p) + S_F(p) \Sigma(p) S_F(p) + S_F(p) \Sigma(p) S_F(p) \Sigma(p) S_F(p) + \dots \quad (\text{B.25})$$

Zur weiteren Rechnung verwenden wir den Feynman-Propagator für die Dirac-Gleichung im Ortsraum nach der Zeit fouriertransformiert:

$$S_F(\vec{r}_1, \vec{r}_2, E) = \sum_n \frac{\psi_n(\vec{r}_1) \bar{\psi}_n(\vec{r}_2)}{E - E_n (1 - i\epsilon)}. \quad (\text{B.26})$$

Man erkennt, dass die Pole des Propagators bei den Energie-Eigenwerten E_n der Dirac-Gleichung liegen; sie erfahren eine leichte Modifikation durch die renormierte Selbstenergiekorrektur Σ_{ren} . So ergeben sich die neuen Positionen $\tilde{E}_n = E_n + \sigma_n(E_n)$, die den durch die Selbstenergie verschobenen Energieniveaus entsprechen. Wir bestimmen, wobei hier über n **nicht** summiert wird:

$$\begin{aligned} \langle \bar{\psi}_n | \gamma^0 S_F \gamma^0 | \psi_n \rangle &= \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \sum_m \psi_n^+(\vec{r}_1) \psi_m(\vec{r}_2) \psi_m^+(\vec{r}_2) \psi_n(\vec{r}_2) \\ &= \sum_m \delta_{nm} \delta_{nm} \frac{1}{E - E_m} = \frac{1}{E - E_n} \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

und

$$\begin{aligned}
\langle \bar{\psi}_n | \gamma^0 S_F \Sigma_{\text{ren}} S_F \gamma^0 | \psi_n \rangle &= \langle \bar{\psi}_n | \gamma^0 S_F \gamma^0 \gamma^0 \Sigma_{\text{ren}} S_F \gamma^0 | \psi_n \rangle \\
&= \sum_m^f \sum_l^f \langle \bar{\psi}_n | \gamma^0 S_F \gamma^0 | \psi_l \rangle \langle \bar{\psi}_l | \Sigma_{\text{ren}} | \psi_m \rangle \langle \bar{\psi}_m | S_F \gamma^0 | \psi_n \rangle \\
&= \sum_m^f \sum_l^f \frac{1}{E - E_n} \delta_{nl} \langle \bar{\psi}_l | \Sigma_{\text{ren}} | \psi_m \rangle \frac{1}{E - E_m} \delta_{mn} \\
&= \frac{\langle \bar{\psi}_n | \Sigma_{\text{ren}} | \psi_n \rangle}{(E - E_n)^2}.
\end{aligned} \tag{B.28}$$

In erster Ordnung nimmt also die Reihenentwicklung die folgende Form an:

$$\langle \bar{\psi}_n | S_F^I | \psi_n \rangle = \frac{1}{E - E_n} + \frac{\langle \bar{\psi}_n | \Sigma_{\text{ren}} | \psi_n \rangle}{(E - E_n)^2} + \dots = \frac{1}{E - E_n - \langle \psi_n | \Sigma_{\text{ren}} | \psi_n \rangle}. \tag{B.29}$$

In derselben Ordnung kann man für die Energieverschiebung durch die Selbstenergie

$$\delta E_{SE} = \langle \bar{\psi}_n | \Sigma_{\text{ren}} | \psi_n \rangle \tag{B.30}$$

ansetzen. Das lässt sich nun durch Einsetzen von (B.7) bestimmen. Dabei ist aber natürlich zu berücksichtigen, dass wir es mit einem gebundenen Zustand zu tun haben. Das machen wir, indem wir statt des freien Feynman-Propagators den Dirac-Coulomb-Propagator verwenden, der das auf das Elektron wirkende Coulomb-Feld in allen Ordnungen berücksichtigt. Er hat die Gestalt

$$S_F^V = \frac{1}{\not{p} - \not{k} - m - \gamma^0 V}. \tag{B.31}$$

Für den Selbstenergie-Beitrag zur Lamb-Verschiebung eines gebundenen Zustands $|\psi\rangle$ erhalten wir damit

$$\delta E_{SE} = \langle \bar{\psi} | ie^2 \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} D_{\mu\nu}(k) \gamma^\mu \frac{1}{\not{p} - \not{k} - m - \gamma^0 V} \gamma^\nu - \text{Ren} | \psi \rangle. \tag{B.32}$$

“Ren” steht dabei für alle Terme, die zur Renormierung abgezogen werden müssen. Es kann aber gezeigt werden [21], dass es zur Renormierung lediglich notwendig ist, den Massengegenterm abzuziehen. Somit erhalten wir als Endergebnis

$$\delta E_{SE} = ie^2 \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} D_{\mu\nu}(k) \langle \bar{\psi} | \gamma^\mu \frac{1}{\not{p} - \not{k} - m - \gamma^0 V} \gamma^\nu | \psi \rangle - \langle \bar{\psi} | \delta m | \psi \rangle. \tag{B.33}$$

B.5 Effektiver Hamiltonian

Für den Hochenergie-Anteil ist es erforderlich, die Strahlungskorrekturen der QED in den Dirac-Hamiltonian mit einzubeziehen. Dazu benutzen wir die Darstellung der Korrekturen in den beiden Formfaktoren aus dem letzten Abschnitt. Wir gehen aus von (2.1), ersetzen dort $\gamma^\mu \rightarrow \Gamma^\mu(p', p)$ und setzen (B.16) für Γ ein. Es ist dabei zu beachten, dass α und β aus γ -Matrizen bestehen. So bekommt man

$$H_D^{(m)} = \gamma^0 \left[\vec{\gamma} \left(\vec{p} - e F_1(-\vec{q}^2) \vec{A} \right) + m + e \gamma^0 F_1(-\vec{q}^2) \phi + e F_2(-\vec{q}^2) \frac{i \Sigma^{\mu\nu} q_\nu}{2m} \left(\gamma^0 \phi - \vec{\gamma} \cdot \vec{A} \right) \right]. \tag{B.34}$$

Eine Fourier-Transformation führt nun die Impulsoperatoren in Ableitungen über. Wir wollen den Term mit F_2 vereinfachen. Dazu benutzen wir

$$E_a = -\partial_a \phi - \partial_0 A_a$$

und erhalten so

$$i\frac{\Sigma^{0a}\partial_a}{2m}\gamma^0\phi + i\frac{\Sigma^{a0}\partial_0}{2m}\gamma^a A_a = \frac{i}{2m}\gamma^0\gamma^a(-\partial_a\phi - \partial_0 A_a) = \gamma^0\frac{i}{2m}\vec{\gamma}\vec{E}. \quad (\text{B.35})$$

Wir erinnern uns an

$$B_a = \epsilon_{aij}\partial_i A_j$$

und an (2.12). So können wir für zwei räumliche Indizes

$$i\frac{\Sigma^{ab}\partial_b}{2m}\gamma^a A_a = -\frac{1}{2m}\epsilon_{cba}\Sigma^c\partial_b A_a = -\frac{1}{2m}\vec{\Sigma}\cdot\vec{B} \quad (\text{B.36})$$

erhalten. Der effektive Hamiltonian kann damit zusammengefasst werden zu

$$H_D^{(m)} = \vec{\alpha}\left[\vec{p} - eF_1(\Delta)\vec{A}\right] + \beta m + F_1(\Delta)V + F_2(\Delta)\frac{e}{2m}\left(i\vec{\gamma}\cdot\vec{E} - \beta\vec{\Sigma}\cdot\vec{B}\right), \quad (\text{B.37})$$

wobei wir die Definitionen aus Kap. 2.2 verwenden.

Anhang C

Reparametrisierungsinvarianz an einem Beispiel

In diesem Abschnitt wollen wir ein analytisches Modellbeispiel betrachten und an ihm zeigen, dass verschiedene Reparametrisierungen der Regularisierung zum selben Ergebnis führen. Ebenso macht es auch die Notwendigkeit der Trennung des Integrationsbereiches klar. Wir verwenden dazu das bereits in [20] zur Erklärung der Photonen-Energieregularisierung verwendete Beispiel. Es handelt sich dabei um das folgende eindimensionale Modellproblem mit einem virtuellen Photon, dargestellt durch die Auswertung des Integrals

$$I = \int_0^1 \frac{\sqrt{\omega^2 + \beta^2}}{\sqrt{1 - \omega^2}} d\omega. \quad (\text{C.1})$$

In diesem Beispiel entspricht der Faktor $\sqrt{\omega^2 + \beta^2}$ dem Schrödinger-Coulomb-Propagator bei der Selbstenergie. Die UV-Divergenz nehmen wir als bereits renormiert an und betrachten hier nur das Integral bis eins. Da in diesem Beispiel β das Analogon zu $Z\alpha$ darstellen soll, gilt, dass es sich dabei um eine vergleichsweise kleine Zahl handeln soll. Für $\beta \ll \omega$ können wir also in β entwickeln, so wie man das auch bei der Selbstenergie tut. Dies führt bis zur Ordnung β^4 , zu der wir das Problem hier betrachten wollen, auf den ‘‘Hochenergie-Anteil’’

$$I_{\text{hep}} = \int_0^1 \sqrt{\frac{\omega^2}{1 - \omega^2}} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\omega^2} - \frac{1}{8} \frac{\beta^4}{\omega^4} \right) d\omega. \quad (\text{C.2})$$

Er ist bis auf den ersten Term allerdings für $\omega \rightarrow 0$ (infrarot-) divergent, so dass wir dieses Integral nun regularisieren müssen. Dazu verwenden wir drei Methoden, nämlich Energieregularisierung, Massenregularisierung und dimensionale Regularisierung. Den ‘‘Niedrigenergie-Anteil’’ erhält man, indem man für kleines ω die Entwicklung von $\sqrt{1 - \omega^2}$ durchführt. Die Wurzel im Zähler lässt man dabei intakt. Dies entspricht der Mitnahme des vollen Propagators im Niedrigenergie-Anteil der Selbstenergie und der Entwicklung der Exponentialfunktion, bei der Korrektur durch den relativistischen Strom. Diese Entwicklung ist nur für kleine ω gültig, so dass wir nur ein Integral von null bis ϵ berechnen können, wobei $0 \ll \epsilon \ll 1$ gilt. Das Integral des ‘‘Niedrigenergie-Anteils’’ ist damit gegeben durch

$$I_{\text{lep}} = \int_0^\epsilon \sqrt{\omega^2 + \beta^2} \left(1 + \frac{\omega^2}{2} \right) d\omega. \quad (\text{C.3})$$

Dieses Beispiel werden wir nun in den verschiedenen Regularisierungen durchrechnen und zeigen, dass das Ergebnis invariant ist. Beginnen werden wir dabei mit der Energieregularisierung.

C.1 Energieregularisierung

Dies ist für dieses Beispiel die natürlichste Form der Regularisierung. Denn wir benutzen einen IR-Cutoff für das Integral

$$I_{\text{hep},\epsilon} = \int_{\epsilon}^1 \sqrt{\frac{\omega^2}{1-\omega^2}} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\beta^2}{\omega^2} - \frac{1}{8} \frac{\beta^4}{\omega^4} \right) d\omega. \quad (\text{C.4})$$

Dazu verwenden wir denselben Parameter ϵ , der bereits die Grenze unseres ‘‘Niedrigenergie-Anteils’’ darstellt und somit auf natürliche Weise den Gültigkeitsbereich der beiden von uns verwendeten Entwicklungen trennt. Im Bereich $< \epsilon$ ist die Entwicklung von $\sqrt{1-\omega^2}$ für kleines ω gültig, im Bereich $> \epsilon$ die für kleines β . Die Integration des obigen Integrals führt auf

$$I_{\text{hep},\epsilon} = \sqrt{1-\epsilon^2} + \frac{\beta^2}{2} \ln \left(\frac{1+\sqrt{1-\epsilon^2}}{\epsilon} \right) - \frac{\beta^4}{16} \left[\frac{\sqrt{1-\epsilon^2}}{\epsilon^2} + \ln \left(\frac{1+\sqrt{1-\epsilon^2}}{\epsilon} \right) \right]. \quad (\text{C.5})$$

Da $\epsilon \ll 1$ gilt, entwickeln wir nun um $\epsilon = 0$, was bis zur Ordnung $\mathcal{O}(\epsilon)$

$$I_{\text{hep},\epsilon} = 1 + \frac{\beta^2}{2} \ln \left(\frac{2}{\epsilon} \right) - \frac{\beta^4}{16} \left[\frac{1}{\epsilon^2} - \frac{1}{2} + \ln \left(\frac{2}{\epsilon} \right) \right] \quad (\text{C.6})$$

ergibt. Den Beitrag für kleine ω erhalten wir durch Integration von (C.3). Dies entwickeln wir dann zuerst in β und dann in ϵ , was auf

$$I_{\text{lep},\epsilon} = \frac{\beta^2}{2} \left[\frac{1}{2} + \ln \left(\frac{2\epsilon}{\beta} \right) \right] + \frac{\beta^4}{16\epsilon^2} + \frac{\beta^4}{16} \left[\frac{1}{4} + \ln \left(\frac{\beta}{2\epsilon} \right) \right] \quad (\text{C.7})$$

führt. Die Summe beider Beiträge führt dann auf das Gesamtergebnis

$$I_{\epsilon} = I_{\text{hep},\epsilon} + I_{\text{lep},\epsilon} = 1 + \frac{\beta^2}{2} \left[\frac{1}{2} + \ln \left(\frac{4}{\beta} \right) \right] - \frac{\beta^4}{16} \left[\ln \left(\frac{4}{\beta} \right) - \frac{3}{4} \right]. \quad (\text{C.8})$$

C.2 Massenregularisierung

Hier regularisiert man das Integral (C.2), indem man von ω^2 zu $\omega^2 + \mu^2$ übergeht. Dies entspricht bei der Selbstenergie der Einführung einer kleinen virtuellen Photonenmasse. Dadurch wird die Divergenz von (C.2) beseitigt und wir können bis null herunter integrieren. Für den ‘‘Hochenergie-Anteil’’ ist also das Integral

$$I_{\text{hep},\mu} = \int_0^1 \left(\frac{\sqrt{\mu^2 + \omega^2}}{\sqrt{1-\omega^2}} + \frac{\beta^2}{2\sqrt{\mu^2 + \omega^2}\sqrt{1-\omega^2}} - \frac{\beta^4}{8\sqrt{\mu^2 + \omega^2}^3\sqrt{1-\omega^2}} \right) d\omega \quad (\text{C.9})$$

zu bestimmen, wobei die Entwicklung nach β bereits durchgeführt wurde. Auch mit der Regularisierung berechnen wir das Integral nicht direkt, sondern zuerst den regularisierten Hauptteil

$$I_{h,\text{reg},\mu} = \int_0^1 \left(\frac{\omega}{\sqrt{1-\omega^2}} + \frac{\beta^2}{2\sqrt{\mu^2 + \omega^2}} - \frac{\beta^4(1+\frac{\omega^2}{2})}{8\sqrt{\mu^2 + \omega^2}^3} \right) d\omega. \quad (\text{C.10})$$

Diesen entwickeln wir dann für kleines μ , was auf

$$I_{h,\text{reg},\mu} = \frac{\beta^2}{2} \ln \left(\frac{2}{\mu} \right) - \frac{\beta^4}{8\mu^2} + \frac{\beta^4}{8} - \frac{\beta^4}{16} \ln \left(\frac{2}{\mu} \right) \quad (\text{C.11})$$

führt. Das gesamte Integral berechnen wir nun, indem wir den Hauptteil vom Gesamtintegral abziehen, also den Nebenteil integrieren, und dann vor der Integration $\mu = 0$ setzen. Zu diesem Ergebnis addieren wir schließlich den regularisierten Hauptteil dazu. So erhalten wir

$$I_{\text{hep},\mu} = 1 + \frac{\beta^2}{2} \ln\left(\frac{4}{\mu}\right) - \frac{\beta^4}{8\mu^2} + \frac{3\beta^4}{32} - \frac{\beta^4}{16} \ln\left(\frac{4}{\mu}\right). \quad (\text{C.12})$$

Für die Umrechnung des ‘‘Niedrigenergie-Anteils’’ in Massenregularisierung berechnen wir das Integral

$$I_{\text{lep},\mu}^* = \int_0^\epsilon \sqrt{\omega^2 + \beta^2 + \mu^2} \left(1 + \frac{\omega^2}{2}\right) d\omega. \quad (\text{C.13})$$

Entwickeln wir dies erst in β , dann in μ und zuletzt in ϵ , so erhalten wir

$$I_{\text{lep},\mu}^* = \frac{\beta^2}{2} \ln\left(\frac{2\epsilon}{\mu}\right) - \frac{\beta^4}{16} \left[\frac{2}{\mu^2} - \frac{1}{\epsilon^2} - 1 + \ln\left(\frac{2\epsilon}{\mu}\right) \right]. \quad (\text{C.14})$$

Dies gibt uns die Umrechnung von Energie- zu Massenregularisierung an. Ziehen wir es vom ‘‘Niedrigenergie-Anteil’’ in Energieregularisierung ab, so erhalten wir diesen Anteil in Massenregularisierung, der damit durch

$$I_{\text{lep},\mu} = \frac{\beta^2}{2} \left[\frac{1}{2} + \ln\left(\frac{\mu}{\beta}\right) \right] - \frac{\beta^4}{16} \left[\frac{3}{4} - \frac{2}{\mu^2} + \ln\left(\frac{\mu}{\beta}\right) \right] \quad (\text{C.15})$$

gegeben ist. Die Addition von ‘‘Hoch-’’ und ‘‘Niedrigenergie-Anteil’’ führt letztlich auf

$$I_\mu = I_{\text{hep},\mu} + I_{\text{lep},\mu} = 1 + \frac{\beta^2}{2} \left[\frac{1}{2} + \ln\left(\frac{4}{\beta}\right) \right] - \frac{\beta^4}{16} \left[\ln\left(\frac{4}{\beta}\right) - \frac{3}{4} \right]. \quad (\text{C.16})$$

C.3 Dimensionale Regularisierung

Hier führen wir einen Regularisierungsparameter η ein und multiplizieren unser Integral mit ω^η . Dies entspricht im Falle der Selbstenergie der dimensional Regularisierung und dort der Änderung der Photonen-Energiepotenz durch die Jacobi-Determinante bei Erhöhung der Dimension. Somit haben wir

$$I_{\text{hep},\eta} = \int_0^1 \omega^\eta \left(\frac{\omega}{\sqrt{1-\omega^2}} + \frac{\beta^2}{2\omega\sqrt{1-\omega^2}} - \frac{\beta^4}{8\omega^3\sqrt{1-\omega^2}} \right) d\omega. \quad (\text{C.17})$$

Auch hier berechnen wir erst das Integral des regularisierten Hauptteils

$$I_{h,\text{rep},\eta} = \int_0^1 \left(\omega^{1+\eta} + \frac{\beta^2}{2\omega^{1-\eta}} - \frac{\beta^4}{8\omega^{3-\eta}} - \frac{\beta^4}{16\omega^{1-\eta}} \right) d\omega. \quad (\text{C.18})$$

Das Ergebnis der Integration entwickeln wir in η und addieren es zum Integral des Nebenteils, in dem $\eta = 0$ gesetzt wurde. Damit ergibt sich für den ‘‘Hochenergie-Anteil’’ in dimensionaler Regularisierung

$$I_{\text{hep},\eta} = 1 + \frac{\beta^2}{2} \left[\frac{1}{\eta} + \ln(2) \right] - \frac{\beta^4}{16} \left[\frac{1}{\eta} - \frac{1}{2} + \ln(2) \right]. \quad (\text{C.19})$$

Wir müssen auch hier den ‘‘Niedrigenergie-Anteil’’ wieder umrechnen, indem wir für $\eta \rightarrow 0$ und $\epsilon \rightarrow 0$ den Unterschied zwischen Energie- und dimensionaler Regularisierung bestimmen. Dazu berechnen wir das Integral

$$I_{\text{lep},\eta}^* = \int_0^\epsilon \omega^\eta \sqrt{\omega^2 + \beta^2} \left(1 + \frac{\omega^2}{2}\right) d\omega. \quad (\text{C.20})$$

Dieses Integral lässt sich durch Hypergeometrische Funktionen lösen und dann in β entwickeln. In der Praxis ist es jedoch einfacher, $\sqrt{\omega^2 + \beta^2}$ vor der Integration direkt in β zu entwickeln. Dabei muss man allerdings bis zur Ordnung β^6 entwickeln, da man sonst Terme, die nach der Integration zur Ordnung β^4 beitragen, weglassen würde. Nach der Integration nehmen wir dann nur Terme bis zur Ordnung β^4 mit und entwickeln dann in η und ϵ . So erhalten wir

$$I_{\text{lep},\eta}^* = \frac{\beta^2}{2} \left[\frac{1}{\eta} + \ln(\epsilon) \right] - \frac{\beta^4}{16} \left[\frac{1}{\eta} - \frac{1}{\epsilon^2} + \ln(\epsilon) \right]. \quad (\text{C.21})$$

Dies ziehen wir vom ‘‘Niedrigenergie-Anteil’’ in Energieregularisierung ab und erhalten so diesen Anteil in dimensionaler Regularisierung, welcher durch

$$I_{\text{lep},\eta} = \frac{\beta^2}{2} \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{\eta} + \ln \left(\frac{2}{\beta} \right) \right] + \frac{\beta^4}{16} \left[\frac{1}{4} + \frac{1}{\eta} - \ln \left(\frac{2}{\beta} \right) \right] \quad (\text{C.22})$$

gegeben ist. Nun addieren wir die beiden Anteile und erhalten

$$I_\eta = I_{\text{hep},\eta} + I_{\text{lep},\eta} = 1 + \frac{\beta^2}{2} \left[\frac{1}{2} + \ln \left(\frac{4}{\beta} \right) \right] - \frac{\beta^4}{16} \left[\ln \left(\frac{4}{\beta} \right) - \frac{3}{4} \right]. \quad (\text{C.23})$$

Nach diesen Rechnungen können wir erfreut feststellen, dass sowohl (C.8) als auch (C.16) und (C.23) bis zur Ordnung β^4 das selbe Resultat ergeben. Damit haben wir an diesem Beispiel gezeigt, dass das Ergebnis hier invariant unter dem Wechsel der Regularisierung ist und, wie die Regularisierungen in so einem Modellproblem anzuwenden sind. Man konnte dabei gut erkennen, warum die Rechnung in Energieregularisierung für den Niedrigenergie-Anteil die natürlichste darstellt.

Wir haben hier die Reparametrisierungsinvarianz nur an einem Modellproblem betrachtet. Sie kann aber auch für die Selbstenergie gezeigt werden [45].

Anhang D

Einzelerggebnisse

D.1 Ergebnisse für hochangeregte D -Zustände

D.1.1 Niedrigenergie-Anteil für $D_{3/2}$ -Zustände

Niedrigenergie-Anteil für $8D_{3/2}$ -Zustände

$$\begin{aligned}\beta_{nq}(8D_{3/2}) &= 1.971\,189\,4(9) \times 10^{-2} \\ \beta_{pp^2}(8D_{3/2}) &= 5.929\,503\,8(4) \times 10^{-6} \\ \beta_{r \times \sigma}(8D_{3/2}) &= 9.458\,808\,6(4) \times 10^{-3} \\ \beta_{\delta E}(8D_{3/2}) &= 8.028\,571\,4(4) \times 10^{-3} \\ \beta_{\delta\psi}(8D_{3/2}) &= 7.821\,956\,7(4) \times 10^{-2} \\ \beta_{\delta H(LS)}(8D_{3/2}) &= -2.536\,405\,4(4) \times 10^{-2} \\ \beta_{\delta H(p^4)}(8D_{3/2}) &= -6.044\,432\,0(4) \times 10^{-2}.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(8D_{3/2}) &= 0.024\,886\,99(5) \\ A_{60}(8D_{3/2}) &= 0.007\,723\,86(5).\end{aligned}\tag{D.1}$$

Niedrigenergie-Anteil für $9D_{3/2}$ -Zustände

$$\begin{aligned}\beta_{nq}(9D_{3/2}) &= 1.964\,903\,7(9) \times 10^{-2} \\ \beta_{pp^2}(9D_{3/2}) &= 8.276\,361\,4(4) \times 10^{-5} \\ \beta_{r \times \sigma}(9D_{3/2}) &= 9.533\,027\,0(4) \times 10^{-3} \\ \beta_{\delta E}(9D_{3/2}) &= 6.905\,198\,4(4) \times 10^{-3} \\ \beta_{\delta\psi}(9D_{3/2}) &= 8.157\,220\,8(4) \times 10^{-2} \\ \beta_{\delta H(LS)}(9D_{3/2}) &= -2.561\,231\,9(4) \times 10^{-2} \\ \beta_{\delta H(p^4)}(9D_{3/2}) &= -6.231\,948\,9(4) \times 10^{-2}.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(9D_{3/2}) &= 0.025\,043\,91(5) \\ A_{60}(9D_{3/2}) &= 0.008\,083\,01(5).\end{aligned}\tag{D.2}$$

Niedrigenergie-Anteil für $10D_{3/2}$ -Zustände

$$\begin{aligned}
\beta_{nq}(10D_{3/2}) &= 1.960\,595\,8(9) \times 10^{-2} \\
\beta_{pp^2}(10D_{3/2}) &= 1.622\,949\,9(4) \times 10^{-4} \\
\beta_{r \times \sigma}(10D_{3/2}) &= 9.585\,973\,4(4) \times 10^{-3} \\
\beta_{\delta E}(10D_{3/2}) &= 6.008\,407\,7(4) \times 10^{-3} \\
\beta_{\delta\psi}(10D_{3/2}) &= 8.405\,825\,3(4) \times 10^{-2} \\
\beta_{\delta H(LS)}(10D_{3/2}) &= -2.577\,009\,1(4) \times 10^{-2} \\
\beta_{\delta H(p^4)}(10D_{3/2}) &= -6.367\,189\,4(4) \times 10^{-2}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(10D_{3/2}) &= 0.025\,185\,92(5) \\
A_{60}(10D_{3/2}) &= 0.008\,413\,79(5).
\end{aligned} \tag{D.3}$$

Niedrigenergie-Anteil für $11D_{3/2}$ -Zustände

$$\begin{aligned}
\beta_{nq}(11D_{3/2}) &= 1.957\,512\,4(9) \times 10^{-2} \\
\beta_{pp^2}(11D_{3/2}) &= 2.086\,286\,0(4) \times 10^{-4} \\
\beta_{r \times \sigma}(11D_{3/2}) &= 9.625\,071\,7(4) \times 10^{-3} \\
\beta_{\delta E}(11D_{3/2}) &= 5.281\,570\,4(4) \times 10^{-3} \\
\beta_{\delta\psi}(11D_{3/2}) &= 8.594\,887\,6(4) \times 10^{-2} \\
\beta_{\delta H(LS)}(11D_{3/2}) &= -2.587\,263\,3(4) \times 10^{-2} \\
\beta_{\delta H(p^4)}(11D_{3/2}) &= -6.467\,317\,7(4) \times 10^{-2}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(11D_{3/2}) &= 0.025\,280\,93(5) \\
A_{60}(11D_{3/2}) &= 0.008\,681\,09(5).
\end{aligned} \tag{D.4}$$

Niedrigenergie-Anteil für $12D_{3/2}$ -Zustände

$$\begin{aligned}
\beta_{nq}(12D_{3/2}) &= 1.955\,227\,8(9) \times 10^{-2} \\
\beta_{pp^2}(12D_{3/2}) &= 2.432\,462\,5(4) \times 10^{-4} \\
\beta_{r \times \sigma}(12D_{3/2}) &= 9.654\,765\,8(4) \times 10^{-3} \\
\beta_{\delta E}(12D_{3/2}) &= 4.684\,178\,0(4) \times 10^{-3} \\
\beta_{\delta\psi}(12D_{3/2}) &= 8.741\,800\,4(4) \times 10^{-2} \\
\beta_{\delta H(LS)}(12D_{3/2}) &= -2.594\,024\,7(4) \times 10^{-2} \\
\beta_{\delta H(p^4)}(12D_{3/2}) &= -6.543\,125\,6(4) \times 10^{-2}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(12D_{3/2}) &= 0.025\,353\,59(5) \\
A_{60}(12D_{3/2}) &= 0.008\,909\,60(5).
\end{aligned} \tag{D.5}$$

D.1.2 Niedrigenergie-Anteil für $D_{5/2}$ -ZuständeNiedrigenergie-Anteil für $8D_{5/2}$ -Zustände

$$\begin{aligned}\beta_{r \times \sigma}(8D_{5/2}) &= -6.305\,872\,4(4) \times 10^{-3} \\ \beta_{\delta E}(8D_{5/2}) &= 4.734\,798\,5(4) \times 10^{-3} \\ \beta_{\delta \psi}(8D_{5/2}) &= 4.468\,752\,6(4) \times 10^{-2} \\ \beta_{\delta H(LS)}(8D_{5/2}) &= 1.690\,936\,9(4) \times 10^{-2}.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(8D_{5/2}) &= 0.022\,452\,26(5), \\ A_{60}(8D_{5/2}) &= 0.034\,607\,49(5).\end{aligned}\tag{D.6}$$

Niedrigenergie-Anteil für $9D_{5/2}$ -Zustände

$$\begin{aligned}\beta_{r \times \sigma}(9D_{5/2}) &= -6.355\,351\,3(4) \times 10^{-3} \\ \beta_{\delta E}(9D_{5/2}) &= 4.143\,119\,0(4) \times 10^{-3} \\ \beta_{\delta \psi}(9D_{5/2}) &= 4.711\,202\,2(4) \times 10^{-2} \\ \beta_{\delta H(LS)}(9D_{5/2}) &= 1.707\,488\,0(4) \times 10^{-2}.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(9D_{5/2}) &= 0.022\,564\,66(5) \\ A_{60}(9D_{5/2}) &= 0.034\,735\,88(5).\end{aligned}\tag{D.7}$$

Niedrigenergie-Anteil für $10D_{5/2}$ -Zustände

$$\begin{aligned}\beta_{r \times \sigma}(10D_{5/2}) &= -6.390\,648\,9(4) \times 10^{-3} \\ \beta_{\delta E}(10D_{5/2}) &= 3.652\,169\,4(4) \times 10^{-3} \\ \beta_{\delta \psi}(10D_{5/2}) &= 4.893\,638\,4(4) \times 10^{-2} \\ \beta_{\delta H(LS)}(10D_{5/2}) &= 1.718\,006\,0(4) \times 10^{-2}.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(10D_{5/2}) &= 0.022\,669\,65(5) \\ A_{60}(10D_{5/2}) &= 0.034\,832\,71(5).\end{aligned}\tag{D.8}$$

Niedrigenergie-Anteil für $11D_{5/2}$ -Zustände

$$\begin{aligned}\beta_{r \times \sigma}(11D_{5/2}) &= -6.416\,714\,5(4) \times 10^{-3} \\ \beta_{\delta E}(11D_{5/2}) &= 3.243\,069\,6(4) \times 10^{-3} \\ \beta_{\delta \psi}(11D_{5/2}) &= 5.034\,015\,2(4) \times 10^{-2} \\ \beta_{\delta H(LS)}(11D_{5/2}) &= 1.724\,842\,1(4) \times 10^{-2}.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(11D_{5/2}) &= 0.022\,733\,86(5) \\ A_{60}(11D_{5/2}) &= 0.034\,876\,38(5).\end{aligned}\tag{D.9}$$

Niedrigenergie-Anteil für $12D_{5/2}$ -Zustände

$$\begin{aligned}\beta_{r \times \sigma}(12D_{5/2}) &= -6.436\,510\,5(4) \times 10^{-3} \\ \beta_{\delta E}(12D_{5/2}) &= 2.899\,729\,2(4) \times 10^{-3} \\ \beta_{\delta \psi}(12D_{5/2}) &= 5.144\,156\,3(4) \times 10^{-2} \\ \beta_{\delta H(LS)}(12D_{5/2}) &= 1.729\,349\,8(4) \times 10^{-2}.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(12D_{5/2}) &= 0.022\,780\,80(5) \\ A_{60}(12D_{5/2}) &= 0.034\,896\,67(5).\end{aligned}\tag{D.10}$$

D.2 Ergebnisse für Rydberg-Zustände

D.2.1 Niedrigenergie-Anteil für $L = N - 2$, $J = L - \frac{1}{2}$

Niedrigenergie-Anteil für $13V_{21/2}$ -Zustände

$$\begin{aligned}\beta_{nq}(13V_{21/2}) &= 4.690\,968\,4(5) \times 10^{-5} \\ \beta_{pp^2}(13V_{21/2}) &= -2.100\,873\,7(5) \times 10^{-5} \\ \beta_{r \times \sigma}(13V_{21/2}) &= 4.587\,132\,0(5) \times 10^{-7} \\ \beta_{\delta E}(13V_{21/2}) &= 4.275\,658\,5(5) \times 10^{-4} \\ \beta_{\delta \psi}(13V_{21/2}) &= 3.869\,277\,0(5) \times 10^{-4} \\ \beta_{\delta H(LS)}(13V_{21/2}) &= -9.064\,787\,0(5) \times 10^{-5} \\ \beta_{\delta H(p^4)}(13V_{21/2}) &= -7.232\,173\,2(5) \times 10^{-4}.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(13V_{21/2}) &= 2.675\,866(5) \times 10^{-5} \\ A_{60}(13V_{21/2}) &= 0.679\,575(5) \times 10^{-5}.\end{aligned}\tag{D.11}$$

Niedrigenergie-Anteil für $14W_{23/2}$ -Zustände

$$\begin{aligned}\beta_{nq}(14W_{23/2}) &= 3.196\,965\,5(5) \times 10^{-5} \\ \beta_{pp^2}(14W_{23/2}) &= -1.440\,156\,7(5) \times 10^{-5} \\ \beta_{r \times \sigma}(14W_{23/2}) &= 2.737\,986\,7(5) \times 10^{-7} \\ \beta_{\delta E}(14W_{23/2}) &= 3.422\,147\,2(5) \times 10^{-4} \\ \beta_{\delta \psi}(14W_{23/2}) &= 2.865\,772\,9(5) \times 10^{-4} \\ \beta_{\delta H(LS)}(14W_{23/2}) &= -6.584\,383\,0(5) \times 10^{-5} \\ \beta_{\delta H(p^4)}(14W_{23/2}) &= -5.625\,426\,4(5) \times 10^{-4}.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(14W_{23/2}) &= 1.811\,052(5) \times 10^{-5} \\ A_{60}(14W_{23/2}) &= 0.410\,825(5) \times 10^{-5}.\end{aligned}\tag{D.12}$$

Niedrigenergie-Anteil für $15X_{25/2}$ -Zustände

$$\begin{aligned}
\beta_{nq}(15X_{25/2}) &= 2.241\,539\,4(5) \times 10^{-5} \\
\beta_{pp^2}(15X_{25/2}) &= -1.014\,731\,8(5) \times 10^{-5} \\
\beta_{r \times \sigma}(15X_{25/2}) &= 1.702\,061\,8(5) \times 10^{-7} \\
\beta_{\delta E}(15X_{25/2}) &= 2.783\,620\,2(5) \times 10^{-4} \\
\beta_{\delta\psi}(15X_{25/2}) &= 2.169\,684\,1(5) \times 10^{-4} \\
\beta_{\delta H(LS)}(15X_{25/2}) &= -4.900\,586\,9(5) \times 10^{-5} \\
\beta_{\delta H(p^4)}(15X_{25/2}) &= -4.460\,537\,5(5) \times 10^{-4}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(15X_{25/2}) &= 1.262\,399(5) \times 10^{-5} \\
A_{60}(15X_{25/2}) &= 0.252\,108(5) \times 10^{-5}.
\end{aligned} \tag{D.13}$$

Niedrigenergie-Anteil für $16Y_{27/2}$ -Zustände

$$\begin{aligned}
\beta_{nq}(16Y_{27/2}) &= 1.610\,621\,3(5) \times 10^{-5} \\
\beta_{pp^2}(16Y_{27/2}) &= -7.321\,871\,3(5) \times 10^{-6} \\
\beta_{r \times \sigma}(16Y_{27/2}) &= -1.022\,438\,7(5) \times 10^{-7} \\
\beta_{\delta E}(16Y_{27/2}) &= 1.850\,834\,8(5) \times 10^{-4} \\
\beta_{\delta\psi}(16Y_{27/2}) &= 1.399\,759\,1(5) \times 10^{-4} \\
\beta_{\delta H(LS)}(16Y_{27/2}) &= 3.476\,293\,2(5) \times 10^{-5} \\
\beta_{\delta H(p^4)}(16Y_{27/2}) &= -3.596\,006\,3(5) \times 10^{-4}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(16Y_{29/2}) &= 0.895\,491(5) \times 10^{-6} \\
A_{60}(16Y_{27/2}) &= 0.155\,786(5) \times 10^{-6}.
\end{aligned} \tag{D.14}$$

D.2.2 Niedrigenergie-Anteil für $L = N - 2$, $J = L + \frac{1}{2}$ Niedrigenergie-Anteil für $13V_{23/2}$ -Zustände

Genau wie für $13V_{21/2}$ außer

$$\begin{aligned}
\beta_{r \times \sigma}(13V_{23/2}) &= -4.204\,871\,0(5) \times 10^{-7} \\
\beta_{\delta E}(13V_{23/2}) &= 3.300\,508\,3(5) \times 10^{-4} \\
\beta_{\delta\psi}(13V_{23/2}) &= 3.108\,505\,1(5) \times 10^{-4} \\
\beta_{\delta H(LS)}(13V_{23/2}) &= 8.309\,388\,1(5) \times 10^{-5}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(13V_{23/2}) &= 2.646\,861(5) \times 10^{-5} \\
A_{60}(13V_{23/2}) &= 4.318\,998(5) \times 10^{-5}.
\end{aligned} \tag{D.15}$$

Niedrigenergie-Anteil für $14W_{25/2}$ -ZuständeGenau wie für $14W_{23/2}$ außer

$$\begin{aligned}
\beta_{r \times \sigma}(14W_{25/2}) &= -2.527\,372\,3(5) \times 10^{-7} \\
\beta_{\delta E}(14W_{25/2}) &= 2.685\,069\,3(5) \times 10^{-4} \\
\beta_{\delta \psi}(14W_{25/2}) &= 2.337\,513\,0(5) \times 10^{-4} \\
\beta_{\delta H(LS)}(14W_{25/2}) &= 6.077\,892\,0(5) \times 10^{-5}. \\
\mathcal{L}(14W_{25/2}) &= 1.793\,624(5) \times 10^{-5} \\
A_{60}(14W_{25/2}) &= 2.979\,937(5) \times 10^{-5}.
\end{aligned} \tag{D.16}$$

Niedrigenergie-Anteil für $15X_{27/2}$ -ZuständeGenau wie für $15X_{25/2}$ außer

$$\begin{aligned}
\beta_{r \times \sigma}(15X_{27/2}) &= -1.580\,486\,0(5) \times 10^{-7} \\
\beta_{\delta E}(15X_{27/2}) &= 2.215\,534\,5(5) \times 10^{-4} \\
\beta_{\delta \psi}(15X_{27/2}) &= 1.793\,208\,6(5) \times 10^{-4} \\
\beta_{\delta H(LS)}(15X_{27/2}) &= 4.550\,545\,0(5) \times 10^{-5}. \\
\mathcal{L}(15X_{27/2}) &= 1.251\,506(5) \times 10^{-5} \\
A_{60}(15X_{27/2}) &= 2.116\,050(5) \times 10^{-5}.
\end{aligned} \tag{D.17}$$

Niedrigenergie-Anteil für $16Y_{29/2}$ -ZuständeGenau wie für $16Y_{27/2}$ außer

$$\begin{aligned}
\beta_{r \times \sigma}(16Y_{29/2}) &= -1.022\,438\,7(5) \times 10^{-7} \\
\beta_{\delta E}(16Y_{29/2}) &= 1.850\,834\,8(5) \times 10^{-4} \\
\beta_{\delta \psi}(16Y_{29/2}) &= 1.399\,759\,1(5) \times 10^{-4} \\
\beta_{\delta H(LS)}(16Y_{29/2}) &= 3.476\,293\,2(5) \times 10^{-5}. \\
\mathcal{L}(16Y_{29/2}) &= 0.895\,491(5) \times 10^{-5} \\
A_{60}(14X_{27/2}) &= 1.540\,181(5) \times 10^{-5}.
\end{aligned} \tag{D.18}$$

D.2.3 Niedrigenergie-Anteil für $L = N - 1$, $J = L - \frac{1}{2}$ **Niedrigenergie-Anteil für $13W_{23/2}$ -Zustände**

$$\begin{aligned}
\beta_{nq}(13W_{23/2}) &= 3.077\,242\,7(5) \times 10^{-5} \\
\beta_{pp^2}(13W_{23/2}) &= -1.403\,622\,6(5) \times 10^{-5} \\
\beta_{r \times \sigma}(13W_{23/2}) &= 2.493\,803\,6(5) \times 10^{-7} \\
\beta_{\delta E}(13W_{23/2}) &= 3.358\,850\,2(5) \times 10^{-4} \\
\beta_{\delta \psi}(13W_{23/2}) &= 1.038\,951\,6(5) \times 10^{-4} \\
\beta_{\delta H(LS)}(13W_{23/2}) &= -5.417\,512\,3(5) \times 10^{-5} \\
\beta_{\delta H(p^4)}(13W_{23/2}) &= -3.853\,042\,2(5) \times 10^{-4}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(13W_{23/2}) &= 1.716\,173(5) \times 10^{-5} \\
A_{60}(13W_{23/2}) &= 0.469\,973(5) \times 10^{-5}.
\end{aligned}
\tag{D.19}$$

Niedrigenergie-Anteil für $14X_{25/2}$ -Zustände

$$\begin{aligned}
\beta_{nq}(14X_{25/2}) &= 2.160\,873\,7(5) \times 10^{-5} \\
\beta_{pp^2}(14X_{25/2}) &= -9.894\,564\,6(5) \times 10^{-6} \\
\beta_{r \times \sigma}(14X_{25/2}) &= 1.557\,527\,6(5) \times 10^{-7} \\
\beta_{\delta E}(14X_{25/2}) &= 2.727\,373\,7(5) \times 10^{-4} \\
\beta_{\delta \psi}(14X_{25/2}) &= 7.814\,427\,8(5) \times 10^{-5} \\
\beta_{\delta H(LS)}(14X_{25/2}) &= -4.067\,526\,1(5) \times 10^{-5} \\
\beta_{\delta H(p^4)}(14X_{25/2}) &= -3.099\,992\,3(5) \times 10^{-4}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(14X_{25/2}) &= 1.199\,921(5) \times 10^{-5} \\
A_{60}(14X_{25/2}) &= 0.296\,641(5) \times 10^{-6}.
\end{aligned}
\tag{D.20}$$

Niedrigenergie-Anteil für $15Y_{27/2}$ -Zustände

$$\begin{aligned}
\beta_{nq}(15Y_{27/2}) &= 1.554\,889\,8(5) \times 10^{-5} \\
\beta_{pp^2}(15Y_{27/2}) &= -7.143\,357\,2(5) \times 10^{-6} \\
\beta_{r \times \sigma}(15Y_{27/2}) &= 1.006\,719\,5(5) \times 10^{-7} \\
\beta_{\delta E}(15Y_{27/2}) &= 2.246\,944\,5(5) \times 10^{-4} \\
\beta_{\delta \psi}(15Y_{27/2}) &= 5.995\,408\,0(5) \times 10^{-5} \\
\beta_{\delta H(LS)}(15Y_{27/2}) &= -3.116\,444\,7(5) \times 10^{-5} \\
\beta_{\delta H(p^4)}(15Y_{27/2}) &= -2.533\,414\,6(5) \times 10^{-4}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(15Y_{27/2}) &= 0.859\,850(5) \times 10^{-5} \\
A_{60}(15Y_{27/2}) &= 0.189\,309(5) \times 10^{-5}.
\end{aligned}
\tag{D.21}$$

Niedrigenergie-Anteil für $16Z_{29/2}$ -Zustände

$$\begin{aligned}
\beta_{nq}(16Z_{29/2}) &= 1.142\,882\,9(5) \times 10^{-5} \\
\beta_{pp^2}(16Z_{29/2}) &= -5.265\,609\,5(5) \times 10^{-6} \\
\beta_{r \times \sigma}(16Z_{29/2}) &= 6.702\,746\,7(5) \times 10^{-8} \\
\beta_{\delta E}(16Z_{29/2}) &= 1.874\,637\,6(5) \times 10^{-4} \\
\beta_{\delta \psi}(16Z_{29/2}) &= 4.680\,400\,3(5) \times 10^{-5} \\
\beta_{\delta H(LS)}(16Z_{29/2}) &= -2.430\,107\,0(5) \times 10^{-5} \\
\beta_{\delta H(p^4)}(16Z_{29/2}) &= -2.098\,647\,2(5) \times 10^{-4}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(16Z_{29/2}) &= 0.629\,871(5) \times 10^{-5} \\
A_{60}(16Z_{29/2}) &= 0.121\,749(5) \times 10^{-5}.
\end{aligned}
\tag{D.22}$$

D.2.4 Niedrigenergie-Anteil für $L = N - 1$, $J = L + \frac{1}{2}$

Niedrigenergie-Anteil für $13W_{25/2}$ -Zustände

Genau wie für $13W_{23/2}$ außer

$$\begin{aligned}
\beta_{r \times \sigma}(13W_{25/2}) &= -2.301\,972\,5(5) \times 10^{-7} \\
\beta_{\delta E}(13W_{25/2}) &= 2.519\,137\,7(5) \times 10^{-4} \\
\beta_{\delta \psi}(13W_{25/2}) &= 8.376\,427\,1(5) \times 10^{-5} \\
\beta_{\delta H(LS)}(13W_{25/2}) &= 5.000\,780\,5(5) \times 10^{-5}. \\
\mathcal{L}(13W_{25/2}) &= 1.700\,273(5) \times 10^{-5} \\
A_{60}(13W_{25/2}) &= 2.729\,475(5) \times 10^{-5}.
\end{aligned} \tag{D.23}$$

Niedrigenergie-Anteil für $14X_{27/2}$ -Zustände

$$\begin{aligned}
\beta_{r \times \sigma}(14X_{27/2}) &= -1.446\,275\,7(5) \times 10^{-7} \\
\beta_{\delta E}(14X_{27/2}) &= 2.085\,638\,7(5) \times 10^{-4} \\
\beta_{\delta \psi}(14X_{27/2}) &= 6.392\,019\,2(5) \times 10^{-5} \\
\beta_{\delta H(LS)}(14X_{27/2}) &= 3.776\,988\,5(5) \times 10^{-5}. \\
\mathcal{L}(14X_{27/2}) &= 1.189\,658(5) \times 10^{-5} \\
A_{60}(14X_{27/2}) &= 1.945\,279(5) \times 10^{-5}.
\end{aligned} \tag{D.24}$$

Niedrigenergie-Anteil für $15Y_{29/2}$ -Zustände

$$\begin{aligned}
\beta_{r \times \sigma}(15Y_{29/2}) &= -9.396\,048\,4(5) \times 10^{-8} \\
\beta_{\delta E}(15Y_{29/2}) &= 1.747\,623\,5(5) \times 10^{-4} \\
\beta_{\delta \psi}(15Y_{29/2}) &= 4.966\,748\,4(5) \times 10^{-5} \\
\beta_{\delta H(LS)}(15Y_{29/2}) &= 2.908\,681\,7(5) \times 10^{-5}. \\
\mathcal{L}(15Y_{29/2}) &= 0.853\,375(5) \times 10^{-5} \\
A_{60}(15Y_{29/2}) &= 1.420\,631(5) \times 10^{-5}.
\end{aligned} \tag{D.25}$$

Niedrigenergie-Anteil für $16Z_{31/2}$ -Zustände

$$\begin{aligned}
\beta_{r \times \sigma}(16Z_{31/2}) &= -6.283\,825\,0(5) \times 10^{-8} \\
\beta_{\delta E}(16Z_{31/2}) &= 1.479\,977\,1(5) \times 10^{-4} \\
\beta_{\delta \psi}(16Z_{31/2}) &= 3.920\,841\,5(5) \times 10^{-5} \\
\beta_{\delta H(LS)}(16Z_{31/2}) &= 2.278\,225\,3(5) \times 10^{-5}. \\
\mathcal{L}(16Z_{31/2}) &= 0.625\,545(5) \times 10^{-6} \\
A_{60}(16Z_{31/2}) &= 1.059\,674(5) \times 10^{-5}.
\end{aligned} \tag{D.26}$$

Literaturverzeichnis

- [1] John L. Heilbron, *Max Planck*, Hirzel, Stuttgart 2006.
- [2] M. Planck, *Ann. Phys.* **4**, 553 (1901).
- [3] N. Bohr, *Phil. Mag.* **26**, 1-25 (1913).
- [4] A. Sommerfeld, *Atombau und Spekrallinien*, Braunschweig 1919, Harry Deutsch, 1978.
- [5] A.A. Michelson and E.W. Morley, *Phil. Mag.* **24**, 46 (1887).
- [6] E. Schrödinger, *Phys. Rev.* **28**, 1049 (1926).
- [7] P.A.M. Dirac, *Proc. R. Soc.* **A117**, 610-624 (1928).
- [8] W.E. Lamb,Jr. and R.C. Retherford, *Phys. Rev.* **72**, 241 (1947).
- [9] E. A. Uehling, *Phys. Rev.* **48**, 55 (1935).
- [10] S. Triebwasser, E.S. Dayhoff and W.E. Lamb, Jr., *Phys. Rev.* **89**, 98 (1953).
- [11] H. A. Bethe, *Phys. Rev.* **72**, 339 (1947).
- [12] W.E. Lamb,Jr., Nobel Lecture, (1955).
- [13] R. P. Feynman, *Phys. Rev.* **76**, 769 (1949).
- [14] J. B. French, and V. F. Weiskopf, *Phys. Rev.* **75**, 1240 (1949).
- [15] G. W. Erickson, and D. R. Yennie, *Ann. Phys. (N.Y.)* **35**, 271 (1965).
- [16] G. W. Erickson, and D. R. Yennie, *Ann. Phys. (N.Y.)* **35**, 447 (1965).
- [17] K. Pachucki, *Ann. Phys. (N.Y.)* **226**, 1 (1993).
- [18] U. Jentschura and K. Pachucki, *Phys. Rev. A* **54**, 1853 (1996).
- [19] U. D. Jentschura, G. Soff, and P. J. Mohr, *Phys. Rev. A* **56**, 1739 (1997).
- [20] U. D. Jentschura, and K. Pachucki, *J. Phys. A* **35**, 1927 (2002).
- [21] U. D. Jentschura, Theory of the Lamb Shift in Hydrogenlike Systems, e-print hep-ph/0305065, (2003).
- [22] U. D. Jentschura, E.-O. Le Bigot, P. J. Mohr, P. Indelicato, and G. Soff, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 163001 (2003).
- [23] U. D. Jentschura, *Mod. Phys. Lett. A* **20**, 2261 (2005).
- [24] A. Czarnecki, U. D. Jentschura and K. Pachucki, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 180404 (2005).

- [25] U. D. Jentschura, A. Czarnecki and K. Pachucki, Phys. Rev. A **72**, 062102 (2005).
- [26] M. Niering *et al.*, Phys. Rev. Lett. **84**, 5496 (2000).
- [27] B. de Beauvoir, F. Nez, L. Julien, B. Cagnac, F. Biraben, D. Touahri, L. Hilico, O. Acef, A. Clairon, and J. J. Zondy, Phys. Rev. Lett. **78**, 440 (1997).
- [28] C. Schwob, L. Jozefowski, B. de Beauvoir, L. Hilico, F. Nez, L. Julien, F. Biraben, O. Acef, J. J. Zondy, and A. Clairon, Phys. Rev. Lett. **82**, 4960 (1999), [Erratum Phys. Rev. **86**, 4193 (2001)].
- [29] P. J. Mohr, J. Tan, U. D. Jentschura, and B. J. Wundt, Fundamental Constants for Frequency Comb Interrogation of Designer Rydberg Atoms, in preparation for Physical Review Letters (2007)
- [30] G. Gabrielse, D. Hanneke, T. Kinoshita, M. Nio und B. Odom, Phys. Rev. Lett. **99**, 039902 (2007).
- [31] T. Kinoshita and M. Nio, Phys. Rev. D **73**, 013003 (2006).
- [32] D.A. Varshalovich, A.N. Moskalev und V.K. Khersonskii, *Quantum Theory Of Angular Momentum*, World Scientific, Singapore, 1988.
- [33] A.R. Edmonds, *Drehimpulse in der Qunatenmechanik*, Originalausgabe bei Princeton University Press, 1960, deutsche Übersetzung im B.-I. Wissenschaftsverlag, 1964.
- [34] S. Salomonson and P. Öster, Phys. Rev. A **40**, 5559 (1989).
- [35] J. Sapirstein und D. Yennie, “*Theory of Hydrogenic Bound States*”, in *Quantum Electrodynamics*, Herausgeber T. Kinoshita, World Scientific, Singapur, 1990.
- [36] U. D. Jentschura, Internal Report (unpublished), (2007).
- [37] V. B. Beresteckij, E. M. Lifshitz, and L. P. Pitaevskii, *Quantum Electrodynamics*, Pergamon Press, Oxford, UK, 1982.
- [38] J.D. Bjorken and S.D. Drell, *Relativistische Quantenmechanik*, Originalausgabe bei McGraw-Hill 1964, deutsche Übersetzung im B.-I. Wissenschaftsverlag, 1964.
- [39] A. Wachter und H. Hoerber, *Repetitorium Theoretische Physik*, Springer-Verlag; Berlin, 2. Auflage 2005.
- [40] U. D. Jentschura, Private Communication, Sept. 2007
- [41] S. Wolfram, *Mathematica: A System for Doing Mathematics by Computer* (Addison-Wesley, Reading, MA, 1988).
- [42] M.E. Peskin and D.V. Schroeder, *An Introduction to Quantum Field Theory*, Westview Press, 1995.
- [43] V. M. Shabaev, J. Phys. B **24**, 4479 (1991).
- [44] W. Greiner, *Theoretische Physik–Band 7: Quantenelektrodynamik*, Verlag Harry Deutsch, Thun; Frankfurt am Main, 2. Auflage 1995.
- [45] B. J. Wundt, and U. D. Jentschura, Reparameterization invariance of NRQED self-energy corrections and improved theory for excited D states in hydrogenlike systems, e-print hep-ph/0710.1864 (2007).

Danksagung

Dieses Kapitel bietet die angenehme Möglichkeit, sich einmal bei all denjenigen zu bedanken, die in der einen oder anderen Form zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Zu allererst möchte ich mich bei Herrn Dr. Jentschura bedanken, der mich sehr gut betreut hat und mir bei Fragen mit seinem umfangreichen Wissen stets eine große Hilfe war. Besonders möchte ich mich auch für die Forschungsreise nach Warschau bedanken, die eine sehr interessante Erfahrung war, bei der ich viel gelernt habe.

Dann danke ich Herrn Prof. Hebecker für die Übernahme des Zweitgutachtens.

Außerdem wollte ich mich bei den Leuten bedanken, die mir beim Erstellen dieser Arbeit geholfen haben: Tina für das Korrekturlesen und die Hilfe bei den Graphiken, Mario für das Korrekturlesen und die Tipps für Formulierungen, Michael für das Korrekturlesen, Asja für das Korrekturlesen und die Hilfe mit der neuen deutschen Rechtschreibung und Stefan für die Hilfe beim \LaTeX -Layout.

Andrey und Martin danke ich für ihre Hilfe bei der Einarbeitung in das Thema.

Dann will ich mich bei den gesamten Kollegen bedanken, die die Zeit hier so angenehm gestaltet haben.

Meinen Freunden Michal, Holger, Sebastian, Florian, Emanuel, Olli, Adi, Hagen, Philipp, Michael und allen, die ich vergessen habe, danke ich für die vielen lustigen Abende, die eine schöne Abwechslung zur Arbeit darstellten, und für die vielseitige Unterstützung während des Studiums.

Meinen Eltern und meiner Schwester danke für alles und noch viel mehr.

Erklärung:

Ich versichere, dass ich diese Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

Heidelberg, den

.....

Unterschrift