

Über den Einfluß elektrischer Felder auf die Lebensdauer des metastabilen Niveaus des Wasserstoffatoms¹

Von GERHART LÜDERS

Aus dem Institut für Theoretische Physik der Universität Hamburg

(Z. Naturforsch. 5a, 608—611 [1950]; eingegangen am 10. Oktober 1950)

Es wird eine Neuberechnung des Einflusses elektrischer Felder auf die Lebensdauer des metastabilen Niveaus des Wasserstoffatoms unter Berücksichtigung der Lamb-shift vorgelegt. Durch die Lamb-shift wird die mittlere Lebensdauer zwischen 0,03 und 10 Volt cm⁻¹ um mehr als zwei Zehnerpotenzen verlängert.

Die Metastabilität des $2\ S_{1/2}$ -Niveaus des Wasserstoffatoms beruht bekanntlich darauf, daß infolge der l -Auswahlregel ein mit elektrischer Dipolstrahlung verbundener Übergang in den Grundzustand verboten ist. Nach den Untersuchungen von Breit und Teller² ist ein Übergang in den Grundzustand am wahrscheinlichsten, wenn er mit der gleichzeitigen Emission von 2 Lichtquanten verbunden ist. Die mittlere Lebensdauer des $2\ S_{1/2}$ -Niveaus ergibt sich dabei zu etwa $1/7$ sec.

Ein äußeres elektrisches Feld vermischt den $2\ S$ -Zustand mit $2\ P$ -Zuständen und kann daher bei hinreichender Stärke die Lebensdauer, d. h. die Metastabilität, wesentlich vermindern. Bei Gültigkeit der Sommerfeldschen Feinstrukturformel, nach der Niveaus mit gleicher Hauptquantenzahl n und gleicher Drehimpulsquantenzahl j genau zusammenfallen, würde bereits ein schwaches äußeres Feld die beiden Zustände $j = 1/2$, $l = 0$ und $j = 1/2$, $l = 1$ völlig vermischen und die Lebensdauer beträchtlich herabsetzen. Allerdings sind Abweichungen von dieser Überlegung zu erwarten, solange die durch das elektrische Feld hervorgerufene Aufspaltung von der Größenordnung der natürlichen Niveaubreite ist (vgl. ³).

Nun ist vor einigen Jahren experimentell nachgewiesen⁴ und theoretisch verständlich gemacht⁵ worden, daß die Feinstrukturformel nicht in Strenge zutrifft. Diese Abweichung, die Lamb-shift, hat ihre Ursache in der Wechselwirkung des Elektrons mit dem Strahlungsfeld und führt u. a. dazu, daß der $2\ S_{1/2}$ -Term höher liegt als der $2\ P_{1/2}$ -Term. Beth⁶

¹ Teilweise enthalten in der unveröffentlichten Hamburger Dissertation (1950) des Verf.

² G. Breit u. E. Teller, Astrophys. J. **91**, 215 [1940].

³ H. Bethe in Hdb. Physik, 2. Aufl., Bd. **24/1**, 273, Berlin 1933.

und Mitarb.⁶ errechnen für diese Verschiebung einen Wert von 1051 MHz.

Durch die Lamb-shift wird die Empfindlichkeit des metastabilen Niveaus in entscheidender Weise geändert. Hinreichend schwache Felder führen, da der $2\ S_{1/2}$ -Term und der $2\ P_{1/2}$ -Term nicht mehr zusammenfallen, zu einer nur geringfügigen P-Beimischung zu dem S-Zustand und daher zu einer nur geringfügigen Verminderung der Lebensdauer.

Ziel dieser Arbeit ist es, eine Neuberechnung des Einflusses elektrischer Felder auf die Lebensdauer des metastabilen Niveaus des Wasserstoffatoms unter Berücksichtigung der Lamb-shift vorzulegen. Eine Berücksichtigung der natürlichen Linienbreite, die bei früheren Untersuchungen eine große Rolle spielte, erweist sich dabei als unnötig, da das S-Niveau und das P-Niveau bereits ohne äußeres Feld einen Abstand haben, der hinreichend groß gegen die natürliche Niveaubreite ist. Der durch diese Vernachlässigung begangene Fehler beträgt auch bei kleinsten Feldstärken weniger als 1 Prozent.

Um ein genaueres Urteil über die Rolle der Lamb-shift zu ermöglichen, wird dem Ergebnis dasjenige gegenübergestellt, das sich *ohne* Lamb-shift ergeben würde.

Durchführung der Rechnung

Ein angeregtes Niveau eines Atoms klingt unter Emission von elektrischer Dipolstrahlung mit einer Zeitkonstanten γ , der reziproken mittleren Lebensdauer, ab, die gegeben ist durch

⁴ W. E. Lamb jr. u. R. Rutherford, Physic. Rev. **72**, 241 [1947].

⁵ H. A. Bethe, Physic. Rev. **72**, 339 [1947]; T. A. Welton, Physic. Rev. **74**, 1157 [1948].

⁶ H. A. Bethe, L. M. Brown u. J. R. Stehn, Physic. Rev. **77**, 370 [1950].



$$\gamma = \sum_b \gamma_{ab} \quad (1)$$

mit

$$\gamma_{ab} = \frac{4}{3} \frac{e^2}{\hbar} \left(\frac{\omega_{ab}}{c} \right)^3 (\mathbf{r}^*_{ab} \mathbf{r}_{ab}) \quad (2)$$

(vgl. 3). In (1) ist über alle vom Anfangszustand a aus erreichbaren energetisch tieferen Endzustände b zu summieren. In (2) stellen die ω_{ab} die Kreisfrequenzen der Übergänge und die \mathbf{r}_{ab} die zugehörigen Matrixelemente des Ortsvektors \mathbf{r} dar. Von dem hier interessierenden $2S_{1/2}$ -Niveau aus sind, da der Grundzustand zweifach entartet ist, zwei Übergangsmöglichkeiten vorhanden. Ohne äußeres Feld sind diese allerdings als elektrische Dipolübergänge verboten: die Matrixelemente \mathbf{r}_{ab} verschwinden.

Durch ein äußeres homogenes elektrisches Feld wird die Übergangsfrequenz in einer hier vernachlässigbaren Weise geändert, gleichzeitig aber erhalten die Matrixelemente infolge Änderung der Eigenfunktionen einen von Null verschiedenen Wert. Die hierdurch bedingte Abhängigkeit der Größe γ vom äußeren elektrischen Feld F gilt es nunmehr für das metastabile Niveau zu errechnen. Hierfür ist mittels einer Störungsrechnung zunächst die Energieänderung (Stark-Effekt) und anschließend die Änderung der Matrixelemente \mathbf{r} für die Übergänge von diesem Zustand aus zu gewinnen.

Die Methode der Störungsrechnung wird an anderer Stelle dargestellt (vgl. 7, insbesondere Ziffer 3). Genauer zu untersuchen sind danach nur die Terme mit $m_j = 1/2$ (bzw. die damit zusammenfallenden mit $m_j = -1/2$). Die Säkulardeterminante (16₁) in 7 ist jetzt so abzuändern, daß die Lamb-shift mitberücksichtigt wird. Hierfür braucht die Wechselwirkung mit dem Strahlungsfeld bei Anwesenheit eines äußeren elektrischen Feldes nicht erneut berechnet zu werden, da die der Lamb-shift entsprechende Zusatzenergie nach 5 gleich dem Erwartungswert von $\Delta(e^2/r)$ (Δ = Laplace-Operator) multipliziert mit einem von n abhängigen Faktor ist. Die Lamb-shift kann also dadurch berücksichtigt werden, daß zu den n -Teilmatrizen der verschiedenen Anteile des Energieoperators (vgl. 7) die n -Teilmatrix von $\Delta \frac{1}{r} = 4\pi \delta(r)$ mit einem geeigneten Zahlenfaktor addiert wird. Dieser Faktor ist so zu wählen, daß der S-Term im feldfreien Fall eine Verschiebung von 1051 MHz erhält.

7 G. Lüders, Der Stark-Effekt des Wasserstoffs bei kleinen Feldstärken, Ann. Physik (im Erscheinen).

Die durch ein elektrisches Feld der Stärke F hervorgerufene Energieänderung δE , bezogen auf das Niveau mit $j = 3/2$ als Nullpunkt, ergibt sich dann als Lösung der folgenden Säkulardeterminante

$$\begin{vmatrix} -\xi & 0 & A\sqrt{6} \\ 0 & -\frac{1}{16} - \xi & -A\sqrt{3} \\ A\sqrt{6} & -A\sqrt{3} & \xi - \frac{1}{16} - \xi \end{vmatrix} = 0 \quad (3)$$

und der daraus folgenden algebraischen Gleichung

$$\xi^3 + \xi^2 \left(\frac{1}{8} - \varepsilon \right) + \xi \left(\frac{1}{256} - \frac{\varepsilon}{16} - 9A^2 \right) - \frac{3}{8} A^2 = 0. \quad (4)$$

Dabei sind folgende dimensionslosen Größen benutzt worden

$$A = \frac{e \mathbf{a} F}{a^2 e^2 / 2 \mathbf{a}}, \quad \xi = \frac{\delta E}{a^2 e^2 / 2 \mathbf{a}}. \quad (5)$$

Die Größe ε stellt die Lamb-shift, gemessen ebenfalls in Einheiten $a^2 e^2 / 2 \mathbf{a}$, dar und hat bei Zugrundelegung einer Verschiebung von 1051 MHz den Zahlenwert $6,002 \cdot 10^{-3}$. $\mathbf{a} = \hbar^2 / m_0 e^2$ bedeutet den Radius der innersten Bohrschen Bahn, $a = e^2 / \hbar c$ die Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante.

In der Säkulardeterminante (3) bezieht sich die erste Zeile und Spalte auf die Funktion mit $j = 3/2$, $l = 1$, die zweite Zeile und Spalte auf die Funktion mit $j = 1/2$, $l = 1$ und die dritte auf $j = 1/2$, $l = 0$. Die ungestörten Funktionen sollen in der genannten Reihenfolge, in Übereinstimmung mit 7, mit ψ_1 , ψ_2 , ψ_3 , ψ_4 bezeichnet werden.

Wenn man sich lediglich auf die Untersuchung der bei Anlegen eines Feldes aus den Niveaus mit $j = 1/2$ hervorgehenden Terme beschränkt, so genügt es, die Energieänderung bei hinreichend kleinen Feldern aus der folgenden Determinante

$$\begin{vmatrix} -\frac{1}{16} - \xi & -A\sqrt{3} \\ -A\sqrt{3} & \xi - \frac{1}{16} - \xi \end{vmatrix} = 0 \quad (6)$$

d. h. der Gleichung

$$\left(\xi + \frac{1}{16} \right)^2 - \varepsilon \left(\xi + \frac{1}{16} \right) - 3A^2 = 0 \quad (7)$$

zu berechnen. Löst man (7) für hinreichend kleine Felder durch die ersten Glieder einer Reihenentwicklung, so gilt schließlich für den aus dem metastabilen

Niveau hervorgehenden Term

$$\xi + \frac{1}{16} = \varepsilon + \frac{3}{\varepsilon} A^2 + \dots . \quad (8)$$

Einen Überblick über den Verlauf der Größe ξ (bzw. der Verschiebung in cm^{-1}) als Funktion der Feldstärke F gibt Abb. 1, in der zum Vergleich derjenige Verlauf gestrichelt eingetragen ist, der sich ohne Lamb-shift ergeben würde. Unterhalb einer Feldstärke von etwa 200 Volt cm^{-1} wurde der Verlauf der von $j = 1/2$ ausgehenden Terme mittels (7) berechnet. Da bei $j = 1/2$ der S-Term ($l = 0$) und der P-Term

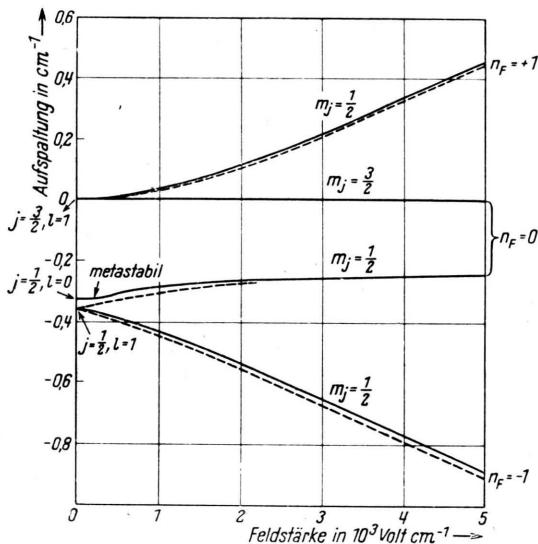


Abb. 1. Termverschiebung des Niveaus $n = 2$ als Funktion der elektrischen Feldstärke ohne (---) und mit (—) Berücksichtigung der Lamb-shift.

($l = 1$) ohne Feld nicht mehr genau zusammenfallen, erhält man zunächst statt des linearen einen quadratischen Anstieg [vgl. (8)]. Im Falle großer Feldstärken ergibt sich infolge der Lamb-shift eine Verschiebung der äußeren Terme ($n_F = \pm 1$) um die Hälfte (0,017 cm^{-1}) der Verschiebung ohne Feld.

In Abb. 1 ist außerdem ein von $j = 3/2$ nach $n_F = 0$ gehender, zu $m_j = 3/2$ gehörender Term eingetragen, auf den die Lamb-shift keinen Einfluß hat.

Nachdem der Verlauf von ξ (d. h. von der Energieverschiebung δE) für den vom metastabilen Niveau ausgehenden Term errechnet worden ist, läßt sich die Änderung der Größe γ durch ein äußeres Feld gewinnen.

Die zum metastabilen Niveau gehörige Eigenfunktion ψ_4 wird nämlich bei Anlegen des Feldes F ge-

ändert in

$$\varphi = a_2 \psi_2 + a_3 \psi_3 + a_4 \psi_4 , \quad (9)$$

wobei sich die feldstärkeabhängigen Entwicklungskoeffizienten a_k bis auf einen gemeinsamen Normierungsfaktor N aus den Unterdeterminanten zu einer (also z. B. der ersten) Zeile von (8) errechnen

$$N a_2 = \begin{vmatrix} -\frac{1}{16} - \xi & -A\sqrt{3} \\ -A\sqrt{3} & \varepsilon - \frac{1}{16} - \xi \end{vmatrix} ,$$

$$N a_3 = - \begin{vmatrix} 0 & -A\sqrt{3} \\ A\sqrt{6} & \varepsilon - \frac{1}{16} - \xi \end{vmatrix} , \quad (10)$$

$$N a_4 = \begin{vmatrix} 0 & -\frac{1}{16} - \xi \\ A\sqrt{6} & -A\sqrt{3} \end{vmatrix} .$$

N ist so zu bestimmen, daß gilt

$$|a_2|^2 + |a_3|^2 + |a_4|^2 = 1 . \quad (11)$$

In (10) ist für ξ die entsprechende Lösung von (4) einzusetzen.

Im Rahmen der Näherung (7) kann, indem man die Unterdeterminanten der Determinante (6) entnimmt, gesetzt werden

$$a_2 = 0 , \quad a_3 = \frac{\frac{1}{16} - \varepsilon + \xi}{\sqrt{\left(\frac{1}{16} - \varepsilon + \xi\right)^2 + 3 A^2}} , \quad (12)$$

$$a_4 = \frac{\sqrt{3} A}{\sqrt{\left(\frac{1}{16} - \varepsilon + \xi\right)^2 + 3 A^2}} .$$

Die in (2) einzusetzenden, infolge des Einflusses des äußeren Feldes abgeänderten Matrixelemente r_{ab} für die Übergänge zum Grundzustand errechnen sich nunmehr wegen (9) zu

$$\int \varphi^* r_{zb} d\tau = a_2^* \int \psi_2^* r_{zb} d\tau + a_3^* \int \psi_3^* r_{zb} d\tau . \quad (13)$$

Dabei beziehen sich die Funktionen ψ_2, ψ_3 , wie oben angegeben, auf den Anfangszustand $n = 2$, während χ_1 und χ_2 die beiden Eigenfunktionen ($m_j = +1/2$ bzw. $m_j = -1/2$) des durch ein Feld übrigens nicht beeinflußten Grundzustandes $n = 1$ bedeuten. Das Matrixelement $\int \psi_4^* r_{zb} d\tau$ tritt wegen der l -Auswahlregel in (13) nicht auf. Die übrigen Matrixelemente sind durch die nachfolgende Aufstellung gegeben (vgl. z. B. ³).

$$\left. \begin{aligned} \int \psi_2^* \mathbf{r} \chi_1 d\tau &= \frac{2^8}{3^{11/2}} \mathbf{a} \mathbf{\hat{z}}_0, \\ \int \psi_2^* \mathbf{r} \chi_2 d\tau &= -\frac{2^7}{3^{11/2}} \mathbf{a} (\mathbf{r}_0 - i \mathbf{y}_0), \\ \int \psi_3^* \mathbf{r} \chi_1 d\tau &= -\frac{2^{15/2}}{3^{11/2}} \mathbf{a} \mathbf{\hat{z}}_0, \\ \int \psi_3^* \mathbf{r} \chi_2 d\tau &= -\frac{2^{15/2}}{3^{11/2}} \mathbf{a} (\mathbf{r}_0 - i \mathbf{y}_0). \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

$\mathbf{\hat{x}}_0, \mathbf{\hat{y}}_0, \mathbf{\hat{z}}_0$ bedeuten die Einheitsvektoren in der x -, y -, z -Richtung (Feld $\parallel \mathbf{\hat{z}}_0$). Aus (13) und (14) folgt zunächst unter Benutzung der Normierungsbedingung (11)

$$|\int \psi^* \mathbf{r} \chi_1 d\tau|^2 + |\int \psi^* \mathbf{r} \chi_2 d\tau|^2 = \frac{2^{15}}{3^{10}} \mathbf{a}^2 (1 - |a_4|^2). \quad (15)$$

Drückt man jetzt in (2) die Übergangsfrequenz mittels der Rydberg-Formel durch die atomaren Konstanten aus und benutzt die Abkürzung

$$\Gamma = \left(\frac{2}{3}\right)^8 a^4 \frac{c}{a} = 6,27 \cdot 10^8 \text{ sec}^{-1}, \quad (16)$$

so gilt schließlich für die durch das Feld geänderte reziproke mittlere Lebensdauer für Dipolübergänge von dem metastabilen Niveau des Wasserstoffs aus die nachfolgende Beziehung

$$\gamma = \Gamma (1 - |a_4|^2). \quad (17)$$

Ohne Feld ($A = 0$) hat a_4 den Wert 1 und nimmt für starke Felder ($A \gg 1$) asymptotisch den Wert Null an, da in (10) $N a_2$ und $N a_3$ bei starken Feldern proportional A^2 , $N a_4$ aber proportional A ist. γ ändert sich also bei Anlegung eines wachsenden Feldes von Null bis Γ .

In der Abb. 2 ist dieser Verlauf in doppelt-logarithmischem Maßstab aufgetragen, wobei zu dem gemäß (17) berechneten γ -Wert der von Breit und Tellem² errechnete γ -Wert von 7 sec^{-1} für Übergänge unter Emission zweier Quanten addiert wurde. Die hierdurch hervorgerufene Krümmung der Kurve macht sich in der Abbildung erst unterhalb 0,2 Volt cm^{-1} bemerkbar. Gl. (17) wurde unterhalb 50 Volt cm^{-1} mittels der aus (12) und (8) folgenden Näherung

$$\gamma = 3 \left(\frac{A}{\epsilon}\right)^2 \Gamma = 4,45 \cdot 10^{-6} \left(\frac{F}{\text{Volt cm}^{-1}}\right) \cdot \Gamma \quad (18)$$

ausgewertet. Unterhalb 300 Volt cm^{-1} wurde mit der Näherung (12) und (7) und oberhalb 300 Volt cm^{-1} mit der vollständigen Beziehung (10) gerechnet.

Um die Rolle zu verdeutlichen, die die Lamb-shift bei der Verlängerung der mittleren Lebensdauer spielt, ist in der gleichen Abbildung derjenige Verlauf von γ als Funktion der Feldstärke aufgetragen, der sich bei Fehlen der Lamb-shift ergeben würde. Es genügt hierfür nicht, die ganze Rechnung in der gleichen Weise zu wiederholen, und nur ϵ gleich Null zu setzen, insbesondere also (17) mit entsprechend abgeändertem a_4 beizubehalten. Wie bereits am Anfang der Arbeit betont wurde, sind die Abweichungen, die von der natürlichen Breite des $2P_{1/2}$ -Niveaus herühren, zu berücksichtigen.

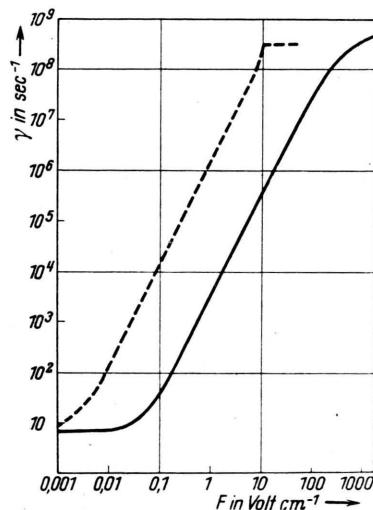


Abb. 2. Die reziproke mittlere Lebensdauer des metastabilen Niveaus als Funktion der Feldstärke (---) ohne und (—) mit Berücksichtigung der Lamb-shift.

Es ergibt sich dann (vgl. ³) die folgende, mindestens bis 20 Volt cm^{-1} mit guter Näherung gültige Beziehung

$$\gamma = \frac{1}{2} \left(1 - \Re \sqrt{1 - 48 \left(\frac{e \mathbf{a} F}{\hbar \Gamma}\right)^2}\right) \Gamma \quad (19)$$

(\Re = Realteil), die für genügend kleine Feldstärken (bis zu einigen Volt cm^{-1}) durch die Näherung

$$\gamma = 12 \left(\frac{e \mathbf{a} F}{\hbar \Gamma}\right)^2 \Gamma = 1,97 \cdot 10^{-3} \left(\frac{F}{\text{Volt cm}^{-1}}\right)^2 \cdot \Gamma \quad (20)$$

ersetzt werden kann. Auch hier ist natürlich der γ -Wert von 7 sec^{-1} für die Emission zweier Quanten hinzu zu addieren.

Ein Blick auf die Abb. 2 und der Vergleich von (18) mit (20) zeigen, daß bei Feldstärken zwischen 0,03 und 10 Volt cm^{-1} infolge der Lamb-shift eine Verlängerung der mittleren Lebensdauer um mehr als zwei Zehnerpotenzen stattfindet.