

**Zeitschrift:** Helvetica Physica Acta

**Band:** 25 (1952)

**Heft:** V

**Artikel:** Allgemeine Theorie der Dämpfungsphänomene für nichtstationäre Prozesse. II., Abseparierung der virtuellen Zustände : Korrekturen zweiter Ordnung

**Autor:** Arnous, E. / Bleuler, K.

**DOI:** <https://doi.org/10.5169/seals-112325>

### **Nutzungsbedingungen**

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. [Siehe Rechtliche Hinweise.](#)

### **Conditions d'utilisation**

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. [Voir Informations légales.](#)

### **Terms of use**

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. [See Legal notice.](#)

**Download PDF:** 29.03.2025

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

# Allgemeine Theorie der Dämpfungsphänomene für nichtstationäre Prozesse.

## II. Abseparierung der virtuellen Zustände. Korrekturen zweiter Ordnung

von E. Arnous\*) und K. Bleuler

(Seminar für theoretische Physik, Universität Zürich).

(15. V. 52).

---

*Abstract.* In continuation of a previous paper (I) the radiative corrections to the form and breadth of an emission line are treated. General expressions for these corrections are obtained with the help of a canonical transformation which eliminates the virtual processes. This makes essentially use of a "finite energy shell" the extension of which is interpreted as the extension of the exciting spectrum. Some of the corrections depend explicitly on the excitation conditions. It is proved that, to a very great accuracy, the displacement of the line maximum is given by the level shifts ( $\sim$  self energies) as usually calculated (independent of the excitation conditions). The corrections to the classical line shape are worked out explicitly, as far as the  $e^2$ -effects are concerned (§ 5). The  $e^4$ -corrections are worked out in the subsequent paper III.

### Einleitung.

In einer kürzlich erschienenen Arbeit des gleichen Titels<sup>1)</sup> (im folgenden als I zitiert) wurde eine allgemeine Lösungstheorie der quantenelektrodynamischen Wellengleichung für gebundene Zustände entwickelt, die geeignet ist, das Problem der Linienform- und Breite der Spektrallinien einer exakten Lösung im Sinne der Quantenelektrodynamik entgegenzuführen. Die Hauptresultate sind in § 1 zusammengestellt. Es wurde gezeigt, dass die Wellengleichung (1) mit vorgegebener, bei einer *endlichen* Zeit liegenden Anfangsbedingung exakt gelöst werden kann und auf eine Integralgleichung für die physikalisch interessierenden Grössen  $U$  und  $\Gamma$  führt. Diese Theorie ist lediglich mit der Lösung von (1) beschäftigt und macht in keiner Weise davon Gebrauch, was die „ungestörte Hamilton-Funktion  $H_0''$  und die „Wechselwirkung  $H$ “ ist. Statt das übliche ungestörte  $H_0$ , das Elektronen und Photonen ohne Wechselwirkung beschreibt und  $H$  in (1) einzusetzen, kann man

---

\*) Chargé de Recherches au Centre National de la Recherche scientifique, Paris.

ebensogut eine transformierte Hamilton-Funktion  $K_0$ ,  $K$  in den allgemeinen Rahmen der Theorie I einsetzen, wobei z. B.  $K_0 + K$  aus  $H_0 + H$  durch eine kanonische Transformation hervorgeht. Dies wird im folgenden tatsächlich geschehen.

Das Ziel der vorliegenden Arbeit und der folgenden Arbeit III ist, die höheren strahlungstheoretischen Näherungen zur Linienform zu bestimmen. Es wird sich erweisen, dass diese sehr klein und mit der gegenwärtigen Genauigkeit der Messungen kaum erfassbar sind<sup>2</sup>). Dagegen hat das Problem theoretisches Interesse: Die grossen Fortschritte, die in den letzten Jahren in der Handhabung und Auswertung der Quanten-Elektrodynamik erzielt wurden, liegen fast ausschliesslich auf dem Gebiet der Stösse zwischen freien Partikeln und Lichtquanten. Die einzige Ausnahme ist die Berechnung der Niveauverschiebung gebundener Zustände. Um Eindeutigkeit in den Resultaten zu erreichen, ist es bekanntlich notwendig, explizit Gebrauch von der relativistischen Covarianz des Resultates Gebrauch zu machen. Eine covariante Formulierung der Quantenelektrodynamik für gebundene Zustände ist aber allgemein nur möglich (wie wir unten sehen werden), wenn man expliziten Gebrauch von der Lorentzbedingung (mit Ladungsglied!) macht, was sehr kompliziert ist. Die Frage der eindeutigen Berechenbarkeit solcher Grössen wie der Linienbreite (in höherer Näherung) ist also keineswegs von vornherein ganz trivial. Die Situation wird weiter dadurch verschärft, dass man erstens auch verlangen muss, Rechenschaft über den *zeitlichen* Ablauf des Emissionsvorgangs zu erhalten (denn dieser ist durchaus messbar), und zweitens dadurch, dass die höheren Näherungen zur Linienform explizit von den Anregungsbedingungen abhängen (wie wir sehen werden). Beides kann kaum in covarianter Weise formuliert werden. Wir werden daher im folgenden mit der Coulombbeziehung operieren, d. h. mit derjenigen Version der Theorie, in der die longitudinalen und skalaren Photonen eliminiert und durch die Coulomb-Wechselwirkung ersetzt sind.

Bevor wir den Formalismus I zur Berechnung der höheren Näherungen verwenden können, muss erst noch das folgende, prinzipielle Problem gelöst werden: Wie bekannt, stellt ein freies, ungestörtes Elektron keinen stationären Zustand im Sinne der Quantenelektrodynamik dar. Das Teilchen ist stets von virtuellen Zuständen begleitet (mit Photonen und Paaren), die ein Ausdruck für das das Teilchen begleitende Nahfeld sind. Der wahre Zustand des Teilchens geht aus dem ungestörten durch die Bloch-Nordsieck-Transformation hervor. Bei Anwesenheit mehrerer Teilchen ist ein

solcher transformierter Zustand immer noch stationär, solange nur *endliche* Zeitintervalle betrachtet werden. Die zeitliche Änderung des Zustandsvektors ist dann nur durch die tatsächlich stattfindenden Stossprozesse bedingt, die (im Grenzfall unendlich grossen Volumens) eine unendlich lange Zeit brauchen. Die wahren Übergänge können streng von den virtuellen separiert werden. Dies geschieht am besten im Energieraum, wo die wahren Übergänge unter strenger Erhaltung der Energie (in der man die Selbstenergie, d. h. die Massenkorrektur, einschliessen soll) statt, während virtuelle Zustände solche mit verschiedener Energie sind. Die „Energieschale“, auf der allein die wahren Übergänge stattfinden, kann unendlich dünn angenommen werden.

Dies ist bei gebundenen Zuständen anders. Die Lebensdauer eines angeregten Atomzustands ist endlich. Es kann folglich keine Transformation geben, die einen angeregten Atomzustand streng stationär macht. Im Energieraum drückt sich das dadurch aus, dass eine endliche Linienbreite existiert. Übergänge finden nur mit näherungsweise Energieerhaltung statt, im Prinzip auch zwischen Zuständen mit stark verschiedener Energie. Eine eindeutige Unterscheidung zwischen virtuellen Zuständen und Zustände, in die wahre Übergänge stattfinden können, lässt sich also nicht durchführen. Eine Ausnahme bildet nur der Grundzustand, der scharf ist, und also im Sinne der Quantenelektrodynamik streng definiert werden kann. Die Mehrdeutigkeit in der Definition eines angeregten Atomzustands muss offenbar darauf zurückzuführen sein, dass dieser Zustand in Wirklichkeit von den *Anregungsbedingungen* abhängt. Schon in erster Näherung hängt ja die Linienform von der Anregung ab. Wenn man von der natürlichen Linienform spricht (d. h. der klassischen Linienform, die auch in der Näherung der Weisskopf-Wignerschen-Theorie erhalten wurde), so ist damit Anregung durch ein kontinuierliches Spektrum gemeint. Wenn sich dieses etwa über ein Frequenzintervall  $k_1 \dots k_2$ , wobei  $k_2 - k_1$  gross gegen die Linienbreite ist, erstreckt, so ist die natürliche Linie jedenfalls an den Stellen  $k_1$  und  $k_2$  abgeschnitten. Ein anregendes Spektrum, das sich ins Unendliche erstreckt, kann natürlich nicht existieren. Es ist deshalb auch durchaus zu erwarten, dass die virtuellen Zustände, die dem angeregten Atomzustand beigemischt sind, bis zu einem gewissen Grade von der Art der Anregung abhängen werden. Eine vollständige Lösung des Problems der Linienbreite erfordert also eine Behandlung der Lichtemission im Zusammenhang mit der Anregung, also des ganzen Prozesses der Resonanzfluoreszenz. Dieses kompliziertere Programm ist hier noch



nicht durchgeführt. Man kann nämlich, statt die Anregung explizit zu berücksichtigen, einen „angeregten Atomzustand“ durch eine verallgemeinerte Bloch-Nordsieck-Transformation definieren und dabei eine gewisse, die verschiedenen Anregungsbedingungen wiederpiegelnde Willkür walten lassen. Wir werden die folgende Methode verwenden:

Wir ordnen jedem angeregten Atomzustand, der die Niveaubreite  $\gamma$  haben möge, eine *endliche Energieschale* der Dicke  $2\epsilon$  zu, wobei wir  $\epsilon \gg \gamma$ , aber klein gegen die Niveauabstände wählen. Zustände ausserhalb dieser Energieschale sind virtuelle Zustände, die durch die kanonische Transformation wegtransformiert werden, so dass neue Atomzustände entstehen. Diese sind dann stationär gemacht, soweit es möglich ist: Wahre Übergänge finden nur noch auf der Energieschale statt. Diese umfassen den grössten Teil der natürlichen Linie. Letztere ist nur an den Grenzen  $\pm \epsilon$  zu beiden Seiten des Maximums abgeschnitten. Die willkürliche Grösse  $\epsilon$  kann also als Mass für die Ausdehnung des anregenden Spektrums betrachtet werden. Es wird sich zeigen, dass ein Teil der Korrekturen zur Linienform- und Breite von  $\epsilon$  unabhängig sind. Die von  $\epsilon$  abhängigen Korrekturen verschwinden im Grenzfall  $\epsilon \rightarrow \infty$ , und man darf diesen Fall wohl als idealisierten Grenzfall wirklich kontinuierlicher Anregung betrachten.

Vom Standpunkt der Quanten-Elektrodynamik wird sich zeigen, dass, trotz der oben erwähnten Schwierigkeiten einer covarianten Formulierung, alle Korrekturen *eindeutig* und *endlich* sind, wenn man von der üblichen Massen- und Ladungs-Renormalisation Gebrauch macht.

### § 1. Die wichtigsten Resultate der Arbeit I.

Die Arbeit I kann kurz folgendermassen zusammengefasst werden: Es handelt sich um eine Lösungstheorie der Schrödinger-Gleichung in Wechselwirkungsdarstellung:

$$i \frac{\partial S(t)}{\partial t} = K(t) S(t), \quad K(t) = e^{itK_0} K e^{-itK_0} \quad (1)$$

mit der Anfangsbedingung, gültig zu einer Anfangszeit  $t_0$ ,

$$S(t_0) = 1 \quad (2)$$

Hierbei ist  $K_0$  eine „ungestörte Energie“,  $K$  eine „Wechselwirkung“. In der Lösung von (1) und (2) spielen die speziellen Eigenschaften von  $K_0$  und  $K$  vorderhand keine Rolle. Tatsächlich wird in (1) eine transformierte Hamilton-Funktion eingesetzt werden.

In der Lösung von (1), (2) kommt die singuläre Funktion

$$\begin{aligned} \xi(E - K_0) &= -i \int_0^\infty dt e^{it(E - K_0)} = \frac{P}{E - K_0} - i\pi \delta(E - K_0) = \\ &= -2\pi i \delta_+(E - K_0) \end{aligned} \tag{3}$$

vor.  $P$  bezeichnet den Hauptwert. Die exakte Lösung von (1), mit der Anfangsbedingung (2), ist

$$\begin{aligned} S(t, t_0) &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-it(E - K_0)} (1 + \xi(E - K_0) U(E) \times \\ &\times (E - K_0 + \frac{i}{2} \Gamma(E))^{-1} e^{it_0(E - K_0)} \end{aligned} \tag{4}$$

Hier und im folgenden ist das Vorkommen des Operators  $K_0$  im Argument von  $\xi$ ,  $\delta$  usw. so zu verstehen, dass in einer Darstellung, wo  $K_0$  diagonal ist, derjenige Eigenwert von  $K_0$  einzusetzen ist, der der Position des Faktors  $\xi$  entspricht

$$(\xi(E - K_0) U)_{nm} = \xi(E - E_n) U_{nm} \text{ etc.}$$

$U$  ist (in der Darstellung  $K_0$  diagonal) ein Operator mit nur nicht diagonalen Elementen,  $\Gamma$  ist rein diagonal.  $U$  befriedigt die Integralgleichung

$$U(E) = K_{nd} + (K \xi U)_{nd}, \quad \xi \equiv \xi(E - K_0) \tag{5}$$

und  $\Gamma$  ist bestimmt durch

$$\frac{1}{2i} \Gamma(E) = K_d + (K \xi U)_d \tag{6}$$

( $nd$  = nicht diagonal,  $d$  = diagonal)

(4) kann als geeignete Zusammenfassung gewisser Terme in der üblichen Entwicklung von  $S$

$$S(t, t_0) = 1 - i \int_{t_0}^t K(t') dt' + (-i)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' K(t') K(t'') + \dots$$

aufgefasst werden, doch ist diese Entwicklung für Probleme mit endlicher Linienbreite ungeeignet.

Wenn  $t \rightarrow \infty$ , was der am meisten interessierende Fall ist, vereinfacht sich (4) mit Hilfe von

$$\frac{i}{2\pi} \lim_{t \rightarrow \infty} e^{-itx} \xi(x) = \delta(x)$$

Das Matrixelement von  $S$  für den Anfangszustand  $0$ , Endzustand  $A$ , wird

$$\langle A | S(\infty, t_0) | 0 \rangle = \frac{\langle A | U(E_A) | 0 \rangle}{E_A - E_0 + \frac{i}{2} \Gamma_{0/0}(E_A)} \quad (7)$$

Damit wird die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Endzustände  $A$

$$w_{A0} = |\langle A | S(\infty, t_0) | 0 \rangle|^2 = \frac{|\langle A | U(E_A) | 0 \rangle|^2}{\left[ E_A - E_0 - \frac{1}{2} \text{Im} \Gamma_{0/0}(E_A) \right]^2 + \frac{1}{4} [\text{Re} \Gamma_{0/0}(E_A)]^2} \quad (8)$$

Es sei z. B.  $0$  der erste angeregte Atomzustand,  $A$  der Grundzustand plus emittierten Lichtquant. Da die Zustände  $A$  zum kontinuierlichen Spektrum gehören, so sieht man, dass selbst nach völligem Ablauf des Emissionsvorgangs ( $t \rightarrow \infty$ )  $U$  und  $\Gamma$  an jeder Stelle  $E$  gebraucht werden. Die Näherungslösung von WEISSKOPF-WIGNER erhält man, indem man (a)  $U$  durch die erste Näherung, d. h.  $K$  (in diesem Fall wird  $K = H$ ) ersetzt, ebenso  $\Gamma$ ; und (b)  $\Gamma$  durch den Wert an der Stelle  $E_A = E_0$  (exakte Energieerhaltung) ersetzt. In einer exakten Theorie der Linienform treten also zwei Typen von Korrekturen auf: (a) die eigentlichen strahlungstheoretischen Korrekturen, die auf den höheren Näherungen in der Entwicklung nach  $e^2$  von  $U$  und  $\Gamma$  beruhen, und (b) Korrekturen, die darauf beruhen, dass  $U$ ,  $\Gamma$  von  $E$  oder  $E_A$ , d. h. der Energie des emittierten Lichtquants, abhängen. Die letzteren haben kein Analogon in der Theorie freier Partikel, wo  $E_A = E_0$  (exakt). Es sei betont, dass auch der zeitliche Ablauf nach (4) völlig erfasst ist, wenn  $U$ ,  $\Gamma$  an jeder Stelle  $E$  bekannt sind. Zwischen  $U$  und  $\Gamma$  besteht noch die Beziehung

$$\frac{1}{2\pi} \text{Re} \Gamma(E) = (U^\dagger(E) \delta(E - K_0) U(E))_a \quad (9)$$

Alle Beziehungen (1)–(9) sind *exakt*. Wenn  $E = E_0$ , so ist die rechte Seite von (9) die totale Übergangswahrscheinlichkeit, doch hat dieser Begriff keine exakte Gültigkeit.

Im allgemeinen ist es nicht im Sinne dieser Theorie,  $U$  aus (5) durch Entwicklung zu berechnen. Für Probleme in denen zwei oder mehr Quantensprünge vorkommen, hängt  $U$  empfindlich von  $E$  ab und hat selbst einen oder mehrere Resonanznenner vom gleichen Typ, wie er schon in (1) in jedem Fall auftritt<sup>3</sup>). Wir werden uns aber im folgenden auf den einfachen Fall eines *einzelnen* Übergangs vom ersten angeregten Zustand in den Grundzustand

beschränken. In erster Näherung sind dann  $U$  und  $\Gamma$  sehr langsam veränderliche Funktionen von  $E$ . Auch in höherer Näherung treten, wie sich im Verlauf dieser Arbeit ergeben wird, keinerlei neue Resonanzen auf.  $U$  kann dann ohne Gefahr aus (5) entwickelt werden:

$$U = K_{nd} + (K \xi K_{nd})_{nd} + (K \xi (K \xi K_{nd})_{nd})_{nd} + \dots \quad (10)$$

$$\frac{1}{2i} \Gamma = \{K + K \xi K_{nd} + K \xi (K \xi K_{nd})_{nd} + \dots\}_d \quad (10')$$

## § 2. Wahl der Wechselwirkung, Elimination der virtuellen Zustände.

Die quantenelektrodynamische Hamilton-Funktion besteht aus der ungestörten Energie  $H_0$  und der Wechselwirkung  $H$ . Für Stöße freier Partikel kann  $H$  in covarianter Form geschrieben werden, so dass alle vier Typen von Photonen in symmetrischer Weise vorkommen. Die Lorentz-Bedingung kann dann ignoriert werden, vorausgesetzt, dass nur Übergänge zwischen Zuständen ohne longitudinale und skalare Photonen berechnet werden<sup>4)</sup>. Wir werden unten explizit sehen, dass dieses Verfahren für gebundene Zustände *im allgemeinen* falsch ist. Der Grund ist der, dass die Lorentz-Bedingung (mit Ladungsglied!) explizit berücksichtigt werden muss. Wir werden deshalb mit der „Coulombbeichung“ der Potentiale operieren. Die Wechselwirkung ist dann  $H^{tr} + H_c$ , wo  $H^{tr}$  die Wechselwirkung mit dem transversalen Feld,  $H_c$  die Coulombwechselwirkung darstellt. Wie wir ferner sehen werden (siehe unten und die folgende Arbeit III), gibt es einen Spezialfall, wo auch bei gebundenen Zuständen die gesamte Wechselwirkung  $H^{tr} + H_c$  in 4-dimensionaler Weise zusammengefasst werden kann, wie wenn die Lorentz-Bedingung ohne Belang wäre (abgesehen von einem endlichen, von  $\varepsilon$  abhängigen Zusatz; siehe III). Dies ist der Fall für  $E = E_0$ , aber an keiner anderen Stelle  $E \neq E_0$ . Derselbe Fall trat schon bei der Berechnung der Linienverschiebung durch FRENCH und WEISSKOPF<sup>5)</sup> ein. Der tiefere Grund, warum das gerade für  $E = E_0$  der Fall ist, ist uns aber unbekannt.

Wir wollen auch von Anfang an schon die Massenkorrektur in die Wechselwirkung einbeziehen. Es sei  $H_s$  der Massenoperator, so dass  $H_0 + H_s$  formal dieselben Eigenzustände (auch für gebundene Partikel) hat wie  $H_0$ , nur mit der korrigierten, also experimentellen Masse. Wir werden in Zukunft wieder  $H_0$  für  $H_0 + H_s$  schreiben. Die Wechselwirkung enthält dann ein Zusatzglied  $-H_s$ , d. h.

$$H = H^{tr} + H_c - H_s \quad (11)$$

$H_s$  wurde explizit von FRENCH und WEISSKOPF bestimmt und kann in 4-dimensionaler Weise (in symmetrisierter Form) geschrieben werden.

$$\left. \begin{aligned}
 H_s &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} [\bar{\psi}(\mathbf{r}) M(\mathbf{p}) \psi(\mathbf{r})], \quad \bar{\psi} = \psi^* \gamma_4 \\
 M(\mathbf{p}) &= \frac{e^2}{32\pi^3} \int \frac{d\mathbf{k}}{k} \gamma_4 (\Lambda(\mathbf{p}, \mathbf{k}) + \Lambda^+(\mathbf{p}, \mathbf{k})) \\
 \Lambda(\mathbf{p}, \mathbf{k}) &= \sum_{\mu=1}^4 \{ \alpha_{\mu} H^+(\mathbf{p}-\mathbf{k}) \alpha_{\mu} ((\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p}) + \beta m - E(\mathbf{p}-\mathbf{k}) - k)^{-1} + \\
 &\quad + \alpha_{\mu} H^-(\mathbf{p}-\mathbf{k}) \alpha_{\mu} ((\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p}) + \beta m + E(\mathbf{p}-\mathbf{k}) + k)^{-1} \} \\
 \alpha_{\mu} &= i \gamma_4 \gamma_{\mu}, \quad \mathbf{p} = -i \text{grad}, \quad E(\mathbf{p}) = (p^2 + m^2)^{\frac{1}{2}}, \quad \beta \equiv \gamma_4 \\
 H^{\pm}(\mathbf{p}) &= \frac{1}{2} \left( 1 \pm \frac{(\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p}) + \beta m}{E(\mathbf{p})} \right)
 \end{aligned} \right\} (12)$$

Wenn  $H_s$  auf die Eigenfunktion eines freien Partikels  $\psi_p$  mit Impuls  $\mathbf{p}$  wirkt, so reduziert sich (12) auf den bekannten Operator der Selbstenergie und liefert nach der Integration:

$$H_s \psi_p = \delta m \beta \psi_p$$

wo  $\delta m$  die invariante (divergente) Massenkorrektur bedeutet. Dasselbe ist der Fall, wenn  $H_s$  auf eine gebundene Eigenfunktion  $\psi_0$  wirkt

$$H_s \psi_0 = \delta m \beta \psi_0 \quad (13)$$

wie man sofort sieht, wenn man  $\psi_0$  nach freien Eigenfunktionen  $\psi_p$  entwickelt. In (13) hat  $\delta m$  denselben Wert wie für freie Partikel. Dies muss natürlich verlangt werden, wenn  $H_s$  eine universelle Massenkorrektur beschreiben soll.

Eine entsprechende Ladungskorrektur muss auch noch vollzogen werden, um Konvergenz zu erzielen, doch ist es einfacher, diese in einem späteren Stadium (siehe III) vorzunehmen.

Bevor wir den Formalismus von § 1 zur Berechnung der höheren Näherungen von  $\Gamma$  benutzen können, ist es notwendig, die Atomzustände neu zu definieren: In höherer Näherung ist ein Atomzustand von virtuellen Photonen usw. begleitet. Wenn wir Übergänge zwischen verschiedenen Atomzuständen betrachten, so handelt es sich sicher um Übergänge zwischen Zuständen mit Einschluss dieser virtuellen Beimischungen. Die neudefinierten Atomzustände  $\psi'$  entstehen aus den alten, ungestörten Zuständen durch eine kanonische Transformation:  $\psi = T\psi'$ . Dann transformiert sich die Hamilton-Funktion

$$K_0 + K = T^{-1} (H_0 + H^{tr} + H_c - H_s) T \quad (14)$$



Wäre die Lebensdauer der Atomzustände unendlich, die Niveaubreite also null, so wären  $T$  und  $K$  dadurch bestimmt, dass  $K$  (in der Darstellung, wo  $K_0$  diagonal ist) nur Matrixelemente zwischen zwei Zuständen exakt gleicher Energie haben soll. Zwischen solchen finden dann die realen, unendlich langsam verlaufenden Übergänge statt<sup>6</sup>).

Im Sinne des in der Einleitung Gesagten verallgemeinern wir nun die kanonische Transformation  $T$  für endliche Niveaubreite in folgender Weise, indem wir explizit Gebrauch von der Kleinheit der Linienbreite machen: Wir ordnen zunächst jedem Atomzustand 0 (in Abwesenheit von Lichtquanten) eine „Energieschale“ der endlichen Dicke  $\varepsilon(0)$  zu. Dabei soll  $\varepsilon(0) \gg \gamma$ , aber klein gegen die Niveauabstände sein. Jeder andere Zustand  $n$  (z. B. Atom im Grundzustand plus emittiertes Lichtquant) liegt dann entweder innerhalb oder ausserhalb der Energieschale  $\varepsilon(0)$  von 0. Es ist keineswegs angenommen, dass alle diese Energieschalen gleich sind. Im Gegenteil, um den Grundzustand  $G$  wirklich stationär zu machen, wollen wir speziell festsetzen, dass für diesen Fall  $\varepsilon$  verschwinden soll,  $\varepsilon(G) = 0$ . Für alle andern Paare von Zuständen  $n, m$  ist es nur nötig, festzusetzen, dass diese sich entweder auf oder ausserhalb einer Energieschale befinden. Insbesondere sollen die beiden Zustände auf der Energieschale liegen, wenn  $E_n = E_m$ . Auf diese Weise sind alle Paare von Zuständen in zwei Klassen eingeteilt. Zustandspaare auf und Zustandspaare ausserhalb einer Energieschale<sup>7</sup>). Es wird sich erweisen, dass die Grösse dieser Energieschalen vollständig aus den physikalisch interessierenden Grössen herausfällt, mit Ausnahme der beiden Energieschalen  $\varepsilon(0)$  und  $\varepsilon(G)$ , für die Zustände 0 und  $G$ , zwischen denen der betrachtete Übergang liegt. Dies ist zu erwarten, denn ein physikalischer Effekt kann nicht davon abhängen, wie man zuerst eine Hamilton-Funktion transformiert, wohl aber hängt der Übergang  $0 \rightarrow G$  davon ab, wie die Zustände 0 und  $G$  definiert sind, und dies hängt von  $\varepsilon(0)$  und  $\varepsilon(G)$  ab.

Ein beliebiger Operator  $Q$  kann dann in zwei Teile  $\underline{Q}$  und  $\overline{Q}$  zerlegt werden, wobei (in der Darstellung, wo  $K_0$  diagonal ist)  $\underline{Q}$  und  $\overline{Q}$  nur Matrixelemente haben sollen für je zwei Zustände, die auf, bzw. ausserhalb ihrer Energieschale liegen.

$$Q = \underline{Q} + \overline{Q}$$

Wir verlangen nun von der Transformation (14), dass  $K$  nur Elemente auf der Energieschale haben soll:  $K = \underline{K}$ ,  $\overline{K} = 0$ . Auf diese Weise werden wir erreichen, dass ein angeregter Atomzustand



*relativ* stabil wird und seine zeitliche Änderung nur durch die realen Übergänge bedingt wird. Diese können nur auf der Energieschale stattfinden; die Linie ist also zu beiden Seiten an den Stellen  $\pm \varepsilon$  abgeschnitten. Die Willkür, die in der Wahl von  $\varepsilon$  liegt, ist offenbar der Ausdruck für die Tatsache, dass der angeregte Atomzustand von der Anregung abhängt.

Wir entwickeln  $T$  nach Potenzen von  $e$

$$T = 1 + T_1 + T_2 + \dots, \quad T^{-1} = 1 - T_1 - T_2 + T_1^2 + \dots \quad (15)$$

$$T_1 + T_1^\dagger = 0, \quad T_2 + T_2^\dagger = T_1^2 \quad (15')$$

und beachten, dass  $H^{tr}$  von erster,  $H_c$  und  $H_s$  von zweiter Ordnung sind. Ebenso  $K = K_1 + K_2 + K_3 + \dots$ . Wir erhalten bis zur dritten Ordnung:

$$\left. \begin{aligned} K_0 &= H_0 \\ K_1 &= H^{tr} + [H_0 T_1] \\ K_2 &= H^{tr} T_1 - T_1 K_1 + [H_0 T_2] + H_c - H_s \\ K_3 &= H^{tr} T_2 - T_1 K_2 - T_2 K_1 + (H_c - H_s) T_1 + [H_0 T_3] \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

Wir spalten dann jede dieser Gleichungen in die  $--$  und  $\sim$ -Bestandteile auf. Für die letzteren verschwindet die linke Seite. Da  $[H_0 T_i] = [H_0 \underline{T}_i]$ , so erhalten wir zunächst sukzessive Bestimmungsgleichungen für  $\underline{T}_i$  in jeder Ordnung. Diese sind von der Form

$$[H_0 \underline{T}_i] = -\underline{Q} \quad (17)$$

Diese Gleichung kann am besten in Form eines Integrals gelöst werden. Da  $[\underline{T}_i H_0] = -[\underline{T}_i, E - H_0]$  und  $(E - H_0) \frac{P}{E - H_0} = 1$ ,  $(E - H_0) \delta(E - H_0) = 0$ , so ist die Lösung von (17)

$$\underline{T}_i = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{P}{E - H_0} \underline{Q} \delta(E - H_0) = - \int_{-\infty}^{+\infty} dE \delta(E - H_0) \underline{Q} \frac{P}{E - H_0} \quad (18)$$

In Energiedarstellung ist die Integration sofort auszuführen, und man erhält die gewöhnlichen Formeln der elementaren Störungstheorie.

Die Teile von (16), die auf der Energieschale liegen, bestimmen  $\underline{K}$  sukzessive. Unbestimmt bleibt zunächst noch  $\underline{T}_i$ . Wir können über  $\underline{T}_i$  verfügen, vorausgesetzt, dass die Unitaritätsbedingungen (15') erfüllt sind. Wir setzen also einfach

$$\underline{T}_1 = 0, \quad \underline{T}_2 = \underline{T}_2^\dagger = \frac{1}{2} (\underline{T}_1)^2 \quad (19)$$

Damit ist auch  $\underline{T}$  bestimmt und folglich  $K$ . Zu beachten ist, dass  $[H_0 \underline{T}_2] \neq 0$ , wenn die Energieschale endlich ist. Dagegen werden wir  $K_3$  nur für solche Zustandspaare brauchen, die *genau* die gleiche Energie haben. Dann ist  $[H_0 \underline{T}_3] = 0$ . Für die Doppelintegrale, die bei der Bestimmung von  $\underline{T}_2$  erstmalig auftreten, sei noch bemerkt, dass

$$\begin{aligned} \int \int dE dE' \delta(E - H_0) \delta(E' - H_0) Q(E, E') &= \\ &= \int dE \delta(E - H_0) Q(E, E) \end{aligned} \quad (20)$$

Man erhält ohne Schwierigkeit:

$$\left. \begin{aligned} \underline{T}_1 &= \int P \underline{H}^{tr} \delta \quad \left( P \equiv \frac{P}{E - H_0}, \quad \delta \equiv \delta(E - H_0) \right) \\ \underline{T}_2 &= \int P (\underline{H}_c - \underline{H}_s) \delta + \int P \underline{H}^{tr} P \underline{H}^{tr} \delta - \int \delta \underline{H}^{tr} P \underline{H}^{tr} P \\ \underline{T}_2 &= -\frac{1}{2} \int P \underline{H}^{tr} \delta \underline{H}^{tr} P \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

Man verifiziert leicht, dass  $\underline{T}_2 + \underline{T}_2^\dagger = (\underline{T}_1)^2$ , wie es sein muss. Ferner:

$$\left. \begin{aligned} K_0 &= H_0, \quad K_1 = \underline{H}^{tr} \\ K_2 &= \underline{H}_c - \underline{H}_s + [H_0 \underline{T}_2] + \int \underline{H}^{tr} P \underline{H}^{tr} \delta - \int P \underline{H}^{tr} \delta \underline{H}^{tr} \\ K_3 &= \int H^{tr} P (\underline{H}_c - \underline{H}_s + \underline{H}^{tr} P \underline{H}^{tr}) \delta + \\ &+ \int \delta (\underline{H}^{tr} P \underline{H}^{tr} + \underline{H}_c - \underline{H}_s) P \underline{H}^{tr} + \\ &+ \int \delta \underline{H}^{tr} P (\underline{H}^{tr} P \underline{H}^{tr} + \underline{H}_c - \underline{H}_s) + \int (H_c - H_s) P \underline{H}^{tr} \delta - \\ &- \int H^{tr} \delta \underline{H}^{tr} P \underline{H}^{tr} P - \int P \underline{H}^{tr} \delta \underline{H}^{tr} P \underline{H}^{tr} - \\ &- \int P \underline{H}^{tr} P \underline{H}^{tr} \delta \underline{H}^{tr} + \int \delta \underline{H}^{tr} P [H_0 \underline{T}_2]_{nd} - \\ &- \frac{1}{2} \int H^{tr} P \underline{H}^{tr} \delta \underline{H}^{tr} P + \frac{1}{2} \int P \underline{H}^{tr} \delta \underline{H}^{tr} P \underline{H}^{tr} . \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

Alle Doppelintegrale reduzieren sich allgemein auf einfache, mit Hilfe von (20), mit Ausnahme von

$$\int \int dE dE' \delta(E - H_0) \underline{H}^{tr} \frac{P}{E - H_0} \underline{H}^{tr} \frac{P}{E' - H_0} \underline{H}^{tr} \delta(E' - H_0) .$$

Da aber  $K_3$  nur für exakte Energieerhaltung gebraucht wird, kann dieses Integral auch

$$\int \delta \tilde{H}^{tr} P \underline{H}^{tr} P \tilde{H}^{tr}$$

geschrieben werden (ein Faktor  $\delta$  ganz links hat dann denselben Effekt wie ein  $\delta$  ganz rechts). Das Glied  $[H_0 T_3]$  in  $K_3$  ist weggelassen. Der Kommutator  $[H_0 T_2]$  in  $K_2$  ist notwendig, damit  $K_2$  hermitisch ist.

### § 3. Darstellung: „Verschobene Niveaus“.

Bevor wir die obigen Resultate zur Berechnung der physikalisch interessierenden Grössen benutzen, ist es angezeigt, eine Änderung der Darstellung vorzunehmen.  $K_2$  hat offenbar auch reine Diagonalelemente  $K_{2a}$  (während  $K_{3a} = 0$ ):

$$K_{2a} = (H_c - H_s)_a + \int (H^{tr} P \tilde{H}^{tr})_a \delta. \quad (23)$$

Das letzte Glied von  $K_2$  (22) und der Kommutator haben keine Diagonalelemente, da  $(\tilde{H}^{tr} P \underline{H}^{tr})_a = 0$ . Mit der Neudefinition der Atomzustände ist naturgemäss auch eine Energieverschiebung verbunden. Wenn wir Übergänge zwischen verschiedenen Niveaus betrachten, so sind damit selbstverständlich Übergänge zwischen den verschobenen Niveaus gemeint, und es ist sinnlos, zu sagen, dass das Atom zur Zeit  $t_0$  in einem unverschobenen angeregten Zustand war. Wir werden daher unsere Darstellung so abändern, dass an Stelle der Eigenwerte von  $H_0$  die verschobenen Energiewerte auftreten. Hierbei ist aber eines zu beachten: Die Niveaushiftung ist experimentell einzig und allein durch die Verschiebung des *Maximums der Linie* definiert. Dieses ist aber nach (8) durch  $Jm\Gamma$  bestimmt, und nicht allein (wie wir sofort sehen werden) durch  $K_{2a}$ . Wenn  $E'_A, E'_0$  die Energien der verschobenen Niveaus sind, so liegt nach (8) das Maximum der Linie dann bei  $E'_A = E'_0$  ( $E'_A =$  verschobene Energie des Grundzustands + Lichtquant), wenn  $Jm\Gamma(E'_0) = 0$  (wenn man die schwache  $E$ -Abhängigkeit von  $Re\Gamma$  vernachlässigt). Wir zeigen, dass dies die Niveaushiftung wie folgt bestimmt<sup>8)</sup>:

$$H_L = (H_c - H_s)_a + \int (H^{tr} P H^{tr})_a \delta \quad (24)$$

(24) ist nichts anderes als die Selbstenergie, wie sie von FRENCH und WEISSKOPF<sup>4)</sup> berechnet wurde.  $H_L$  unterscheidet sich von  $K_{2a}$  durch das Fehlen von  $\sim$  in einem Faktor  $H^{tr}$ . Wir ändern somit

unsere Darstellung folgendermassen: Statt  $H_0$  betrachten wir  $H'_0 = H_0 + H_L$  als die „ungestörte Energie“. Die Eigenwerte,  $E'_n$ , sind die verschobenen Niveaus. Die Eigenfunktionen bleiben aber unverändert, da  $H_L$  diagonal ist. In der Wechselwirkung tritt dann das Zusatzglied  $-H_L$  auf, also

$$K' = K - H_L. \quad (25)$$

Alles frühere bleibt unverändert, wenn  $H'_0$  durch  $H_0$  und  $K$  durch  $K'$  ersetzt wird. Insbesondere treten in (8) die verschobenen Energien auf:

$$w_{A0} = \frac{|\langle A | U(E'_A) | 0 \rangle|^2}{\left[ E'_A - E'_0 - \frac{1}{2} \text{Jm} \Gamma_{0/0}(E'_A) \right]^2 + \frac{1}{4} [\text{Re} \Gamma_{0/0}(E'_A)]^2}. \quad (26)$$

(genau genommen, müssten auch die Indizes  $A$  und  $0$  einen Strich tragen). Auch die Energieschalen sind neu definiert, insbesondere bezieht sich  $\varepsilon(0')$  auf die Nachbarschaft des verschobenen Niveaus  $E'_0$ . Um zu zeigen, dass die Linienverschiebung tatsächlich durch (24) gegeben ist, berechnen wir  $\Gamma_{0/0}(E)$  mit (24) bis zur zweiten Ordnung. Nach (25) und (23), (24) ist jetzt

$$\begin{aligned} K'_{2d} &= K_{2d} - H_L = \int (H^{tr} P \underline{H}^{tr} \delta)_d - \int (H^{tr} P H^{tr} \delta)_d = \\ &= - \int (\underline{H}^{tr} P \underline{H}^{tr} \delta)_d; \end{aligned} \quad (27)$$

ferner nach (10') und (22)

$$\begin{aligned} \frac{1}{2i} \Gamma_{20/0}(E) &= K'_{2d} + (K'_1 \xi K'_1)_d = K'_{2d} + (\underline{H}^{tr} \xi \underline{H}^{tr})_d = \\ &= -i \pi (\underline{H}^{tr} \delta \underline{H}^{tr})_d + (\underline{H}^{tr} P \underline{H}^{tr})_d - \int (H^{tr} P H^{tr})_d \delta, \end{aligned}$$

und nach Ausführung der Integration im letzten Glied explizit:

$$\frac{1}{2} \text{Jm} \Gamma_{20/0}(E) = \left\{ \underline{H}^{tr} \frac{P}{E - H'_0} \underline{H}^{tr} - \underline{H}^{tr} \frac{P}{E'_0 - H'_0} \underline{H}^{tr} \right\}_d \quad (28)$$

$$\frac{1}{2\pi} \text{Re} \Gamma_{20/0}(E) = (\underline{H}^{tr} \delta \underline{H}^{tr})_d. \quad (28')$$

Wir sehen, dass tatsächlich

$$\text{Jm} \Gamma_{20/0}(E'_0) = 0. \quad (29)$$

Wenn es erlaubt ist,  $\text{Re} \Gamma$  als unabhängig von  $E'_A$  zu betrachten, und wir werden sehen, dass dies in sehr guter Näherung der Fall ist, so folgt aus (26) und (29) streng, dass das Linienmaximum jetzt

bei  $E'_A = E'_0$  liegt. Hiermit ist der Beweis dafür erbracht (was bisher nur sehr plausibel war), dass die *übliche Berechnung der Niveaushiftung* durch (24) tatsächlich die *Verschiebung des Linienmaximums* liefert. Ganz exakt ist das nicht der Fall, da  $Re\Gamma$  von  $E'_A$ , wenn auch nur sehr schwach, abhängt (siehe § 5). Die Verschiebung  $H_L$  ist *unabhängig* von  $\varepsilon$ , also *unabhängig von den Anregungsbedingungen* (vorausgesetzt natürlich, dass  $\varepsilon \gg \gamma$ ).

Für den Grundzustand  $G$  (ohne Lichtquanten) verschwindet  $Jm\Gamma$  an jeder Stelle  $E$ , da die Energieschale unendlich klein ist und  $\underline{H}^{tr}$  also nur ein Photon unendlich kleiner Energie emittieren könnte. Trotz des Auftretens von  $\Gamma_{0/0}$  in (26) ist die Formel also symmetrisch in Anfangs- und Endzustand (auch  $Re\Gamma_{G/G} = 0$ ).

Wir werden die  $E$ -Abhängigkeit von  $Re\Gamma$  und  $Jm\Gamma$  in § 5 genauer untersuchen.

#### § 4. Strahlungstheoretische Korrekturen zu $Re\Gamma$ .

Das Hauptziel dieser Untersuchungen ist die Berechnung der strahlungstheoretischen Korrekturen zur Linienbreite, also  $Re\Gamma_4$ . Die explizite Berechnung erfolgt in der folgenden Arbeit III; hier werden wir nur die Ausgangsformel ableiten und zeigen, dass sie nur von der Grösse der Energieschale  $\varepsilon(0)$  abhängt. Wir werden in § 5 sehen, dass  $Re\Gamma_2$  sehr schwach von  $E$  abhängt. Dasselbe wird sich für  $Re\Gamma_4$  erweisen. Da  $Re\Gamma_4$  sowieso eine kleine Korrektur darstellt, werden wir uns darauf beschränken,  $Re\Gamma_4$  nur an einer Stelle, nämlich  $E = E_0$  zu berechnen. Die ohnehin sehr komplizierten expliziten Rechnungen werden dadurch sehr wesentlich vereinfacht. Die Stelle  $E = E_0$  spielt in mehrfacher Hinsicht eine ausgezeichnete Rolle.

Wenn wir  $U$  ebenfalls wie  $K$  entwickeln,  $U = U_1 + U_2 + U_3$ , so wird nach (9)

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} Re\Gamma_{40/0}(E'_0) &= \langle 0 | U^\dagger \delta_0 U | 0 \rangle = \\ &= \langle 0 | U_3^\dagger \delta_0 U_1 + U_1^\dagger \delta_0 U_3 + U_2^\dagger \delta_0 U_2 | 0 \rangle, \quad \delta_0 \equiv \delta(E'_0 - H'_0) \end{aligned} \quad (30)$$

und nach (10) (man bemerke, dass  $H_{Lnd} = 0$  und  $K_1 = \underline{H}^{tr}$  keine Diagonalelemente hat)

$$\left. \begin{aligned} U_1 &= K_1 \\ U_2(E'_0) &= K_{2nd} + (K_1 \xi_0 K_1)_{nd} \\ U_3(E'_0) &= K_{3nd} + (K_1 \xi_0 K_{2nd})_{nd} + ((K_2 - H_L) \xi_0 K_1)_{nd} \\ &\quad + (K_1 \xi_0 (K_1 \xi_0 K_1)_{nd})_{nd}, \quad \xi_0 \equiv \xi(E_0 - H'_0). \end{aligned} \right\} \quad (30')$$

Explizit ist zunächst

$$U_2(E'_0) = \underline{H}_c - \underline{H}_s + [H_0 \underline{T}_2] + \left\{ \int H^{tr} P \underline{H}^{tr} \delta + \int \delta \underline{H}^{tr} P \underline{H}^{tr} \right\}_{nd} + (\underline{H}^{tr} P_0 \underline{H}^{tr})_{nd} - i \pi (\underline{H}^{tr} \delta_0 \underline{H}^{tr})_{nd}.$$

Wenn  $U$  auf den Zustand  $|0\rangle$  wirkt und von links mit  $\delta_0$  multipliziert ist (siehe (30)),

$$\int H^{tr} P \underline{H}^{tr} \delta |0\rangle = H^{tr} P_0 \underline{H}^{tr} |0\rangle \quad \delta_0 \int \delta \underline{H}^{tr} P \underline{H}^{tr} |0\rangle = \delta_0 \underline{H}^{tr} P_0 \underline{H}^{tr} |0\rangle$$

$$\delta_0 [H_0 \underline{T}_2] |0\rangle = 0,$$

wird also

$$\delta_0 U_2(E'_0) |0\rangle = \delta_0 \{ \underline{H}_c - \underline{H}_s + H^{tr} P_0 \underline{H}^{tr} + \underline{H}^{tr} P_0 \underline{H}^{tr} + \underline{H}^{tr} P_0 \underline{H}^{tr} - i \pi \underline{H}^{tr} \delta_0 \underline{H}^{tr} \} |0\rangle = \delta_0 \{ \underline{H}_c - \underline{H}_s + H^{tr} P_0 \underline{H}^{tr} - i \pi \underline{H}^{tr} \delta_0 \underline{H}^{tr} \} |0\rangle. \quad (31)$$

Die Glieder  $H^{tr} P H^{tr}$  kombinieren sich so, dass die Energieschale völlig herausgefallen ist. Das Glied  $-i\pi$  wird durch die anderen Glieder in  $U_3^\dagger \delta_0 U_1$  usw. kompensiert (ausser im Produkt  $\sim \pi^2$ ). Ebenso werden sich die Glieder  $H_c - H_s$  so ergänzen, dass die Energieschale herausfällt.

In ähnlicher Weise sind  $U_3^\dagger \delta_0 U_1$  und  $U_1^\dagger \delta_0 U_3$  zu berechnen. Es zeigt sich, dass in fast allen Gliedern die Energieschale herausfällt<sup>9)</sup>.  $K_3$  kommt nur in  $U_3$  vor, und dies ist mit  $\delta_0$  multipliziert, was exakte Energieerhaltung bedeutet. Das Schlussresultat ist (nach einiger Rechnung):

$$\left. \begin{aligned} & \frac{1}{2\pi} \text{Re } \Gamma_{40/0}(E'_0) = \\ & = \langle 0 | \{ (H^{tr} P_0 \underline{H}^{tr} + H_c - H_s) \delta_0 (H^{tr} P_0 \underline{H}^{tr} + H_c - H_s)_{nd} - \\ & - \pi^2 H^{tr} \delta_0 \underline{H}^{tr} \delta_0 (H^{tr} \delta_0 \underline{H}^{tr})_{nd} + [H^{tr} \delta_0 \underline{H}^{tr} P_0 (H^{tr} P_0 \underline{H}^{tr} + H_c - H_s)_{nd} \\ & + H^{tr} \delta_0 (H_c - H_s - H_L) P \underline{H}^{tr} - \frac{1}{2} H^{tr} \delta_0 (\underline{H}^{tr} P_0^2 \underline{H}^{tr})_d \underline{H}^{tr} - \\ & - \frac{1}{2} H^{tr} \delta_0 \underline{H}^{tr} (\underline{H}^{tr} P_0^2 \underline{H}^{tr})_d + \text{konj. compl.} \} |0\rangle. \end{aligned} \right\} (31)$$

Die Energieschale kommt nur noch in den „Renormalisationstermen“ mit dem Faktor  $\frac{1}{2}$  und den „quadratischen Nennern“  $P_0^2$  vor. Im ersten Renormalisationsterm, wo  $(\underline{H}^{tr} P_0^2 \underline{H}^{tr})_d$  in der Mitte steht, bezieht sich dieser Faktor offenbar auf den Grundzustand, da links der Faktor  $H^{tr} \delta_0$  steht, der bei exakter Energieerhaltung vom Ausgangsniveau nur zum Grundzustand führen kann. Da



$\varepsilon(G) = 0$ , so kann man hier auch die  $\sim$ -Restriktion weglassen. Dagegen ist diese Restriktion im zweiten Renormalisationsterm nötig, da sonst divergente Beiträge entstehen würden. Der Faktor  $(\underline{H}^{tr} P_0^2 \underline{H}^{tr})_d$  bezieht sich hier auf das angeregte Niveau 0 und der Faktor  $\underline{H}^{tr}$  rechts kann zum Grundniveau führen. Ohne die  $\sim$ -Restriktion würde dann  $P_0^2$  quadratisch divergieren. Es ist also zu erwarten, dass auch  $Re \Gamma_{4\ 0/0}$   $\varepsilon$ -abhängige Beiträge hat. Dies werden wir in III auch finden. Man sieht aber auch schon aus der Struktur dieses Gliedes, dass die  $\varepsilon$ -abhängigen Beiträge für  $\varepsilon \rightarrow \infty$  verschwinden, ähnlich wie das für  $Jm \Gamma_2(E)$  der Fall war. Wir werden in III  $Re \Gamma_4$  explizit auf Konvergenz und Eindeutigkeit hin untersuchen und die Grössenordnung abschätzen.

### § 5. Bestimmung von $Jm \Gamma_2(E)$ und $Re \Gamma_2(E)$ .

Wir untersuchen zum Schluss die  $E$ -Abhängigkeit von  $\Gamma$  in zweiter Näherung. Es genügt völlig, dies in nichtrelativistischer Näherung zu tun. Wir bemerken zuerst, dass nur *transversale* Photonen zu  $Jm \Gamma_2$  beitragen (28). Daraus erhellt sofort, dass es im allgemeinen nicht möglich ist,  $\Gamma(E)$  in 4-dimensionaler Weise zu berechnen, ohne die Lorentz-Bedingung explizit zu berücksichtigen. Dies ist nur an der Stelle  $E = E_0$  möglich<sup>10</sup>).

Da in (28) nur  $\underline{H}^{tr}$  auf der Energieschale vorkommt, so tragen nur Übergänge von 0 in den Grundzustand  $G$  mit Emission von  $k$  bei, wobei  $k$  mit der Resonanzfrequenz  $E'_0 - E'_G$  nahezu (d. h. innerhalb  $\varepsilon$ ) übereinstimmt. Das Matrixelement  $\underline{H}^{tr}$  für diesen Übergang ist proportional zu  $1/\sqrt{k}$ , also  $\underline{H}^{tr} = B/\sqrt{k}$ . Nennen wir die Resonanzfrequenz  $E'_0 - E'_G = k_0$ , so ist

$$2\pi |B|^2 \varrho_{k_0}/k_0 = Re \Gamma_{2\ 0/0}(E'_0) \equiv \gamma$$

die gewöhnliche Linienbreite zweiter Ordnung.  $\varrho_k$  ist die Dichtefunktion für Lichtquanten der Frequenz  $k$ . (28) ergibt dann

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} Jm \Gamma_{2\ 0/0}(E) &= |B|^2 \int_{k_0-\varepsilon}^{k_0+\varepsilon} \frac{\varrho_k}{k} dk \left( \frac{P}{E-E'_G-k} - \frac{P}{k_0-k} \right) = \\ &= -\frac{\gamma}{2\pi} \frac{E-E'_G}{k_0} \log \left| \frac{E'_0-E+\varepsilon}{E'_0-E-\varepsilon} \right| \end{aligned} \quad (32)$$

Dies verschwindet, wie es sein muss, für  $E = E'_0$ .  $Jm \Gamma_2(E)$  verschwindet auch in den beiden Grenzfällen  $\varepsilon \rightarrow 0$  und  $\varepsilon \rightarrow \infty$ . Für den Grundzustand ist also  $Jm \Gamma_{2G/G} = 0$ . Setzen wir  $E = E'_A \equiv E'_G + k$  (Linienform für  $t \rightarrow \infty$ ), so stellt (32) eine von  $\varepsilon$  abhängige

Modifikation der Linienform dar (ohne das Maximum zu verschieben). Betrachten wir Werte von  $k$ , die in der Nähe des Maximums  $k_0 = E'_0 - E'_G$  liegen, so können wir nach  $(k_0 - k)/\varepsilon$  entwickeln und erhalten

$$\frac{1}{2} Jm \Gamma_{20/0}(E'_G + k) = -\frac{\gamma}{\pi} \frac{k}{k_0} \frac{k_0 - k}{\varepsilon} \tag{33}$$

Dies ist proportional zu  $k_0 - k = E'_A - E'_0$ . Setzt man dies in (26) ein, so sieht man, dass (33) in dieser Näherung als Korrektur zur *Linienbreite* aufgefasst werden kann. In dem idealisierten Grenzfall einer wirklich kontinuierlichen Anregung (die sich bis ins Unendliche erstreckt) geht  $\varepsilon \rightarrow \infty$  und die Korrektur  $Jm \Gamma_2(E) \rightarrow 0$ . Wir werden in der folgenden Arbeit III sehen, dass die Korrektur vierter Näherung aus zwei Teilen besteht, von denen der erste von  $\varepsilon$  unabhängig ist (Größenordnung  $\gamma/137^3$  für Wasserstoff), der zweite, ähnlich wie (33), proportional zu  $1/\varepsilon$  ist. (Größenordnung  $\gamma^2/\varepsilon$ ). In dem idealen Grenzfall kontinuierlicher Anregung sind also der  $\varepsilon$ -unabhängige Teil von  $Re \Gamma_4$  und ferner die  $E$ -Abhängigkeit von  $Re \Gamma$  die einzigen Korrekturen.

Wir betrachten schliesslich noch die  $E$ -Abhängigkeit von  $Re \Gamma_2$ . Wir erhalten aus (28')

$$\begin{aligned} Re \Gamma_{20/0}(E) &= 2 \pi \underline{H}_{0A}^{tr} \delta(E - E'_G - k) \underline{H}_{A0}^{tr} = 2 \pi |B|^2 \frac{Q_k}{k} \Big|_{E'_G + k = E} = \\ &= \gamma \frac{E - E'_G}{k_0}, \quad k_0 = E'_0 - E'_G \end{aligned} \tag{34}$$

wo wieder  $\gamma = Re \Gamma_2(E'_0)$ . Für  $E = E'_A = E'_G + k$  heisst das, dass  $\gamma$  mit dem Faktor  $k/k_0$  zu multiplizieren ist. Die Abweichung von  $\gamma$  ist also (wenn  $k_0 - k \sim \gamma$ ) von der Größenordnung  $\gamma^2/k_0$ . Wenn  $\varepsilon \ll k_0$ , wie ursprünglich angenommen war, dann ist die Korrektur von  $Jm \Gamma_2(E)$  viel grösser. Wenn wir in (26) den Zähler durch die erste Näherung  $\underline{H}^{tr}$  ersetzen und den Grenzfall  $\varepsilon \rightarrow \infty$  betrachten, so wird die Wahrscheinlichkeitsverteilung der emittierten Lichtquanten

$$w(k) dk = \frac{\gamma}{2 \pi} \frac{k}{k_0} \frac{dk}{(k_0 - k)^2 + \gamma^2 k^2/4 k_0^2}.$$

Die zu  $H_L$  zusätzliche Verschiebung des Maximums, die von der  $k$ -Abhängigkeit von  $Re \Gamma_2$  und auch von  $U(E'_A)$  herrührt, ist

$$\Delta k_{\max} = -\gamma^2/8 k_0.$$

Für das  $2P$ -Niveau von Wasserstoff ist  $\gamma = 6.3 \times 10^8 \text{ sec}^{-1} = 100 \text{ Meg. c.}$  Für den Radiofrequenz-Übergang  $2P_{3/2} \rightarrow 2S_{1/2}$  ( $2S$  ist stark metastabil und unsere Betrachtungen können auch hier an-

gewandt werden), ist  $k_0 = 10^4$  Meg. c. und  $\Delta k_{\max} \simeq 10^{-3}$  Meg. c. Dies ist noch rund 1000mal kleiner als die gegenwärtige Messgenauigkeit der Linienverschiebung (ca. 1 Meg. c). Natürlich müssten auch erst die höheren Näherungen von  $H_L$  ( $\sim e^4$  usw.) bestimmt werden, bevor diese Verschiebung in Betracht gezogen wird.

$Re \Gamma_4$  wird in der folgenden Arbeit III abgeschätzt werden.

Wir wünschen, Herrn Prof. W. HEITLER für das grosse Interesse, das er dieser Arbeit entgegengebracht hat, und für die vielen Ratschläge herzlich zu danken.

### Literatur.

- 1) E. ARNOUS und S. ZIENAU, Helv. Phys. Acta **24**, 279 (1951).
- 2) Es ist zu hoffen, dass mit der Weiterentwicklung der Radiofrequenzmethoden auch exaktere Messungen der natürlichen Linienform und -breite in Wasserstoff möglich sein werden.
- 3) Beispiele hierfür finden sich in W. HEITLER und S. T. MA, Proc. Roy. Ir. Ac. **52**, 109 (1949).
- 4) Beweis für die Richtigkeit dieses Verfahrens: J. M. JAUCH und F. COESTER, Phys. Rev. **78**, 149 (1950).
- 5) J. FRENCH und V. WEISSKOPF, Phys. Rev. **75**, 1240 (1949).
- 6) Näheres z. B. in W. HEITLER, Quantum Theory of Radiation, 3. Aufl., Oxford, im Druck.
- 7) Es ist keineswegs verlangt, dass wenn die Paare  $(n, m)$  und  $(n, l)$  je innerhalb einer Energieschale liegen, dann auch  $(m, l)$  innerhalb einer Energieschale liegen.
- 8) Genauer: In (24) ist nur der Null-Photonenteil und die Summe der Ein- und Null-Elektronenteile zu nehmen.
- 9) Folgende Punkte sind bei der Berechnung von  $U_3^\dagger \delta_0 U_1$  usw. zu beachten: Der Kommutator  $[H_0' T_2]$  hat sicher nur nichtdiagonale Elemente. Er kommt in folgendem Zusammenhang vor:
 
$$\begin{aligned} \delta_0 [H_0' T_2] \xi_0 &= \delta_0 [H_0' - E_0', T_2]_{na} \xi_0 = -\delta_0 T_{2na} (H_0' - E_0') \xi_0 (E_0' - H_0') = \\ &= +\delta_0 T_{2na}, \text{ da } \delta_0 (H_0' - E_0') = 0. \end{aligned}$$
 Ebenso  $\xi_0 [H_0' T_2] |0\rangle = \xi_0 [H_0' - E_0', T_2] |0\rangle = -T_{2na}$ , da  $(H_0' - E_0') |0\rangle = 0$ . Einige Glieder in  $U_3$  heben sich explizit weg, wenn man sie in Energiedarstellung aufschreibt.
- 10) Auch bei der Berechnung der Linienverschiebung (24) handelt es sich im wesentlichen um  $Jm\Gamma(E_0)$  vor der Änderung der Darstellung, § 3.