

Nichtrelativistische Quantenmechanik des starren Elektrons

Von LUDWIG WALDMANN

Aus dem Max-Planck-Institut für Chemie, Mainz

(Z. Naturforschg. 8a, 583—593 [1953]; eingegangen am 14. Juli 1953)

In der Lorentz'schen Bewegungsgleichung des ausgedehnten starren Elektrons oder in der Bopp-Hönl'schen Feldmechanik treten neben der Beschleunigung höhere Zeitableitungen der Koordinaten des Teilchens auf. Berücksichtigt man nur die geraden Ableitungen, so ist die Bewegung konservativ und es existiert eine Lagrange-Funktion, welche nach Bopp ohne weiteres die kanonische Quantisierung ermöglicht (§ 1). Zur physikalischen Interpretation wird nun angenommen, daß der Sinn der so entstandenen Quantenmechanik vor allem darin liegt, die Bewegung des Elektrons genauer wiederzugeben als die gewöhnliche Schrödingersche Theorie. Letztere enthält in der Bewegungsgleichung nur die Beschleunigung und beschreibt das Elektron durch einen Skalar $\psi(\mathbf{r}, t)$. In der erweiterten Theorie werden auch vierte Zeitableitungen in der Bewegungsgleichung berücksichtigt und zur Beschreibung des Elektrons benötigt man außer einem Skalar $\psi(\mathbf{r}, t)$ auch einen Vektor $\psi_k(\mathbf{r}, t)$, einen symmetrischen Tensor 2. Stufe $\psi_{kl}(\mathbf{r}, t)$, usw., welche durch ein lineares Gleichungssystem — Gl. (28) — miteinander verbunden sind (§ 3). Es ergibt sich eine Korrektur am Wasserstoffspektrum, welche mit der experimentellen Lambshift bzw. dem bekannten Ergebnis der Quantenelektrodynamik übereinstimmt bei geeigneter Wahl der Frequenz ω , der in der erweiterten Mechanik vorkommenden neuen Konstanten. Da die Theorie nichtrelativistisch ist, sind jedoch Angaben über den Wert von ω bzw. über den Elektronenradius vorläufig (§ 4 u. 5). — Zusatz I bringt die Definition des Drehimpulsoperators für das System der Tensorgrößen ψ, ψ_k, ψ_{kl} . Zusatz II bereitet die Übertragung der Methode dieser Arbeit auf die relativistische Mechanik vor. Zusatz III enthält eine weitere, besonders kurze Herleitung der Lambshift. Zusatz IV behandelt die Bewegungsgleichung mit geraden Zeitableitungen bis zur 6. Ordnung.

Um die unendliche Selbstenergie der Punktladung zu vermeiden, hat Lorentz¹ das Modell des ausgedehnten starren Elektrons eingeführt. Er konnte mittels der klassischen Elektrodynamik zeigen, daß die Ladung e , zentralsymmetrisch starr verteilt innerhalb einer Kugel vom Radius b , sich bei kleiner Geschwindigkeit im äußeren Kraftfeld K etwa wie eine Punktmasse $m \approx e^2/bc^2$ verhält, daß aber genau genommen auch höhere Zeitableitungen der Koordinate x des Kugelmittelpunkts in der Bewegungsgleichung erscheinen:

$$m\ddot{x}_k + f \frac{e^2 b}{c^4} \ddot{x}_k + \dots = K_k \quad (k = 1, 2, 3). \quad (1)$$

Die Glieder mit ungeraden Zeitableitungen, die dissipativen Strahlungsglieder, sind unterdrückt. Der Formfaktor f ist positiv und von der Größenordnung 1. Dasselbe gilt für die entsprechenden Faktoren, die bei den höheren geraden Zeitableitungen auftreten und die für eine spezielle Ladungsverteilung von Page² berechnet wurden. Mit der Frequenz

$$\omega = (mc^4/fe^2b)^{1/2} \quad (2)$$

lautet (1), unter Fortlassung höherer als vierter Zeitableitungen, auch

$$m \frac{d^2}{dt^2} \left(1 + \frac{1}{\omega^2} \frac{d^2}{dt^2} \right) x_k = K_k. \quad (3)$$

Wollte man die Modellvorstellung des ausgedehnten Elektrons ganz strikt durchführen, so hätte man die Lorentz-Kraft K in (1) über die Kugel zu mitteln. Diese Mittelung ließ sich jedoch nicht relativistisch verallgemeinern. Meint man aber in (1) bzw. (3) die Lorentz-Kraft im Kugelmittelpunkt, so hat man genau diejenige Bewegungsgleichung, welche als nichtrelativistische Näherung aus der allgemeinen Feldmechanik von Bopp³ bzw. der spezielleren Mechanik des Pol-Dipolteilchens von Hönl⁴ folgt. Die linke Seite von (3) entspricht dann also einem ausgedehnten, die rechte Seite einem

¹ H. A. Lorentz, *The Theory of Electrons*, Teubner, Leipzig 1909.

² L. Page, *Physic. Rev.* **11**, 376 [1918]; s. a. C. J. Eliezer, *Proc. Roy. Soc. [London], Ser. A* **194**, 543 [1948].

³ F. Bopp, *Ann. Physik* **38**, 345 [1940]; *Z. Naturforschg.* **1**, 196 [1946].

⁴ H. Hönl u. A. Papapetrou, *Z. Physik* **112**, 512 [1939].



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitalized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

punktförmigen Teilchen. Dieses Modell werden wir hier behandeln; wir sollten daher streng genommen vom Pol-Dipolteilchen und nicht, wie in der Überschrift, vom starren Elektron sprechen.

Die Mechanik des Pol-Dipolteilchens besitzt eine frappante Ähnlichkeit zur Diracschen Quantenmechanik des Elektrons. Ein gemäß (3) bewegtes kräftefreies Teilchen kann eine Zitterbewegung ausführen ähnlich der Zitterbewegung des Dirac-Elektrons; im vorliegenden nichtrelativistischen Fall handelt es sich einfach um eine harmonische Schwingung mit der Frequenz ω . Im Zusammenhang damit tritt im Drehimpuls ein Zusatzglied auf, ähnlich dem Spin des Dirac-Elektrons. Es ist aber trotzdem nicht einfach so, daß durch Übertragung von (3), bzw. einer entsprechenden relativistischen Verallgemeinerung, in die Quantentheorie nach dem kanonischen Quantisierungsverfahren gewissermaßen automatisch die Dirac-Gleichung oder auch nur eine entsprechende Gleichung für ein Teilchen mit ganzzahligem Spin entstände. Physikalisch hängt das mit einem wichtigen Unterschied zwischen dem genannten spinartigen Zusatz zum Drehimpuls in der Feldmechanik und dem echten Spin der Elementarteilchen zusammen: letzterer hat auch im äußeren Feld einen zeitlich konstanten Betrag, ersterer nicht⁵; d. h. beim feldmechanischen Teilchen finden selbst im kugelsymmetrischen äußeren Feld beständig Übergänge zwischen sämtlichen denkbaren Zuständen des Zusatzdrehimpulses statt. Um zu separierten Wellengleichungen für echte Spinteilchen zu gelangen^{6,7}, müssen Grenzbetrachtungen (vgl. § 3) oder neue Annahmen gemacht werden, welche auf eine Unterdrückung dieser Übergänge hinauslaufen. Die Lambshift ist in diesen separierten Wellengleichungen dann jedoch nicht enthalten (l. c.⁶ 2. Arbeit).

In der vorliegenden Arbeit soll die Quanten-Feldmechanik in anderer Weise als bisher in der Literatur verwertet werden. Wir lassen die Frage des echten Spins beiseite (bis auf die kurze Bemerkung im Anschluß an Gl. (28) in § 3) und ebenso die Frage, welche Bedeutung die verschiedenen Quantenzustände des kräftefreien Teilchens haben^{7,8}. Wir übertragen vielmehr den physikalischen Gehalt der Gl. (3) unverändert in die Quantentheorie,

suchen Bewegungen auf, die sich wenig von der Bewegung des Punktteilchens unterscheiden, und nehmen an, daß wir so eine genauere Mechanik des Elektrons erhalten. Wir denken also an ein Teilchen mit dem echten Spin 0, zu dessen Drehimpuls jedoch das konservative Strahlungsfeld, welches den Emissions-Absorptionsprozessen der Quantenelektrodynamik korrespondiert, einen kleinen Zusatz von zeitlich veränderlichem Betrag liefert. Dieser Auffassung gemäß richten wir unser Augenmerk hauptsächlich auf das Verhalten eines solchen Teilchens in einem äußeren Feld. Es hat den Anschein, daß man tatsächlich eine verbesserte Beschreibung der Bewegung des Elektrons gewinnt und zu einem wenigstens qualitativen Verständnis der Lambshift⁹ im Rahmen der Mechanik gelangt.

Der Hauptteil dieser Arbeit, dessen Ergebnisse schon in einer Notiz mitgeteilt wurden¹⁰, bringt die Rechnungen in ausführlicher Form. Er ist unabhängig von den Zusätzen am Schluß, in denen speziellere Fragen kurz behandelt werden.

§ 1. Grundlagen der Quantenmechanik des starren Elektrons

Zu dem klassischen Wirkungsprinzip (x für x_1, x_2, x_3)

$$\int L(x, \dot{x}, \ddot{x}) dt = \text{Min.}$$

gehört bekanntlich die Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{d^2}{dt^2} \frac{\partial L}{\partial \ddot{x}} = \frac{\partial L}{\partial x}.$$

Daraus entnimmt man umgekehrt die zu (3) gehörige Lagrange-Funktion

$$L = \frac{m}{2} \left(\dot{x}_k \dot{x}_k - \frac{1}{\omega^2} \ddot{x}_k \ddot{x}_k \right) - e\Phi + \frac{e}{c} A_k \dot{x}_k, \quad (4)$$

wo Φ und \mathfrak{A} das skalare und vektorielle Potential des äußeren elektrischen und magnetischen Felds bedeuten. Die Impulsdefinitionen lauten³, oder etwa auch⁵,

$$s_k = \frac{\partial L}{\partial \ddot{x}_k} = - \frac{m}{\omega^2} \ddot{x}_k,$$

$$p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_k} - \dot{s}_k = m \dot{x}_k + \frac{e}{c} A_k - \dot{s}_k.$$

⁵ L. Waldmann, Z. Naturforschg. **7a**, 645 [1952].

⁶ F. Bopp, Z. Naturforschg. **3a**, 564 [1948]; F. Bopp u. F. L. Bauer, Z. Naturforschg. **4a**, 611 [1949].

⁷ H. Hönl, Z. Naturforschg. **3a**, 573 [1948]; H. Hönl u. H. Boerner, Z. Naturforschg. **5a**, 353 [1950].

⁸ F. Bopp, Z. Physik **125**, 615 [1948].

⁹ W. E. Lamb jr. u. R. C. Retherford, Physic. Rev. **72**, 241 [1947].

¹⁰ L. Waldmann, Z. Naturforschg. **8a**, 329 [1953].

Mit den Bezeichnungen

$$v_k = \dot{x}_k, \quad P_k = p_k - \frac{e}{c} A_k \quad (5)$$

erhält man als Hamilton-Funktion

$$H = \dot{x}_k p_k + \dot{v}_k s_k - L \\ = v_k P_k - \frac{m}{2} v_k v_k - \frac{\omega^2}{2m} s_k s_k + e \Phi. \quad (6)$$

Man entnimmt aus den kanonischen Gleichungen für die Koordinaten x bzw. v und ihre Impulse p bzw. s wiederum leicht Gl. (3).

Zur Quantisierung werden, wie bei Bopp³, die Wellenfunktion $\Psi(r, t, v)$ und die Operatoren

$$p_k = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k}, \quad s_k = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial v_k}$$

eingeführt und, in Korrespondenz zu (6), die Wellengleichung postuliert

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (V + v_k P_k - H_{\text{osz}}) \Psi$$

$$\text{mit } H_{\text{osz}} = \frac{m}{2} v_k v_k + \frac{\omega^2}{2m} s_k s_k - \frac{3}{2} \hbar \omega. \quad (7)$$

Dabei wurde $e\Phi = V$ abgekürzt und die Nullpunktsenergie des Oszillators subtrahiert, was bequem ist; letzteres bedeutet lediglich eine im $\lim \hbar \rightarrow 0$ verschwindende Umeichung der potentiellen Energie V^{11} .

Aus (7) folgt in bekannter Weise die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \Psi^* \Psi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\Psi^* v_k \Psi) \\ + \frac{\partial}{\partial v_k} \left[\frac{i \hbar \omega^2}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial v_k} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial v_k} \right) \right] = 0. \quad (8)$$

Mit den Definitionen

$$\varrho = \int \Psi^* \Psi dv_{123}, \quad j_k = \int \Psi^* v_k \Psi dv_{123} \quad (9)$$

für die Wahrscheinlichkeitsdichte bzw. den -strom im x -Raum besagt dies

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \text{div } j = 0.$$

Dadurch ist die Erhaltung der Normierung

$$\iint \Psi^* \Psi dx_{123} dv_{123} = 1$$

garantiert und die Möglichkeit, $\Psi^* \Psi$ die übliche Wahrscheinlichkeitsbedeutung beizulegen.

Beiläufig sei der zu (7) gehörige Drehimpulssatz erwähnt, welcher bei Abwesenheit eines Magnet-

felds und bei kugelsymmetrischem, elektrischen Feld gilt:

$$\frac{dM_{mn}}{dt} = \frac{i}{\hbar} (HM_{mn} - M_{mn}H) = 0$$

mit

$$M_{mn} = L_{mn} + S_{mn}, \quad (10)$$

$$L_{mn} = x_m p_n - x_n p_m, \quad S_{mn} = v_m s_n - v_n s_m.$$

H bedeutet den vollständigen Hamilton-Operator aus (7). L ist der gewöhnliche mechanische Drehimpuls einer Punktmasse, S stellt den spinartigen Zusatz dar, welchen das konservative Strahlungsfeld beisteuert und von dem eingangs die Rede war¹².

§ 2. Das kräftefreie Elektron

Ohne äußeres Feld ist p_k eine Konstante der Bewegung. Ist speziell $p_k = 0$ und der Oszillator im Grundzustand mit der Energie $E_{\text{osz}} = 0$, so folgt aus (7), daß auch die Energie des Teilchens verschwindet, und Ψ reduziert sich auf die Eigenfunktion des Oszillatorgrundzustands:

$$\Psi \sim \exp \left(-\frac{1}{4 v_0^2} v_k v_k \right) \quad (11)$$

mit der Abkürzung

$$v_0 = (\hbar \omega / 2m)^{1/2}. \quad (12)$$

Wenn $p_k \neq 0$ ist, schreiben wir statt (7)

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[V + \frac{1}{2m} P_k P_k - \frac{m}{2} \sum_k \left(v_k - \frac{P_k}{m} \right)^2 \right. \\ \left. - \frac{\omega^2}{2m} s_k s_k + \frac{3}{2} \hbar \omega \right] \Psi.$$

Ohne äußeres Feld kann p wieder als c-Zahl behandelt werden und wir erhalten analog zu (11) die Lösung

$$\Psi \sim \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(p_k x_k - \frac{p_k p_k}{2m} t \right) \right. \\ \left. - \frac{1}{4 v_0^2} \sum_k \left(v_k - \frac{p_k}{m} \right)^2 \right]. \quad (13)$$

Die mittlere Teilchengeschwindigkeit beträgt also $\bar{v}_k = p_k/m$. Dies zeigt, daß m wirklich die physikalische Bedeutung der Masse hat, etwa in der Nebelkammer gemessen aus Impuls und mittlerer Geschwindigkeit. Dasselbe kann man aus (13) auch herauslesen, indem man in der bekannten Weise für ein Wellenpaket die Gruppengeschwindigkeit im x -Raum berechnet. Sie beträgt \bar{p}_k/m , wo \bar{p} den mitt-

¹¹ Zusatz III bringt eine äußerlich andere Form der Grundgl. (7).

¹² Zusatz I enthält weitere Ausführungen über den Drehimpuls.

leren Impuls des Pakets bedeutet. Bemerkenswert ist, daß die Gruppengeschwindigkeit vom Zustand des Oszillators nicht abhängt; auch bei angeregtem Oszillator beobachtet man an dem Teilchen die Masse m . Dies ist typisch für die nichtrelativistische Theorie ($mc^2 = \infty$!); in der relativistischen Theorie hat man natürlich verschiedene Massen.

§ 3. Die tensorielle Form der Wellengleichung

Um die Variablen v aus der Wellengleichung zu entfernen, entwickeln wir Ψ nach den Oszillatoreigenfunktionen

$$H_{\text{osz}} \varphi^{(N)}(v) = E_{\text{osz}}^{(N)} \varphi^{(N)}(v). \quad (14)$$

N steht für das Quantenzahltripel des dreidimensionalen Oszillators; die $\varphi^{(N)}$ seien orthonormiert. Wir schreiben also

$$\Psi(r, t, v) = \sum_N \varphi^{(N)}(r, t) \varphi^{(N)}(v). \quad (15)$$

Indem wir dies in (7) eintragen und dabei ferner setzen

$$v_k \varphi^{(N')} = \sum_N v_k^{(N'N)} \varphi^{(N)} \quad (16)$$

$$\text{d. h.} \quad v_k^{(N'N)} = \int \varphi^{(N)*} v_k \varphi^{(N')} dv_{123}, \quad (17)$$

bekommen wir für die Funktionen $\varphi^{(N)}$ das Gleichungssystem

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varphi^{(N)}}{\partial t} = (V - E_{\text{osz}}^{(N)}) \varphi^{(N)} + \sum_{N'} v^{(N'N)} P_k \varphi^{(N')}. \quad (18)$$

Ein vollständiges Eigenfunktionssystem des dreidimensionalen, isotropen, harmonischen Oszillators erhält man am einfachsten durch Separation in kartesischen Koordinaten¹³:

$$\varphi^{(N)}(v) = \prod_k \varphi^{(N_k)}(v_k) \quad \text{mit } N_k = 0, 1, \dots, E_{\text{osz}}^{(N)} = \sum_k N_k \hbar \omega. \quad (19)$$

Dann ist bekanntlich

$$v_1^{(N'N)} = v_0 (\sqrt{N_1} \delta_{N'_1 N_1 - 1} + \sqrt{N_1 + 1} \delta_{N'_1 N_1 + 1}) \delta_{N'_2 N_2} \delta_{N'_3 N_3}, \text{ zykl.} \quad (20)$$

und wir haben nach (18)

$$\left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - V + \sum N_k \hbar \omega \right) \varphi^{(N_1 N_2 N_3)} = v_0 P_1 (\sqrt{N_1} \varphi^{(N_1 - 1 N_2 N_3)} + \sqrt{N_1 + 1} \varphi^{(N_1 + 1 N_2 N_3)}) + \text{zykl.} \quad (21)$$

¹³ Zusatz II behandelt die Separation in Polarkoordinaten.

Wie alsbald deutlich wird, können, wenn $\hbar \omega$ groß ist im Vergleich zur kinetischen Energie des Teilchens, die Größenordnungsbeziehungen

$$\psi^{(000)} \gg \psi^{(100)}, \psi^{(010)}, \psi^{(001)} \gg \psi^{(200)}, \psi^{(110)}, \dots \quad (22)$$

angenommen werden. Aus (21) entnehmen wir daher als *erste Näherung*

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - V \right) \psi^{(000)} \\ &= v_0 (P_1 \psi^{(100)} + P_2 \psi^{(010)} + P_3 \psi^{(001)}) \\ & \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - V + \hbar \omega \right) \psi^{(100)} \\ &= v_0 P_1 \psi^{(000)} + \dots, \text{ zykl.} \end{aligned} \quad (21')$$

In der zweiten Gleichung sind rechts Glieder mit $\psi^{(200)}$, usw. nicht angeschrieben. Wenn wir sie vernachlässigen, so ist konsequent auch links das Glied $(-\hbar \partial / i \partial t - V) \psi^{(100)}$ zu streichen. Dann ergibt sich direkt

$$\psi^{(100)} \approx \frac{v_0}{\hbar \omega} P_1 \psi^{(000)}, \text{ zykl.} \quad (23)$$

Setzen wir dies in die erste Gl. (21') ein, so kommt

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^{(000)}}{\partial t} = \left(V + \frac{v_0^2}{\hbar \omega} P_k P_k \right) \psi^{(000)}. \quad (24)$$

Wegen $v_0^2 / \hbar \omega = 1/2m$, vgl. (12), ist dies die gewöhnliche Schrödinger-Gleichung für die skalare Wellenfunktion $\psi^{(000)}(r, t)$.

Als *zweite Näherung* von (21) erhalten wir neben der ersten Gl. (21') die Beziehungen

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - V + \hbar \omega \right) \psi^{(100)} = v_0 [P_1 \psi^{(000)} \\ & \quad + \sqrt{2} \psi^{(200)} + P_2 \psi^{(110)} + P_3 \psi^{(101)}], \text{ zykl.,} \\ & \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - V + 2\hbar \omega \right) \psi^{(200)} = v_0 P_1 \sqrt{2} \psi^{(100)} + \dots, \\ & \quad \text{zykl.,} \quad (21'') \\ & \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - V + 2\hbar \omega \right) \psi^{(110)} \\ & \quad = v_0 (P_1 \psi^{(010)} + P_2 \psi^{(100)}) + \dots, \text{ zykl.} \end{aligned}$$

Wir bemerken nun, daß sich die Funktionen $\varphi^{(N_1 N_2 N_3)}$ mit konstanter Indexsumme N bei Drehung des x -Koordinatensystems bis auf einfache Zahlenfaktoren wie die Komponenten eines symmetrischen Tensors N -ter Stufe transformieren. Wir zeigen dies bis $N = 2$. Eine orthogonale Transformation der $x_{1,2,3}$ soll stets mit der gleichartigen Transformation der $v_{1,2,3}$ verknüpft sein, so daß der Hamilton-Operator in (7) forminvariant ist. Dann ist $\Psi(r, t, v)$ ein Skalar. Nun lautet unser Ansatz (15) ausführlich

$$\Psi = \psi^{(000)} \varphi^{(000)} + [\psi^{(100)} \varphi^{(100)} + \dots] \quad (15a)$$

$$+ [\psi^{(200)} \varphi^{(200)} + \dots + \psi^{(110)} \varphi^{(110)} + \dots] + \dots$$

Der Transformationscharakter der $\varphi^{(N_1 N_2 N_3)}$ ist jedoch schon festgelegt. Für die in kartesischen Koordinaten separierten, normierten Eigenfunktionen des harmonischen isotropen Oszillators gilt ja

$$\varphi^{(000)} = (\sqrt{2\pi} v_0)^{-3/2} \exp(-v_k v_k / 4 v_0^2) = \varphi;$$

$$\varphi^{(100)} = \varphi v_1 / v_0, \text{ usw.};$$

$$\varphi^{(200)} = \varphi (v_1^2 / v_0^2 - 1) / \sqrt{2};$$

$$\varphi^{(110)} = \varphi v_1 v_2 / v_0^2, \text{ usw.} \quad (25)$$

Also sind

$$\varphi = \varphi^{(000)} \text{ ein Skalar,}$$

$$\varphi_1 = \varphi^{(100)} \text{ usw. die Komponenten eines Vektors,}$$

$$\varphi_{11} = \sqrt{2} \varphi^{(200)} + \varphi, \varphi_{12} = \varphi^{(110)} \text{ usw. die Komponenten eines symmetrischen Tensors 2. Stufe.}$$

Wir setzen die Tensorgrößen $\varphi, \varphi_k, \varphi_{kl}$ in (15a) ein und erhalten

$$\Psi = \left[\psi^{(000)} - \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi^{(200)} + \dots) \right] \varphi + [\psi^{(100)} \varphi_1 + \dots]$$

$$+ \left[\frac{1}{2} \sqrt{2} (\psi^{(200)} \varphi_{11} + \dots) + \psi^{(110)} \varphi_{12} + \dots \right] + \dots$$

Da Ψ ein Skalar ist, sind also

$$\psi = \psi^{(000)} \text{ ein Skalar,}$$

$$\psi_1 = \psi^{(100)} \text{ usw. die Komponenten eines Vektors,}$$

$$\psi_{11} = \sqrt{2} \psi^{(200)}, \psi_{12} = \psi^{(110)} \text{ usw. die Komponenten eines symmetrischen Tensors 2. Stufe.} \quad (26)$$

Mit diesen Größen schreibt sich (15a) in der Form

$$\Psi = \left(\psi - \frac{1}{2} \psi_{kk} \right) \varphi + \psi_k \varphi_k + \frac{1}{2} \psi_{kl} \varphi_{kl} + \dots \quad (27)$$

Jetzt gehen wir mit den neuen Größen (26) in die Gln. (21'') ein und erhalten diese in der übersichtlichen tensoriellen Form

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = V \psi + v_0 P_k \psi_k$$

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi_k}{\partial t} = (V - \hbar \omega) \psi_k + v_0 (P_k \psi + P_l \psi_{kl}) \quad (28)$$

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi_{kl}}{\partial t} = (V - 2 \hbar \omega) \psi_{kl} + v_0 (P_k \psi_l + P_l \psi_k + \dots).$$

$$\dots$$

Diese Gleichungen zeigen nochmals die enge Verknüpfung der durch $\psi, \psi_k, \psi_{kl}, \dots$ beschriebenen Zustände verschiedenen „Spins“ [im Sinne des spinartigen Zusatzes S zum Drehimpuls (10)]. Nur durch den Grenzübergang $\omega \rightarrow \infty$ werden sie scharf voneinander isoliert. Wir sahen ja bereits oben, Gl. (24), daß durch $\omega \rightarrow \infty$ exakt die gewöhnliche Schrödinger-Gleichung für das Elektron mit Spin 0 entsteht. Wir können aus (28) durch denselben Grenzübergang aber ebenso auch ein nichtrelativistisches, punktförmiges Teilchen mit der Masse m und dem Spin 1, usw. herausholen. Dazu brauchen wir nur statt (22) die Annahme $\psi \ll \psi_k \gg \psi_{kl} \gg \dots$, usw. zu machen und, zur Erhöhung der Übersichtlichkeit, in (28) V in $V + \hbar \omega$, usw. umzuzeichnen. Die Frage der Spinteilchen soll aber in dieser Arbeit beiseite gelassen werden.

Um auf die besagte zweite Näherung zu kommen, vernachlässigen wir die in der dritten Gl. (28) nicht angeschriebenen Glieder, welche einen Tensor 3. Stufe enthalten, streichen konsequent auch die Glieder $-\hbar \partial \psi_{kl} / i \partial t, V \psi_{kl}$ und haben somit

$$\psi_{kl} \approx \frac{v_0}{2 \hbar \omega} (P_k \psi_l + P_l \psi_k). \quad (29)$$

Dies setzen wir in die erste und zweite Gl. (28) und erhalten die gewünschte zweite Näherung

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = V \psi + v_0 P_k \psi_k,$$

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi_k}{\partial t} = (V - \hbar \omega) \psi_k + v_0 P_k \psi$$

$$+ \frac{1}{4m} P_l (P_k \psi_l + P_l \psi_k). \quad (30)$$

Dies ist die auf die gewöhnliche Schrödinger-Gleichung (24) folgende nächste Approximation. Beiläufig sei erwähnt, daß, ebenso wie die exakte Grundgleichung (7) und wie (24), auch (30) die Anforderungen der Hermitezität erfüllt.

Zum Schluß sollen noch Dichte und Strom aus (9) durch die neuen Tensorgrößen ausgedrückt werden. Aus (9), (15) und (26) folgt

$$\varrho = \sum_N \psi^{(N)*} \psi^{(N)} = \psi^* \psi + \psi_k^* \psi_k + \frac{1}{2} \psi_{kl}^* \psi_{kl} + \dots \quad (31)$$

Aus (9), (15), (16), (20) und (26) folgt ferner

$$\dot{j}_k = \sum_{NN'} v_k^{(N'N)} \psi^{(N)*} \psi^{(N')} = v_0 (\psi^* \psi_k + \psi \psi_k^* + \psi_l^* \psi_{kl} + \psi_l \psi_{kl}^* + \dots). \quad (32)$$

In erster Näherung ergeben sich daraus mittels (23) die bekannten Ausdrücke

$$\varrho = \psi^* \psi, \quad \dot{j}_k = \frac{1}{2m} [\psi^* P_k \psi + \psi (P_k \psi)^*].$$

Die Frage, wie weit man den Stromausdruck (32), entsprechend auf Übergänge angewandt, zur halb-klassischen Berechnung der Ausstrahlung benutzen kann, muß hier unerörtert bleiben.

§ 4. Wasserstoffproblem. Lambshift

Es sei kein Magnetfeld vorhanden; die diesbezüglichen Effekte sollen bei späterer Gelegenheit behandelt werden. Dementsprechend werde P durch p ersetzt, vgl. (5). Wir betrachten die stationären Zustände und haben nach (30) also für den Energieeigenwert E die Gleichungen

$$\begin{aligned} (V - E) \psi + v_0 p_k \psi_k &= 0, \\ (V - E - \hbar\omega) \psi_k + v_0 p_k \psi \\ &+ \frac{1}{4m} (p_k p_l \psi_l + p_l p_k \psi_k) = 0. \end{aligned} \quad (33)$$

Da (33) nur eine Näherung darstellt, hat es keinen Zweck, sich um eine exakte Lösung zu bemühen. Wir wenden ein Störungsverfahren an. Aus der zweiten Gl. (33) entnehmen wir zunächst wieder die Näherung (23) $\psi_k \approx (v_0/\hbar\omega) p_k \psi$ und setzen diese in die kleinen Glieder der zweiten Gl. (33), d. s. die Glieder ohne ω und v_0 , ein:

$$\begin{aligned} -\hbar\omega \psi_k + v_0 p_k \psi \\ + \frac{v_0}{\hbar\omega} \left[(V - E) p_k + \frac{1}{2m} p_k p_l p_l \right] \psi \approx 0. \end{aligned}$$

Nun ist

$$V p_k = p_k V - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial V}{\partial x_k},$$

so daß sich als Verbesserung von (23) zunächst ergibt

$$\psi_k \approx \frac{v_0}{\hbar\omega} p_k \psi + \frac{v_0}{(\hbar\omega)^2} \left[-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial V}{\partial x_k} + p_k (H^{(S)} - E) \right] \psi.$$

Dabei wurde die Abkürzung

$$H^{(S)} = \frac{1}{2m} p_l p_l + V$$

für den gewöhnlichen Schrödinger-Operator benutzt. Man wird aber konsequent in dem zu $v_0/(\hbar\omega)^2$

proportionalen Verbesserungsglied statt ψ die Lösung $\psi^{(S)}$ der gewöhnlichen Schrödinger-Gleichung einsetzen und statt E den Wert $E^{(S)}$. Wegen

$$(H^{(S)} - E^{(S)}) \psi^{(S)} = 0$$

erhalten wir somit einfach

$$\psi_k \approx \frac{v_0}{\hbar\omega} \left(p_k \psi + \frac{i}{\omega} \frac{\partial V}{\partial x_k} \psi^{(S)} \right). \quad (34)$$

Dies tragen wir in die erste Gl. (33) ein:

$$\left(V - E + \frac{v_0^2}{\hbar\omega} p_k p_k \right) \psi + \frac{v_0^2}{\hbar\omega} \frac{i}{\omega} p_k \frac{\partial V}{\partial x_k} \psi^{(S)} \approx 0$$

oder wegen (12) auch

$$H^{(S)} \psi + \frac{i}{2m\omega} p_k \frac{\partial V}{\partial x_k} \psi^{(S)} \approx E \psi. \quad (35)$$

Diese inhomogene Gleichung hat offenbar die gestörten Eigenwerte

$$E \approx E^{(S)} + \frac{1}{2m\omega} \int \psi^{(S)*} i p_k \frac{\partial V}{\partial x_k} \psi^{(S)} dx_{123}, \quad (36)$$

wenn wir $\psi^{(S)}$ als normiert voraussetzen.

Wir formen (36) noch etwas um. Der Operator

$$\begin{aligned} i p_k \frac{\partial V}{\partial x_k} &= \frac{i}{2} \left(p_k \frac{\partial V}{\partial x_k} - \frac{\partial V}{\partial x_k} p_k \right) \\ &+ \frac{i}{2} \left(p_k \frac{\partial V}{\partial x_k} + \frac{\partial V}{\partial x_k} p_k \right) \\ &= \frac{\hbar}{2} \Delta V + \frac{i}{2} \left(p_k \frac{\partial V}{\partial x_k} + \frac{\partial V}{\partial x_k} p_k \right) \end{aligned}$$

besteht aus einem hermiteschen und einem antihermiteschen Anteil. Der nach (36) zu bildende Mittelwert des letzteren verschwindet aber identisch:

$$\begin{aligned} &\frac{i}{2} \int \psi^{(S)*} \left(p_k \frac{\partial V}{\partial x_k} + \frac{\partial V}{\partial x_k} p_k \right) \psi^{(S)} dx_{123} \\ &= i \int \frac{\partial V}{\partial x_k} \frac{1}{2m} \left[(p_k \psi^{(S)})^* \psi + \psi^{(S)*} p_k \psi^{(S)} \right] dx_{123} \\ &= i \int \frac{\partial V}{\partial x_k} \dot{j}_k^{(S)} dx_{123} = -i \int V \operatorname{div} \dot{j}^{(S)} dx_{123} = 0, \end{aligned}$$

da ja für den stationären Zustand $\operatorname{div} \dot{j} = 0$ gilt. Daß dieser Mittelwert verschwindet, liegt in der Natur der Sache: das Ausgangsproblem (7) und auch noch (33) erfüllen die Forderung der Hermitezität; das Auftreten des antihermiteschen Terms rührt von unserem Störungsverfahren her. Statt (36) haben wir somit endgültig¹⁴

$$E - E^{(S)} = \delta E = \frac{\hbar}{4m\omega} \int \psi^{(S)*} \Delta V \psi^{(S)} dx_{123}. \quad (37)$$

¹⁴ Im Zusatz III gewinnen wir (37) nochmals auf andere Weise.

Für ein wasserstoffähnliches Atom mit $V = -Z e^2/r$, $\Delta V = 4\pi Z e^2 \delta(r)$ hat man nach (37)

$$\delta E = \frac{\pi Z e^2 \hbar}{m \omega} (\psi^{(S)*} \psi^{(S)})_{r=0}. \quad (38)$$

Die Funktionen $\psi^{(S)}$ verschwinden alle am Kernort $r = 0$ mit Ausnahme der zu den S-Zuständen ($l = 0$) gehörigen. Für diese ist $(\psi^{(S)*} \psi^{(S)})_{r=0} = (Z/na)^3 \pi$, wo n die Hauptquantenzahl, $a = \hbar^2/m e^2$ ist. Wir schreiben

$$I = \frac{1}{2} \frac{e^2}{a}, \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$$

für die Ionisierungsenergie des Wasserstoffs und die Feinstrukturkonstante. Die S-Niveaus werden also angehoben um

$$\delta E_{l=0} = I \frac{2m e^2}{\hbar \omega} \frac{\alpha^2 Z^4}{n^3}. \quad (39)$$

§ 5. Diskussion

Unser Ergebnis (39) für die Lambshift stimmt, was die Abhängigkeit von Z und n betrifft, mit der Erfahrung¹⁵ und dem Ergebnis der Quantenelektrodynamik¹⁶ überein. Auch das Vorzeichen ist richtig und eindeutig bestimmt. Daß nur die S-Zustände geändert werden, war nach (1) von vornherein zu erwarten: nur für die klassischen Pendelbahnen nimmt \ddot{x} große Werte an.

Wir haben die Lambshift auf sehr einfachem Weg berechnet, können jedoch im Rahmen unserer nichtrelativistischen Quantenmechanik keine Aussage über den Absolutwert machen, da die Kenntnis der phänomenologischen Konstanten ω fehlt. Nach dem Experiment und der Quantenelektrodynamik ist

$$\delta E_{l=0} = I \cdot 6,5 \frac{\alpha^2 Z^4}{n^3}.$$

Um (39) damit übereinstimmen zu lassen, hätte man $\hbar\omega = 42 mc^2$ zu wählen. Nach der klassischen Gl. (2), mit $f = 1$, würde daraus als Elektronenradius $b = 10 (e^2/mc^2)$ folgen. Ein solcher ad hoc angenommener Radius ist unbefriedigend, zumal wenn man sich vergegenwärtigt, daß aus der Quan-

tenelektrodynamik der Absolutwert der Lambshift ausschließlich mittels der universellen Konstanten folgt. Unser Elektronenradius ist aus einem weiteren Grund nicht ernst zu nehmen. Mit dem obigen Wert von $\hbar\omega$ ergibt sich nach (12) $v_0 = 4,6 c$. Für die mittlere Schwankung der Geschwindigkeit im Grundzustand der Zitterbewegung gilt aber $(\overline{v_1^2})^{1/2} = v_0$. Nimmt man für $\hbar\omega$ einen so kleinen Wert an, daß $v_0 \ll c$ wird, so käme die Lambshift viel zu groß heraus. Daran ändert auch die Berücksichtigung noch höherer Zeitableitungen in (1) nichts¹⁷. Wir hätten also überhaupt das ganze Problem relativistisch behandeln sollen. Es ist möglich, eine relativistische Quantenmechanik des Elektrons im engen Anschluß an die Methode dieser Arbeit zu entwickeln. Jedoch kann noch nicht gesagt werden, ob damit eine Absolutberechnung der Lambshift gelingt mit einem plausiblen Wert für den Elektronenradius. Es hat den Anschein, als ob aus der nächstliegenden relativistischen Verallgemeinerung selbst mit $b \rightarrow 0$ die Lambshift noch zu groß herauskommt. Auch weitere Fragen wie die nach einer analogen Mechanik für das Spinelektron, welche außer zur Lambshift zu der Korrektur des magnetischen Moments führen sollte, müssen hier offen bleiben.

Zusätze

I. Bemerkungen zum Drehimpuls

Wir untersuchen, wie der Drehimpulsoperator $M = L + S$ aus (10), der auf die Wellenfunktion Ψ wirkt, sinngemäß für die Tensorgrößen ψ , ψ_k , ψ_{kl} aus (26) zu definieren ist. Wir entwickeln zunächst Ψ gemäß (15) und (19). Aus den bekannten Beziehungen

$$v_1 \varphi^{(N_1)} = v_0 (\sqrt{N_1} \varphi^{(N_1-1)} + \sqrt{N_1+1} \varphi^{(N_1+1)}),$$

$$\frac{\partial \varphi^{(N_2)}}{\partial v_2} = \frac{1}{2v_0} (\sqrt{N_2} \varphi^{(N_2-1)} - \sqrt{N_2+1} \varphi^{(N_2+1)})$$

ergibt sich

$$S_{mn} \varphi^{(N')} = \sum_N S_{mn}^{(N'N)} \varphi^{(N)}, \quad (40)$$

wobei

$$S_{12}^{(N'N)} = \frac{\hbar}{i} [\sqrt{N_1(N_2+1)} \delta_{N'_1 N_1-1} \delta_{N'_2 N_2+1} - \sqrt{(N_1+1)N_2} \delta_{N'_1 N_1+1} \delta_{N'_2 N_2-1}] \delta_{N'_3 N_3}, \text{ zykl.}$$

¹⁵ S. d. Bericht W. E. Lamb jr., Rep. Progr. Physics (London, Physic. Society) **14**, 19 [1951].

¹⁶ H. A. Bethe, Physic. Rev. **72**, 339 [1947].

¹⁷ Im Zusatz IV wird der Einfluß von $d^6 x/dt^6$ berechnet.

Für den Mittelwert ist dann

$$\bar{M}_{mn} = \iint \Psi^* (L_{mn} + S_{mn}) \Psi \, dx_{123} \, dv_{123} = \sum_N \int \psi^{(N)*} L_{mn} \psi^{(N)} \, dx_{123} + \sum_{N,N'} S_{mn}^{(N',N)} \int \psi^{(N)*} \psi^{(N')} \, dx_{123}.$$

Führt man darin die Tensorgrößen aus (26) ein und berücksichtigt deren Symmetrie, so findet man

$$\bar{M}_{mn} = \int (\psi^* M_{mn}^{(x)} \psi + \psi_k^* M_{mn}^{(x)} \psi_k + \frac{1}{2} \psi_{kl}^* M_{mn}^{(x)} \psi_{kl} + \dots) \, dx_{123}, \quad (41)$$

wobei die auf $\psi, \psi_k, \psi_{kl}, \dots$ wirkenden Operatoren $M^{(x)}$ die Bedeutung haben

$$\begin{aligned} M_{mn}^{(x)} \psi &= L_{mn} \psi, \\ M_{mn}^{(x)} \psi_k &= L_{mn} \psi_k + \frac{\hbar}{i} (\delta_{km} \psi_n - \delta_{kn} \psi_m), \\ M_{mn}^{(x)} \psi_{kl} &= L_{mn} \psi_{kl} + \frac{\hbar}{i} (\delta_{km} \psi_{nl} + \delta_{lm} \psi_{kn} - \delta_{kn} \psi_{ml} - \delta_{ln} \psi_{km}), \\ &\dots \end{aligned} \quad (42)$$

Damit haben wir die sinngemäße Definition des Drehimpulsoperators im System unserer Tensorgrößen. Die Operatoren $M^{(x)}$ sind, bis auf den Faktor \hbar/i , in der Tat nichts anderes als die zu $\psi, \psi_k, \psi_{kl}, \dots$ gehörigen Operatoren der infinitesimalen Drehung; wir haben sie übrigens so geschrieben, daß dies auch für unsymmetrische Tensoren gilt.

II. Polarkoordinaten im v -Raum

Das Eigenfunktionssystem (19) gibt es nur beim harmonischen Oszillator. In der relativistischen Theorie hat man es mit einem isotropen anharmonischen Oszillator zu tun. Zu deren Vorbereitung soll daher die Separation in Polarkoordinaten angedeutet werden, obwohl diese mehr Rechenaufwand erfordert als die Methode aus § 3. Wir werden erst am Schluß dieses Zusatzes auf den harmonischen Oszillator spezialisieren.

Die Entwicklung (15) lautet nun also

$$\Psi = \sum_{N_v L M} \psi^{(N_v L M)} X_{N_v L}(v) Y_{LM}(\Theta, \Phi), \quad (43)$$

wo $v = (v_k v_k)^{1/2}$, Θ, Φ die Polarkoordinaten im v -Raum, N_v die radiale, L und M die angularen Quantenzahlen, X die normierten Radialfunktionen und Y die normierten Kugelflächenfunktionen sind. Den Energieeigenwert des Oszillators nennen wir $E_{\text{osz}}^{(N_v L)}$. Für die Matrizen (17) gilt¹⁸

$$v_k^{(N'N)} = v_- A_k \delta_{L' L-1} + v_+ B_k \delta_{L' L+1}. \quad (44)$$

Dabei ist

$$v_{\pm} = v (N'_v L \pm 1; N_v L) = \int_0^\infty X_{N'_v L}^* X_{N_v L} v^3 \, dv \quad (44')$$

und für die A, B gilt

$$\begin{aligned} A_1 \pm i A_2 &= \pm 2 a_{L \mp M} \delta_{M' M \mp 1}, \quad A_3 = b_{LM} \delta_{M' M}, \\ B_1 \pm i B_2 &= \mp 2 a_{L \pm 1, \pm M-1} \delta_{M' M \mp 1}, \\ B_3 &= b_{L+1 M} \delta_{M' M} \end{aligned} \quad (44'')$$

$$\begin{aligned} \text{mit} \quad a_{LM} &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{(L-M-1)(L-M)}{(2L-1)(2L+1)}}, \\ b_{LM} &= \sqrt{\frac{(L-M)(L+M)}{(2L-1)(2L+1)}}. \end{aligned} \quad (44''')$$

Trägt man dies in (18) ein, so erhält man als Analogon von (21)

$$\begin{aligned} &\left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - V + E_{\text{osz}}^{(N_v L)} \right) \psi^{(N_v L M)} \\ &= \sum_{N'_v} [(P_1 + i P_2) (-v_- a_{LM} \psi^{(N'_v L-1 M+1)} + v_+ a_{L+1, -M-1} \psi^{(N'_v L+1 M+1)}) \\ &\quad + (P_1 - i P_2) (v_- a_{L-M} \psi^{(N'_v L-1 M-1)} - v_+ a_{L+1 M-1} \psi^{(N'_v L+1 M-1)}) \\ &\quad + P_3 (v_- b_{LM} \psi^{(N'_v L-1 M)} + v_+ b_{L+1 M} \psi^{(N'_v L+1 M)})]. \end{aligned} \quad (45)$$

¹⁸ S. z. B. A. Sommerfeld, Atombau u. Spektrallinien II. Bd., Vieweg, Braunschweig 1939, S. 74.

Um zur Tensorschreibweise von (45) zu gelangen, ersetzen wir in der Entwicklung (43) die Funktionen Y durch ihre Ausdrücke in kartesischen Koordinaten¹⁹

$$\begin{aligned} Y_{00} &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}}; \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \frac{v_3}{\sqrt{2}v}, \\ Y_{1\pm 1} &= \pm \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \frac{v_1 \pm i v_2}{2v}; \quad Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{8\pi}} \frac{3v_3^2 - v^2}{\sqrt{2}v^2}, \\ Y_{2\pm 1} &= \pm \sqrt{\frac{5}{8\pi}} \frac{\sqrt{3}v_3(v_1 \pm i v_2)}{v^2}, \\ Y_{2\pm 2} &= \sqrt{\frac{5}{8\pi}} \frac{\sqrt{3}(v_1 \pm i v_2)^2}{2v^2}. \end{aligned}$$

Man findet dann, daß sich die $\psi^{(N_v LM)}$ wie folgt durch die Komponenten irreduzibler Tensoren $\psi^{(N_v)}$, $\psi_k^{(N_v)}$, $\psi_{kl}^{(N_v)}$ (symmetrisch, Spur = 0) ausdrücken lassen:

$$\begin{aligned} \psi^{(N_v 00)} &= 2\sqrt{\pi} \psi^{(N_v)}, \\ \psi^{(N_v 10)} &= \sqrt{\frac{2\pi}{3}} \cdot \sqrt{2} \psi_3^{(N_v)}, \\ \psi^{(N_v 1\pm 1)} &= \sqrt{\frac{2\pi}{3}} \cdot (\pm \psi_1^{(N_v)} - i \psi_2^{(N_v)}), \\ \psi^{(N_v 20)} &= \sqrt{\frac{8\pi}{5}} \cdot \frac{1}{2\sqrt{2}} \psi_{33}^{(N_v)}, \\ \psi^{(N_v 2\pm 1)} &= \sqrt{\frac{8\pi}{5}} \cdot \frac{1}{2\sqrt{3}} (\pm \psi_{31}^{(N_v)} - i \psi_{23}^{(N_v)}), \\ \psi^{(N_v 2\pm 2)} &= \sqrt{\frac{8\pi}{5}} \cdot \frac{1}{2\sqrt{3}} \left(\psi_{11}^{(N_v)} + \frac{1}{2} \psi_{33}^{(N_v)} \mp i \psi_{12}^{(N_v)} \right). \end{aligned} \quad (46)$$

Die Entwicklung (43) schreibt sich damit so

$$\begin{aligned} \Psi &= \sum_{N_v} \left[\psi^{(N_v)} X_{N_v 0} + \psi_k^{(N_v)} X_{N_v 1} \frac{v_k}{v} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \psi_{kl}^{(N_v)} X_{N_v 2} \left(\frac{v_k v_l}{v^2} - \frac{1}{3} \delta_{kl} \right) + \dots \right] \end{aligned} \quad (47)$$

und Einsetzen in (45) ergibt als Analogon von (28)

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - V + E_{\text{osz}}^{(N_v 0)} \right) \psi^{(N_v)} &= \frac{1}{3} \sum_{N_v'} v(N_v' 1; N_v 0) P_k \psi_k^{(N_v')} \\ \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - V + E_{\text{osz}}^{(N_v 1)} \right) \psi_k^{(N_v)} &= \sum_{N_v'} \left[v(N_v' 0; N_v 1) P_k \psi^{(N_v')} + \frac{1}{5} v(N_v' 2; N_v 1) P_l \psi_{kl}^{(N_v')} \right] \\ \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - V + E_{\text{osz}}^{(N_v 2)} \right) \psi_{kl}^{(N_v)} &= \sum_{N_v'} v(N_v' 1; N_v 2) (P_k \psi_l^{(N_v')} + P_l \psi_k^{(N_v')} - \frac{2}{3} \delta_{kl} P_j \psi_j^{(N_v')}) + \dots, \text{ usw.} \end{aligned} \quad (48)$$

Soweit sind unsere Betrachtungen allgemein; das System (48) wird in der relativistischen Theorie benötigt werden.

Beim harmonischen Oszillator ist

$$E_{\text{osz}}^{(N_v L)} = (2N_v + L) \hbar \omega, \quad X_{N_v L} = \varphi \frac{1}{2N_v + L} \left[\frac{\pi N_v!}{(N_v + L)! N_v!} \right]^{1/2} \varrho^L \left(\frac{d}{2\varrho d\varrho} \right)^L \frac{H_{N_v}^*}{\varrho},$$

wo $N^* = 2(N_v + L) + 1$, $\varrho = v/\sqrt{2} v_0$ und H die Hermiteschen Polynome bezeichnet. Wegen v_0 und φ s. (12) und (25). Es ist also

$$X_{00} = \sqrt{4\pi} \varphi, \quad X_{01} = X_{00} v/\sqrt{3} v_0, \quad X_{02} = X_{00} v^2/\sqrt{15} v_0^2, \quad X_{10} = X_{00} (v^2/v_0^2 - 3)/\sqrt{6}.$$

Ferner gilt²⁰

$$\begin{aligned} v_- &= \sqrt{2} v_0 \left(\sqrt{N_v + L + \frac{1}{2}} \delta_{N_v' N_v} + \sqrt{N_v + 1} \delta_{N_v' N_v + 1} \right), \\ v_+ &= \sqrt{2} v_0 \left(\sqrt{N_v} \delta_{N_v' N_v - 1} + \sqrt{N_v + L + \frac{3}{2}} \delta_{N_v' N_v} \right). \end{aligned} \quad (49)$$

Führen wir also neue reduzible Tensorgrößen ψ , ψ_k , ψ_{kl} (symmetrisch, Spur $\neq 0$) ein durch

$$\psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \psi, \quad \psi_k^{(0)} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \psi_k, \quad \psi_{kl}^{(0)} = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} \left(\psi_{kl} - \frac{1}{3} \delta_{kl} \psi_{jj} \right), \quad \psi^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{24\pi}} \psi_{jj}, \quad (50)$$

so wird (47) identisch mit (27). ψ , ψ_k , ψ_{kl} sind also genau unsere früheren Tensorgrößen und tatsächlich zeigt man, daß (48) bei Verwendung von (49) und (50) mit dem früheren Gleichungssystem (28) übereinstimmt.

¹⁹ S. z. B. H. A. Bethe, Handb. d. Physik Bd. XXIV, 1, Springer, Berlin 1933, S. 275.

²⁰ Die Ausdrücke (49) habe ich, da mir keine Literaturstelle bekannt war, für den Zweck dieser Arbeit berechnet.

III. Eine kanonische Transformation der Grundgleichung (7)

Wir wollen den Hamilton-Operator in (7), welcher bilinear in \mathfrak{P} , \mathfrak{v} und \mathfrak{s} ist, durch eine linear-homogene kanonische Transformation auf Normalform bringen, derart, daß er neben V nur rein quadratische Glieder enthält. Man kann diese Transformation nach dem systematischen Hauptachsenverfahren finden. Wir lesen sie aber einfacher sofort aus der folgenden Umformung ab:

$$H = V + \mathfrak{v} \mathfrak{P} - H_{\text{osz}} = V(\mathfrak{r}, t) \quad (51)$$

$$+ \frac{1}{2m} \mathfrak{P}^2 - \frac{1}{2m} (\mathfrak{P} - m\mathfrak{v})^2 - \frac{\omega^2}{2m} \mathfrak{s}^2 + \frac{3}{2} \hbar \omega.$$

Bisher wurden \mathfrak{r} , \mathfrak{v} und \mathfrak{p} , \mathfrak{s} als Koordinaten und Impulse aufgefaßt. Wir wollen jetzt \mathfrak{r} , $-\mathfrak{s}$ und \mathfrak{p} , \mathfrak{v} als Koordinaten und Impulse wählen. (51) legt dann die folgende (Punkt-) Transformation von \mathfrak{p} , \mathfrak{v} in die neuen Impulse \mathfrak{p}_0 , \mathfrak{p}_1 nahe:

$$\mathfrak{p}_0 = \mathfrak{p}$$

$$\mathfrak{p}_1 = \mathfrak{p} - m\mathfrak{v}. \quad (52a)$$

Die entsprechende Transformation der Koordinaten ist kontragredient hierzu zu wählen:

$$\mathfrak{r} = \mathfrak{r}_0 + \mathfrak{r}_1$$

$$-\mathfrak{s} = -m\mathfrak{r}_1. \quad (52b)$$

Damit kommt als umgeformter Hamilton-Operator

$$H = V(\mathfrak{r}_0 + \mathfrak{r}_1, t) + \frac{1}{2m} \mathfrak{P}_0^2 - H'_{\text{osz}} \quad (53)$$

mit

$$H'_{\text{osz}} = \frac{1}{2m} \mathfrak{P}_1^2 + \frac{m\omega^2}{2} \mathfrak{r}_1^2 - \frac{3}{2} \hbar \omega.$$

Das besagt: Ein Massenpunkt m mit der kinetischen Energie $\mathfrak{P}_0^2/2m$ und ein isotroper harmonischer Oszillator (mit ruhendem Zentrum und negativer Masse) sind vorhanden; das elektrische Potential wirkt nur auf die Punktmasse, jedoch mit seinem Wert am Ort $\mathfrak{r}_0 + \mathfrak{r}_1$; das Magnetfeld greift auch an dem Oszillator an.

Mittels (53) wird die Berechnung der Lambshift besonders einfach. Es ist

$$V(\mathfrak{r}_0 + \mathfrak{r}_1, t) = V_0 + \frac{\partial V}{\partial x_k} x_{1,k}$$

$$+ \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial x_k \partial x_l} x_{1,k} x_{1,l} + \dots$$

Die Größen V_0 , $\partial V/\partial x_k$, ... rechts sind also an der Stelle \mathfrak{r}_0 gemeint. Wir setzen

$$V(\mathfrak{r}_0 + \mathfrak{r}_1, t) = V_0 + \delta V$$

und fassen δV als Störung auf. Magnetfeld sei nicht vorhanden. Für die zu (53) gehörige ungestörte Wellenfunktion gilt dann

$$\Psi_0(\mathfrak{r}_0, \mathfrak{r}_1, t) = \psi^{(S)}(\mathfrak{r}_0, t) \varphi(\mathfrak{r}_1),$$

wo $\psi^{(S)}$ die gewöhnliche Schrödingersche Wellenfunktion und

$\varphi = (\sqrt{2\pi}a)^{-3/2} \exp(-\mathfrak{r}_1^2/4a^2)$ mit $a = (\hbar/2m\omega)^{1/2}$ die Eigenfunktion des Oszillatorgrundzustands bedeutet. Für den gestörten Energieeigenwert gilt somit ($d\mathfrak{r}_0 = \Pi d\mathfrak{x}_{0,k}$)

$$E - E^{(S)} = \delta E = \int \int \Psi_0^* \delta V \Psi_0 d\mathfrak{r}_0 d\mathfrak{r}_1.$$

Wegen

$$\int \varphi^* x_{1,k} \varphi d\mathfrak{r}_1 = 0, \quad \int \varphi^* x_{1,k} x_{1,l} \varphi d\mathfrak{r}_1 = \delta_{kl} a^2$$

ist also

$$\delta E = \frac{\hbar}{4m\omega} \int \psi^{(S)*} \frac{\partial^2 V}{\partial x_k \partial x_k} \psi^{(S)} d\mathfrak{r}_0.$$

Damit haben wir wieder (37). — Die Methode dieses Zusatzes läßt sich wohl nicht in die relativistische Theorie übertragen, während das Verfahren des Hauptteils, gemäß Zusatz II abgewandelt, hierfür brauchbar ist.

IV. Bewegungsgleichung mit Zeitableitungen bis zur 6. Ordnung

Es soll die auf (3) folgende nächste Approximation behandelt werden:

$$m \frac{d^2}{dt^2} \left(1 + \frac{1}{\omega_1^2} \frac{d^2}{dt^2} \right) \left(1 + \frac{1}{\omega_2^2} \frac{d^2}{dt^2} \right) \mathfrak{r} = \mathfrak{F}. \quad (54)$$

Damit die Reihenfolge der Faktoren festliegt, sei $\omega_1 < \omega_2$ angenommen. Die zugehörige Lagrange-funktion lautet

$$L = \frac{m}{2} \left[\mathfrak{v}^2 - \left(\frac{1}{\omega_1^2} + \frac{1}{\omega_2^2} \right) \mathfrak{b}^2 + \frac{1}{\omega_1^2 \omega_2^2} \dot{\mathfrak{b}}^2 \right]$$

$$- e\Phi + \frac{e}{c} \mathfrak{A} \mathfrak{v},$$

wo $\mathfrak{v} = \dot{\mathfrak{r}}$, $\mathfrak{b} = \ddot{\mathfrak{r}}$. Mit den Koordinaten \mathfrak{r} , \mathfrak{v} , \mathfrak{b} und den Impulsen \mathfrak{p} , \mathfrak{s} , \mathfrak{a} ($= \partial L/\partial \dot{\mathfrak{b}}$) ergibt sich, unter Subtraktion der Oszillatoren-Nullpunktsenergie, der Hamilton-Operator

$$H = V + \mathfrak{v} \mathfrak{P} + \bar{H}$$

mit

$$\bar{H} = \mathfrak{b} \mathfrak{s} - \frac{m}{2} \left[\mathfrak{v}^2 - \left(\frac{1}{\omega_1^2} + \frac{1}{\omega_2^2} \right) \mathfrak{b}^2 \right]$$

$$+ \frac{\omega_1^2 \omega_2^2}{2m} \mathfrak{a}^2 + \frac{3}{2} \hbar (\omega_1 - \omega_2). \quad (55)$$

Die Vorzeichen bei der Nullpunktsenergie werden alsbald klar.

Um \bar{H} auf Normalform zu bringen, derart, daß die Oszillatoren mit den Frequenzen $\omega_{1,2}$ erkennbar sind, nehmen wir eine linearhomogene kanonische Transformation vor. Da \bar{H} bezüglich \mathbf{v} und \mathbf{a} schon rein quadratisch ist, faßt man zweckmäßig jetzt \mathbf{r} , \mathbf{v} , $-\mathbf{a}$ als Koordinaten, \mathbf{p} , $\hat{\mathbf{s}}$, \mathbf{b} als Impulse auf. Dann kann durch eine Punkttransformation von \mathbf{v} , $-\mathbf{a}$ in neue Koordinaten \mathbf{v}_1 , \mathbf{v}_2 (und der kontragredienten Transformation von $\hat{\mathbf{s}}$, \mathbf{b} in neue Impulse $\hat{\mathbf{s}}_1$, $\hat{\mathbf{s}}_2$) die Hauptachsenform erzielt werden. Ohne Einschränkung kann dabei

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 \quad (56)$$

gewählt werden, so daß H die Gestalt annehmen muß

$$H = V(\mathbf{r}, t) + (\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2) \cdot \mathbf{p} - H_{\text{osz},1} - H_{\text{osz},2} \quad (57)$$

$$H_{\text{osz},i} = \frac{m_i}{2} \mathbf{v}_i^2 + \frac{\omega_i^2}{2m_i} \hat{\mathbf{s}}_i^2 + (-1)^i \frac{3}{2} \hbar \omega_i \quad (i=1,2).$$

Die beiden Konstanten $m_{1,2}$ haben wir noch zu bestimmen. (Bei der expliziten Durchführung der Hauptachsentransformation würden sie sich natürlich von selbst ergeben.) Dazu leiten wir aus (57) die Bewegungsgleichung ab und vergleichen mit (54). Die zu (57) gehörigen kanonischen Gleichungen lauten

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{r}} &= \mathbf{v} & \dot{\mathbf{v}}_i &= -(\omega_i^2/m_i) \hat{\mathbf{s}}_i \\ \dot{\mathbf{p}} &= \mathbf{R} & \dot{\hat{\mathbf{s}}}_i &= m_i \mathbf{v}_i - \mathbf{p}. \end{aligned}$$

Daraus folgt

$$\mathbf{p} = m_1 \left(\mathbf{v}_1 + \frac{1}{\omega_1^2} \ddot{\mathbf{v}}_1 \right) = m_2 \left(\mathbf{v}_2 + \frac{1}{\omega_2^2} \ddot{\mathbf{v}}_2 \right),$$

also nach (56)

$$(m_1 + m_2) \mathbf{v}_1 + \left(\frac{m_1}{\omega_1^2} + \frac{m_2}{\omega_2^2} \right) \ddot{\mathbf{v}}_1 = m_2 \left(\mathbf{v} + \frac{1}{\omega_2^2} \ddot{\mathbf{v}} \right).$$

Wählen wir also

$$m_1/\omega_1^2 = -m_2/\omega_2^2, \quad (58a)$$

so läßt sich \mathbf{p} durch \mathbf{v} , $\ddot{\mathbf{v}}$ ausdrücken und man erhält als Bewegungsgleichung

$$\ddot{\mathbf{p}} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \frac{d}{dt} \left[\mathbf{v} + \left(\frac{1}{\omega_1^2} + \frac{1}{\omega_2^2} \right) \ddot{\mathbf{v}} + \frac{1}{\omega_1^2 \omega_2^2} \ddot{\ddot{\mathbf{v}}} \right] = \mathbf{R}.$$

Vergleich mit (54) zeigt, daß

$$\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} = \frac{1}{m} \quad (58b)$$

sein muß. Damit sind $m_{1,2}$ bestimmt. Wegen $\omega_1 < \omega_2$ ist $m_1 > 0$, $m_2 < 0$.

Auf (57) kann man nun ohne prinzipielle Schwierigkeit die Methode des Hauptteils anwenden. Da

jetzt zwei zusätzliche Variable $\mathbf{v}_{1,2}$ vorliegen, treten ein Skalar, zwei Vektoren, drei Tensoren zweiter Stufe usw. auf. In die Lambshift gehen die beiden Frequenzen $\omega_{1,2}$ ein. Die Rechnung ergibt dasselbe Resultat (62) wie die folgende kürzere Methode, die sich an Zusatz III anlehnt. Wir transformieren (57) nochmals, ausgehend von der Umformung

$$H = V + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \mathbf{p}^2 - H'_{\text{osz},1} - H'_{\text{osz},2} \quad (59)$$

mit

$$H'_{\text{osz},i} = \frac{1}{2m_i} (\mathbf{p} - m_i \mathbf{v}_i)^2 + \frac{\omega_i^2}{2m_i} \hat{\mathbf{s}}_i^2 + (-1)^i \frac{3}{2} \hbar \omega_i.$$

Nun fassen wir \mathbf{r} , $-\hat{\mathbf{s}}_1$, $-\hat{\mathbf{s}}_2$ als Koordinaten, \mathbf{p} , \mathbf{v}_1 , \mathbf{v}_2 als Impulse auf und transformieren, analog zu (52a), auf neue Impulse \mathbf{p}_0 , \mathbf{p}_1 , \mathbf{p}_2 durch

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_0 &= \mathbf{p} \\ \mathbf{p}_1 &= \mathbf{p} - m_1 \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{p}_2 &= \mathbf{p} - m_2 \mathbf{v}_2 \end{aligned} \quad (60a)$$

und, analog zu (52b), auf neue Koordinaten \mathbf{r}_0 , \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 durch

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \mathbf{r}_0 + \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 \\ -\hat{\mathbf{s}}_1 &= -m_1 \mathbf{r}_1 \\ -\hat{\mathbf{s}}_2 &= -m_2 \mathbf{r}_2. \end{aligned} \quad (60b)$$

Damit kommt, unter Benutzung von (58b), aus (59), das Analogon zu (53)

$$H = V(\mathbf{r}_0 + \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2, t) + \frac{1}{2m} \mathbf{p}_0^2 - H'_{\text{osz},1} - H'_{\text{osz},2} \quad (61)$$

mit

$$H'_{\text{osz},i} = \frac{1}{2m_i} \mathbf{p}_i^2 + \frac{m_i \omega_i^2}{2} \mathbf{r}_i^2 + (-1)^i \frac{3}{2} \hbar \omega_i.$$

Daraus entnimmt man nach der Methode von Zusatz III sogleich für die Lambshift

$$\delta E = \quad (62)$$

$$\frac{\hbar}{4} \left(\frac{1}{m_1 \omega_1} + \frac{1}{|m_2| \omega_2} \right) \int \psi^{(S)*} \frac{\partial^2 V}{\partial x_k \partial x_k} \psi^{(S)} d\mathbf{r}_0.$$

Dabei ist nach (58a, b)

$$\frac{1}{m_1 \omega_1} + \frac{1}{|m_2| \omega_2} = \frac{1}{m \omega_1} \left(\frac{1}{1 - \omega_1/\omega_2} - \frac{\omega_1}{\omega_2} \right), \quad \omega_1 < \omega_2. \quad (63)$$

Wenn $\omega_2 \gg \omega_1$, ist also die Korrektur an (37) klein. Wenn $\omega_2 \rightarrow \omega_1$ geht, muß $\omega_1 \rightarrow \infty$ (d. h. Elektronenradius $b \rightarrow 0$) gehen, damit die Lambshift endlich bleibt. Die Methode dieses Zusatzes dürfte sich auf die Bewegungsgleichung mit beliebigen hohen Zeitableitungen übertragen lassen.