

Zur Theorie des Elektrons V

Von WALTER WESSEL

Aus dem Institut für Theoretische Physik der Universität Heidelberg
(Z. Naturforsch. 14 a, 1005—1014 [1959]; eingegangen am 12. Oktober 1959)

Die von den Feldstärken abhängigen Terme in der HAMILTON-Funktion führen bei der Ableitung aus einem Variationsprinzip zu einem Massenoperator vom HEISENBERG-Typ. Ihre Koeffizienten werden aus diesem Anlaß berichtet.

Der gegenwärtige Stand unseres Problems ist, um es kurz zusammenzufassen, der folgende: die zugrunde liegende Idee, die Selbstwechselwirkung der Ladung mit ihrem elektromagnetischen Felde durch eine Vermehrung der Freiheitsgrade in den mechanischen Teil der HAMILTON-Funktion aufzunehmen und dabei die divergenten Integrale über den Frequenzenraum durch einen wohldefinierten Operator zu ersetzen, wurde bisher nur im Rahmen einer Einteilchentheorie zu realisieren versucht. Man kommt dabei wegen der bekannten Kovarianzschwierigkeiten nicht ganz durch, kann aber mit einer nicht sehr künstlichen Hilfsannahme die LORENTZ-Invarianz wahren und gelangt dann zu einer linearen Wellengleichung mit unendlichen Matrizen und einem mit diesen Matrizen gebildeten Massenoperator, der jedenfalls mit sehr guter Näherung die Eigenwerte ± 1 hat, wie die DIRACsche β -Matrix. Er hat aber außerdem verschiedene komplexe Eigenwerte, und es ließ sich absehen, daß eine Einteilchentheorie damit das Ende ihrer Möglichkeiten erreicht hatte. Inzwischen hat HEISENBERG¹ überzeugend dargetan, daß man mit einer linearen Wellengleichung überhaupt nicht auskommt, sondern daß ein Massenoperator mindestens dritten Grades in der Wellenfunktion sein muß. Es scheint uns nun recht bemerkenswert, daß man im Rahmen des vorliegenden Versuchs in der Tat zu einem solchen Terme kommt, wenn man, zunächst ganz ohne diesen Nebengedanken und nur im Hinblick auf die Quantisierung des Materiefeldes, statt von der HAMILTONSchen Formulierung einmal von einer LAGRANGESchen Funktion ausgeht.

Das kommt folgendermaßen zustande. Wir haben schon früher gezeigt, daß der Übergang von der kräftefreien Bewegung zur Bewegung in vorgegebenen elektrischen und magnetischen Feldern bei uns nicht in der üblichen Weise durch bloße Addition der Potentiale zu den Impulsen geschehen kann. Es ist

vielmehr nötig, auch feldstärkenabhängige Glieder in die HAMILTON-Funktion mit aufzunehmen, jedoch nicht in Form eines „PAULI-Terms“, sondern noch in Abhängigkeit von den Impulsen. Wir haben diese Zusätze bisher nicht genauer ausgerechnet, weil wir zwar ihre Notwendigkeit plausibel machen, aber kein klares Konstruktionsprinzip dafür angeben konnten. Man kann sie nur empirisch bestimmen, indem man geeignete invariante Kombinationen bildet und ihre Koeffizienten so einrichtet, daß der Anomaliefaktor und die Wasserstoff-Feinstruktur bis zur vierten Potenz in der Feinstrukturkonstanten richtig werden — ein Verfahren, das äußerst unbefriedigend ist, nachdem man mit der DIRAC-Gleichung bis zu dieser Näherung automatisch richtig rechnet und mit den Standardmethoden der Feldquantelung erfolgreich bis zur fünften und höheren Potenzen rechnen kann. Diese scheinbar so unliebsamen Terme sind es, die Terme dritten Grades in der Wellenfunktion nach sich ziehen, wenn man die Wellengleichung in der üblichen Weise aus einem Variationsprinzip herzuleiten versucht. Wesentlich ist dafür das gemeinsame Vorkommen von Feldstärken und Impulsen in den Zusatzgliedern. Die Gegenwart der Impulse zieht Ableitungen der Feldstärken nach sich, und diese drücken sich, wenn man nach den Potentialen variiert, durch die Stromkomponenten, d. h. quadratisch in den Materiewellenfunktionen aus, womit ein Wechselwirkungsglied dritten Grades entsteht. Mit Hinblick darauf schien es uns nun doch interessant, die an sich etwas umständliche Berechnung der Koeffizienten dieser Zusatzglieder einmal durchzuführen. Sie haben, wie man erwarten kann, einfache Zahlwerte. Was die Existenz von Transformationsgruppen betrifft, so haben wir uns begnügt, auf Invarianz gegen Rauminvolution zu achten.

I. Um allzuviiele Verweise auf frühere Arbeiten² zu ersparen, geben wir zunächst noch einmal eine

¹ z. B. W. HEISENBERG, Rev. Mod. Phys. **29**, 269 [1957].

² W. WESSEL, Z. Naturforsch. **7 a**, 583 [1952]; **10 a**, 89 [1955], zitiert als III und IV. Ferner ebenda **4 a**, 645

[1949], zitiert als QM, und Phys. Rev. **76**, 1512 [1949]; **83**, 1031 [1951] und W. WESSEL u. S. J. CZYZAK, Phys. Rev. **91**, 986 [1953], zitiert als PR 1, 2, 3.



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 digitized 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.

ganz kurze Übersicht über die hauptsächlich zu benutzenden formalen Beziehungen, wobei einige davon ausführlicher als früher geschehen erläutert werden sollen. Genau wie in der DIRACschen Theorie des Elektrons haben wir es neben Koordinaten (\mathbf{r}) und Impulsen (\mathbf{p}) mit sechzehn damit vertauschbaren Variablen zu tun, die einem Ring von Vertauschungsrelationen genügen und daneben verschiedene Identitäten zweiten Grades erfüllen. Es sind die Invariante I , die Vierervektoren \vec{t} , t^4 und \vec{z} , z^4 , der antisymmetrische Tensor M_{ik} und ein Pseudoskalar K . Wir schreiben auch $(M_{23}, M_{31}, M_{12}) = \mathfrak{M}$, $(M_{14}, M_{24}, M_{34}) = \mathfrak{P}$ oder in Komponenten M_1, M_2, M_3 bzw. Π_1, Π_2, Π_3 . Die Vertauschungsrelationen wurden in QM und besonders ausführlich PR 1 abgedruckt. Die ihnen genügenden Matrizen können sämtlich hermitesch gewählt werden. Im Zusammenhange damit sind sie sämtlich unendlich, und zwar zur Hälfte reduzibel und mit diskreten Eigenwerten (I, \vec{z}, t^4 und \mathfrak{M}), zur Hälfte irreduzibel und von kontinuierlichem Spektrum (K, \vec{t}, z^4 und \mathfrak{P}). Ihre Darstellungen sind durch die Eigenwerte von vier Diagonalmatrizen gekennzeichnet. Grundlegend ist der Wert von I , der bei uns den niedrigsten Wert des Spins bestimmt und daher hier gleich $\frac{1}{2}$ gesetzt wird. Außerdem wird man im allgemeinen

$$\mathfrak{M}^2 = \sigma(\sigma+1) \quad \text{und} \quad M_3 = \mu$$

diagonal wählen (in älteren Arbeiten wurde z statt σ geschrieben). An vierter Stelle hat man im wesentlichen die Wahl zwischen t^4 und K . Die K -Darstellung, entwickelt in III und PR 2, ist die gegebene Form für die Analyse des Massenoperators; Matrizen schreiben sich am leichtesten in t^4 -Darstellung. Die Matrix K wurde in dieser Darstellung ausführlich in QM wiedergegeben. Wir heben für das Folgende hervor, indem wir für Einzelheiten auf die letztgenannte Arbeit verweisen, daß die irreduziblen Matrizen die Form

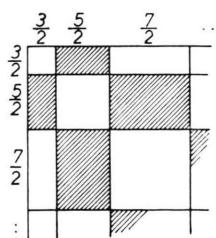


Abb. 1.

haben, wobei die angeschriebenen Ziffern die Eigenwerte von t^4 bilden und nur die schraffierten Be-

reiche mit Zahlen besetzt sind, die nach σ (oder z) und μ weiter klassifiziert werden. Wir wollen Matrizen dieser Form, zu denen insbesondere Π_1, Π_2, Π_3 gehören, als vom \mathfrak{P} -Typ, dagegen die reduziblen Matrizen, in denen nur die Quadrate ausgefüllt sind, als vom \mathfrak{M} -Typ bezeichnen. Die \mathfrak{M} -Matrizen selber zerfallen nach σ in gewöhnliche Drehimpulsmatrizen, und zwar gehören zu $t^4 = \frac{3}{2}$ solche mit $\sigma = \frac{1}{2}$, zu $t^4 = \frac{5}{2}$ solche mit $\sigma = \frac{1}{2}$ und $\frac{3}{2}$ und so fort, jeweils von $\sigma = \frac{1}{2}$ bis $\sigma = t^4 - 1$. Die \vec{z} sind in σ nicht diagonal.

Von den Identitäten, die die Matrizen erfüllen, sind am wichtigsten

$$\mathfrak{M}^2 - \mathfrak{P}^2 = I^2 - K^2 \quad (1.1)$$

$$\text{und} \quad \mathfrak{M} \mathfrak{P} = I K \quad (1.2)$$

und die daraus durch Vertauschen mit z^j folgenden

$$z^j M_{jk} = K \iota_k \quad (1.3)$$

$$\text{und} \quad z^j M_{jk}^* = -I \iota_k, \quad (1.4)$$

wobei unter M^* der zu M duale Tensor zu verstehen ist und im ersten Falle die hermiteschen Realteile zu nehmen sind. Wir merken daneben noch an

$$z_j z^j = I^2 + K^2 - 1, \quad (1.5)$$

$$\iota_j \iota^j = -I^2 - K^2 + 1. \quad (1.6)$$

Unsere Metrik ist so gewählt, daß $z_j z^j = \vec{z}^2 - (z^4)^2$ ist, d. h. $z_4 = -z^4$.

Es bleibt noch zu erläutern, wie die feldstärken-abhängigen Zusatzglieder angesetzt werden sollen. Wir müssen dazu zurückgehen auf die klassische Ausgangsform dieser Theorie, in der statt der z^j , ι^j die raumartigen bzw. zeitartigen Vierervektoren $U^j = z^j / \sqrt{I^2 + K^2}$ und $u^j = \iota^j / \sqrt{I^2 + K^2}$ stehen [vgl. auch (1.5) und (1.6); der Zusatz -1 ist den Matrizen eigentlich]. Hiermit lautete die HAMILTON-Funktion im kräftefreien Falle

$$H = U_j p^j + m c = 0 \quad (1.7)$$

$$\text{mit} \quad m = m_0 \mathfrak{S} \sin \Gamma K, \quad (1.8)$$

$$\Gamma = \frac{3}{2} \hbar c/e^2. \quad (1.9)$$

Die Quadratwurzel wurde dann durch eine im Sinne der STIRLINGschen Formel damit zusammenhängenden Funktion $\Theta(I, K)$ ersetzt und die ganze Gleichung hiermit multipliziert. Auf diese Weise entstand

$$z_j p^j + m_I c = 0, \quad (1.10)$$

$$\text{wo nun} \quad m_I(K) = m_0 \Theta(I, K) \mathfrak{S} \sin \Gamma K \quad (1.11)$$

ist. Wir hatten dann in PR 3 gezeigt, daß man in der klassischen Theorie bei Einführung äußerer Felder $(\mathfrak{A}, V) = A^j$ mit dem Übergange von p^j zu

$$g^j = p^j + \frac{e}{c} A^j \quad (1.12)$$

nicht auskommt, sondern Glieder mit $u^j F_{jk} p^k$ und $u^j F_{jk}^* p^k$ hinzufügen muß, in denen die F_{jk} die Feldstärken sind und ein Stern den dualen Tensor andeutet³. Wir haben sie nach Verwandlung der U_j in \varkappa_j , vgl. (1.7) und (1.10), noch zwecks Erhaltung der Invarianz gegen Rauminvolutionen [vgl. dazu III, Formel (3.4) etc.] mit K und $-I$ multipliziert,

$$L_0 = -\frac{1}{2} \psi^* \varkappa^j \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x^j} + \frac{e}{c} A_j \psi \right) - \frac{1}{2} \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^*}{\partial x^j} + \frac{e}{c} A_j \psi^* \right) \varkappa^j \psi - m_l(K) c \psi^* \psi, \quad (2.1)$$

Die Zusatzglieder müssen wir noch, wenn die $c_1 \dots c_3$ reine Zahlen sein sollen, mit einem passenden Dimensionsfaktor versehen. Da wir den Störeffekt in der ungefähren Größenordnung eines „PAULI-Terms“ erwarten, werden wir mit einem Faktor $e \hbar / 2 m_0 c$ multiplizieren, und da wir alle Energien in Vielfachen von $m_0 c^2$ rechnen wollen, werden wir hiermit dividieren. Im ganzen multiplizieren wir also mit $e \hbar / 2 m_0^2 c^3$. In den Formeln (2.2) bis (2.7) ist dieser Faktor zur Ersparnis von Klammern noch ausgelassen und dafür ein \sim gesetzt. Zu dem Gliede mit c_1 vom Ende des Abschnitts I gehört offenbar ein

$$L_1 \sim -\frac{\hbar}{2i} \left\{ \psi^* \varkappa^j M_{jk} F^{kl} \frac{\partial \psi}{\partial x^l} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x^l} F^{lk} M_{kj} \varkappa^j \psi \right\}, \quad (2.2)$$

denn dessen Variationsableitung nach ψ^* liefert

$$\frac{1}{2} (\varkappa^l M_{jk} + M_{jk} \varkappa^l) F^{kl} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x^l} + \frac{\hbar}{2i} \frac{\partial F^{lk}}{\partial x^l} M_{kj} \varkappa^j \psi. \quad (2.3)$$

Hier ist der erste Term der gewünschte, während der zweite durch die Variationsableitung entsteht. Entsprechend liefert

$$L_2 \sim -\frac{\hbar}{2i} \left\{ \psi^* \varkappa^j M_{jk}^* F^{kl*} \frac{\partial \psi}{\partial x^l} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x^l} F^{lk} M_{kj}^* \varkappa^j \psi \right\} \quad (2.4)$$

$$\text{eine Variationsableitung} \quad \frac{1}{2} (\varkappa^j M_{jk}^* + M_{jk}^* \varkappa^j) F^{kl*} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x^l} + \frac{\hbar}{2i} \frac{\partial F^{lk*}}{\partial x^l} M_{kj} \varkappa^j \psi \quad (2.5)$$

$$\text{und schließlich} \quad L_3 \sim -\frac{\hbar}{2i} \left\{ \psi^* \varkappa^j \frac{1}{2} M_{ik} F^{ik} \frac{\partial \psi}{\partial x^j} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x^j} \frac{1}{2} M_{ik} F^{ik} \varkappa^j \psi \right\} \quad (2.6)$$

$$\text{eine Ableitung} \quad \frac{1}{2} M_{ik} F^{ik} \frac{\hbar}{i} \varkappa^j \frac{\partial \psi}{\partial x^j} + \frac{\hbar}{2i} \frac{\partial}{\partial x^l} \left(\frac{1}{2} M_{ik} F^{ik} \right) \cdot \varkappa^l \psi. \quad (2.7)$$

Die nichtvertauschbaren \varkappa^j und M_{ik} sind hier immer symmetrisiert zu denken, soweit sich die Symmetrisierung nicht schon durch die Ableitung ergibt; es besteht in (2.2) kein Grund, eine Reihenfolge auszuzeichnen. Weiter verfahren wir nun genau wie in der Standardmethode⁴, indem wir zu den $L_0 \dots L_3$ noch die LAGRANGE-Funktion L_{em} des elektromagne-

worauf man sie noch nach (1.3) und (1.4) umschreiben kann, und sie dann mit unbestimmten Zahlenkoeffizienten c_1 und c_2 addiert. Sie sollen also heißen $c_1 \varkappa^j M_{jk} F^{kl} p_l$ und $c_2 \varkappa^j M_{jk}^* F^{kl*} p_l$. Schließlich haben wir noch ein Glied $c_3 \varkappa_j p^j M_{ik} F^{ik}$ hinzugefügt, weil sich damit größere Symmetrie herstellen läßt. Ein besterntes Glied dieser Form würde nichts Neues ergeben.

II. Die Gl. (1.10), ergänzt durch die Zusatzglieder und mit p^j ersetzt durch g^j nach (1.12) soll nun aus einem Variationsprinzip hergeleitet werden. Die ungestörte Gl. (1.10) folgt wie üblich (jedoch mit ψ^* statt $\bar{\psi}$) aus

tischen Feldes addieren und unter den A_j bzw. F_{ik} die Summe der freien Feldgrößen und äußerer, nicht mitzuvariierender Felder verstehen. Es könnte inkonsistent erscheinen, wenn wir nun doch freie, d. h. bei jedem Teilchen zugleich die Wechselwirkung mit dem eigenen Felde beschreibende Felder einführen, nachdem wir für deren Beschreibung schon die

³ a. a. O. war die HAMILTON-Funktion noch mit u^j statt U^j und waren demgemäß die Zusatzglieder mit U^j statt u^j geschrieben. Über die Gründe für die Abänderung siehe IV.

⁴ s. etwa SCHWEBER-BETHE-DE HOFFMANN, Mesons and Fields, Vol. I, 12 b [Evanston — New York 1955].

unendlichen Matrizen an Stelle der DIRACSchen vorgesehen haben. Es handelt sich aber nur um eine strenge Fassung der unstrengen Betrachtung (l. c. IV), wo wir auch zunächst die Energie des freien Feldes zu der HAMILTON-Funktion der Partikel addieren [vgl. (1.7) a. a. O.], um sie dann über die Bewegungsgleichungen der Feldkomponenten durch die Partikelgeschwindigkeit (v bzw. u_k) und daraus ableitbare Größen, insbesondere das Linienintegral (1.21) l. c. für m auszudrücken. Das Ergebnis ist die gegenwärtige Wellengleichung (1.10) mit dem Massenoperator (1.11), der nur noch von den Invarianten I , K des Matrizenringes abhängt. Unstreng ist dabei nicht nur die Verletzung der relativistischen Invarianz – was für das Prinzip nichts zur Sache tätigt – sondern mehr noch die zunächst angenommene Vertauschbarkeit der Feldkomponenten mit der Geschwindigkeit, die erst nachher durch geeignete Vertauschungsrelationen der u_k untereinander ausgeglichen wird. Gegenwärtig gehen wir direkt von der Wellengleichung mit den unendlichen Matrizen aus, indem wir deren Vertauschungsrelationen entweder aus denen der u_k übernehmen oder einfach postulieren. Diese Matrizen ziehen dann durch den Vergleich mit der Erfahrung die Zusatzglieder nach sich, und diese führen über die Bewegungsgleichungen des Feldes, wie sie jetzt aus der LAGRANGE-Funktion folgen, wieder zu einem Massenoperator, der wie früher von den I , K , jedoch im Sinne der jetzt gewahrten LORENTZ-Invarianz außerdem von den ψ -Funktionen abhängt. Der Operator kann auch wieder in K -Darstellung geschrieben werden, wobei die ψ -Funktionen als Funktionen von x , y , z , t und K erscheinen, die alle ein kontinuierliches Spektrum haben.

Entschieden inkonsequent sind wir nur insofern, als wir daneben noch den nach der früheren Methode abgeleiteten Operator (1.11) beibehalten, der wegen des zur Wiederherstellung der relativistischen Invarianz benutzten Kunstgriffes nicht mehr als heuristische Bedeutung hat. Dies möge erlaubt sein, da wir natürlich weit davon entfernt sind, den neuen Operator zu beherrschen. Wir werden ihn also nur für den feldfreien Fall kurz betrachten und bei der Berechnung der $c_1 \dots c_3$ mit dem alten Operator weiterrechnen, von dem wir weiter nichts brauchen, als daß $(\mathbf{z}^4)^{-1} m_l(K)/m_0$ einen Eigenwert 1 und nur in endlichem Abstande (unter einem endlichen Win-

kel auf dem Einheitskreise) weitere Eigenwerte hat⁵, so daß man unter Inkaufnahme der Realitätsschwierigkeit in der Nähe von $+m_0 c^2$ nach Potenzen der Feldstärke oder der Feinstrukturkonstanten wird entwickeln dürfen.

Wir setzen also

$$\mathcal{L} = L_0 + c_1 L_1 + c_2 L_2 + c_3 L_3 + L_{\text{em}} \quad (2.8)$$

und variieren nunmehr nach den A_j , wobei wir uns die LORENTZ-Bedingung in geeigneter Form berücksichtigt denken. In erster Näherung, d. h. unter Weglassung der kleinen Zusatzglieder, folgt dann wie gewöhnlich

$$\partial F^{jl} / \partial x^l = e \psi^* \mathbf{z}^j \psi. \quad (2.9)$$

Außerdem gilt natürlich die Identität

$$\partial F^{jl*} / \partial x^l = 0. \quad (2.10)$$

Geht man mit diesem Ergebnis zurück in die durch Variation nach ψ^* gewonnenen Terme, so erhält man im letzten Gliede von (2.3) einen von den Feldstärken nicht mehr abhängigen Beitrag

$$- \frac{\hbar}{2i} M_{kj} \mathbf{z}^j \psi (e \psi^* \mathbf{z}^k \psi),$$

der also die Natur eines Massenoperators hat. Multipliziert man hier, wie vorgesehen, mit $e \hbar / 2 m_0^2 c^3$, so erhält man, von dem Faktor \hbar/i abgesehen, der den p^j in (1.10) entspricht, einen Faktor von der Dimension einer Fläche

$$l^2 = e^2 \hbar / m_0^2 c^3, \quad (2.11)$$

und das Zusatzglied nimmt, wenn man wieder (1.3) benutzt, die Form eines HEISENBERG-Terms an:

$$\frac{1}{4} c_1 l^2 \cdot K \iota_k \psi (\psi^* \mathbf{z}^k \psi). \quad (2.12)$$

In dieser Form wechselt es allerdings bei Raum-inversion sein Vorzeichen nicht, während die ganze übrige Gleichung das tut. Man müßte, um das zu beheben, in $L_0 \dots L_3$ z. B. $\psi^* K^{-1}$ statt ψ^* schreiben, womit man $\frac{1}{4} c_1 l^2 \iota_k \psi (\psi^* K^{-1} \mathbf{z}^k \psi)$ erhielte, doch wollen wir auf die Transformationsfragen noch nicht weiter eingehen. Der Term (2.5) liefert wegen (2.10) keinen entsprechenden Beitrag, und das Divergenzglied in (2.7) läßt sich natürlich auch nicht durch den Strom ausdrücken, sondern muß mit den übrigen feldabhängigen Termen als Störung behandelt werden.

⁵ In IV wurde versehentlich nur ein Eigenwert bei -1 nebst zwei komplexen angegeben. Man erhält aber alles symme-

III. Die beiden folgenden Abschnitte sind nur der Berechnung der $c_1 \dots c_3$ gewidmet. Wir zeigen zunächst, daß ohne die Zusatzglieder der Anomaliefaktor des Elektrons und die Wasserstoff-Feinstruktur, die bekanntlich außer dem relativistischen Term noch einen klassisch nicht deutbaren enthält⁶, falsch herauskommen und korrigieren das durch die Zusatzglieder. Wie man sich denken kann, ließe sich der Anomaliefaktor schon durch das Glied mit c_3

$$m_I c + \vec{z} \mathfrak{g} - z^4 p^4 + l^2/2 e \{ c_1 K \vec{t} (\mathfrak{B} \times \mathfrak{p}) + c_2 I (\vec{t} \mathfrak{B} p^4 - t^4 \mathfrak{B} \mathfrak{p}) - c_3 (\mathfrak{M} \mathfrak{B}) (\vec{z} \mathfrak{p} - z^4 p^4) \} = 0. \quad (3.2)$$

Wir führen hier eine FOLDY-WOUTHUYSEN-Transformation⁷ mit der unitären Matrix

$$L = e^{-i(\mathfrak{g} \mathfrak{B})/p^4} \quad (3.3)$$

durch. \mathfrak{B} ist in der Einleitung erklärt, \mathfrak{g} durch (1.12). Es ergibt sich bei Entwicklung bis zu Gliedern mit \mathfrak{p}^2 (die Klammern bedeuten Vertauschungssymbole; das Glied $m_I c$ ist invariant, weil I und K mit \mathfrak{B} kommutieren):

$$\begin{aligned} L^\dagger \vec{z} \mathfrak{g} L &= \vec{z} \mathfrak{g} + i/1! [\mathfrak{g} \mathfrak{B}, \vec{z} \mathfrak{g}] (p^4)^{-1} + \dots \\ &= \vec{z} \mathfrak{g} + i(\mathfrak{g} [\mathfrak{B}, \vec{z}] \mathfrak{g} + \vec{z} [\mathfrak{g}, \mathfrak{g}] \mathfrak{B}) (p^4)^{-1}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Hier ist nach PR 1 bzw. auf Grund der HEISENBERGSCHEN Vertauschungsrelationen

$$[\Pi_i, z_k] = -i z^4 \delta_{ik}, \quad [g_i, g_k] = e \hbar / i c \cdot B_{ik}, \quad (3.5), (3.6)$$

daher der ganze Ausdruck

$$L^\dagger \vec{z} \mathfrak{g} L = \vec{z} \mathfrak{g} + z^4 \mathfrak{g}^2 (p^4)^{-1} - e \hbar / c \cdot (\vec{z} \times \mathfrak{B}) \mathfrak{B} (p^4)^{-1}. \quad (3.7)$$

In dem Gliede mit $z^4 p^4$ muß man, um Glieder mit \mathfrak{p}^2 zu erfassen, *drei* Glieder der Reihenentwicklung mitnehmen:

$$\begin{aligned} L^\dagger z^4 p^4 L &= z^4 p^4 + i/1! [\mathfrak{g} \mathfrak{B}, z^4] - 1/2! [\mathfrak{g} \mathfrak{B} [\mathfrak{g} \mathfrak{B}, z^4]] (p^4)^{-1} + \dots \\ &= z^4 p^4 + \vec{z} \mathfrak{g} + \frac{1}{2} (z^4 \mathfrak{g}^2 - e \hbar / c \cdot (\vec{z} \times \mathfrak{B}) \mathfrak{B}) (p^4)^{-1}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Im ganzen ergibt sich also

$$L^\dagger (m_I c + \vec{z} \mathfrak{g} - z^4 p^4) L = m_I c - z^4 p^4 + \frac{1}{2} z^4 \mathfrak{g}^2 (p^4)^{-1} - e \hbar / 2 c \cdot (\vec{z} \times \mathfrak{B}) \mathfrak{B} (p^4)^{-1}. \quad (3.9)$$

Mit Einführung des Bahndrehimpulses

$$(\mathfrak{r} \times \mathfrak{p}) = \mathfrak{l} \quad (3.10)$$

wird wie gewöhnlich

$$\mathfrak{g}^2 = \mathfrak{p}^2 + e \hbar / c \cdot (\mathfrak{B} \mathfrak{l}) + e^2 / c^2 \cdot \mathfrak{M}^2. \quad (3.11)$$

Wir versuchen nun, alles in Vielfachen der Matrix z^4 zu schreiben, die vom \mathfrak{B} -Typ ist, um diese nachher herauszuziehen und eine Gleichung vom \mathfrak{M} -Typ übrig zu behalten. Für $\vec{z} \times \mathfrak{B}$ erhalten wir aus (1.4), wenn wir diese Gleichung in Vektoren schreiben,

$$\vec{z} \times \mathfrak{B} = z^4 \mathfrak{M} + I \vec{t}. \quad (3.12)$$

Wir denken uns nun die Entwicklung in der Nähe

⁶ vgl. etwa H. A. BETHE u. E. E. SALPETER in Handbuch der Physik XXXV, Sect. 12 γ, Berlin 1957.

berichtigten; das interessantere Glied mit c_1 wird erst durch den unklassischen Term bedingt. Es ist übersichtlicher, magnetische und elektrische Felder getrennt zu behandeln. Ein homogenes magnetisches Feld \mathfrak{B} sei durch sein Vektorpotential

$$\mathfrak{A} = \frac{1}{2} (\mathfrak{B} \times \mathfrak{r}) \quad (3.1)$$

gegeben. Die durch Variation von (2.8) nach den ψ^* zu erhaltende Gleichung lautet in Matrizenschreibweise, vereinfacht durch Verwendung von (1.4),

$$m_I c + \vec{z} \mathfrak{g} - z^4 p^4 + l^2/2 e \{ c_1 K \vec{t} (\mathfrak{B} \times \mathfrak{p}) + c_2 I (\vec{t} \mathfrak{B} p^4 - t^4 \mathfrak{B} \mathfrak{p}) - c_3 (\mathfrak{M} \mathfrak{B}) (\vec{z} \mathfrak{p} - z^4 p^4) \} = 0. \quad (3.2)$$

$$L = e^{-i(\mathfrak{g} \mathfrak{B})/p^4} \quad (3.3)$$

durch. \mathfrak{B} ist in der Einleitung erklärt, \mathfrak{g} durch (1.12). Es ergibt sich bei Entwicklung bis zu Gliedern mit \mathfrak{p}^2 (die Klammern bedeuten Vertauschungssymbole; das Glied $m_I c$ ist invariant, weil I und K mit \mathfrak{B} kommutieren):

$$\begin{aligned} L^\dagger \vec{z} \mathfrak{g} L &= \vec{z} \mathfrak{g} + i/1! [\mathfrak{g} \mathfrak{B}, \vec{z} \mathfrak{g}] (p^4)^{-1} + \dots \\ &= \vec{z} \mathfrak{g} + i(\mathfrak{g} [\mathfrak{B}, \vec{z}] \mathfrak{g} + \vec{z} [\mathfrak{g}, \mathfrak{g}] \mathfrak{B}) (p^4)^{-1}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Hier ist nach PR 1 bzw. auf Grund der HEISENBERGSCHEN Vertauschungsrelationen

$$[\Pi_i, z_k] = -i z^4 \delta_{ik}, \quad [g_i, g_k] = e \hbar / i c \cdot B_{ik}, \quad (3.5), (3.6)$$

daher der ganze Ausdruck

$$L^\dagger \vec{z} \mathfrak{g} L = \vec{z} \mathfrak{g} + z^4 \mathfrak{g}^2 (p^4)^{-1} - e \hbar / c \cdot (\vec{z} \times \mathfrak{B}) \mathfrak{B} (p^4)^{-1}. \quad (3.7)$$

In dem Gliede mit $z^4 p^4$ muß man, um Glieder mit \mathfrak{p}^2 zu erfassen, *drei* Glieder der Reihenentwicklung mitnehmen:

$$\begin{aligned} L^\dagger z^4 p^4 L &= z^4 p^4 + i/1! [\mathfrak{g} \mathfrak{B}, z^4] - 1/2! [\mathfrak{g} \mathfrak{B} [\mathfrak{g} \mathfrak{B}, z^4]] (p^4)^{-1} + \dots \\ &= z^4 p^4 + \vec{z} \mathfrak{g} + \frac{1}{2} (z^4 \mathfrak{g}^2 - e \hbar / c \cdot (\vec{z} \times \mathfrak{B}) \mathfrak{B}) (p^4)^{-1}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Im ganzen ergibt sich also

$$L^\dagger (m_I c + \vec{z} \mathfrak{g} - z^4 p^4) L = m_I c - z^4 p^4 + \frac{1}{2} z^4 \mathfrak{g}^2 (p^4)^{-1} - e \hbar / 2 c \cdot (\vec{z} \times \mathfrak{B}) \mathfrak{B} (p^4)^{-1}. \quad (3.9)$$

Mit Einführung des Bahndrehimpulses

$$(\mathfrak{r} \times \mathfrak{p}) = \mathfrak{l} \quad (3.10)$$

des Eigenwertes m_0 unseres Massenoperators vorgenommen, setzen also

$$m_I(K) c = z^4 m_0 c \quad (3.13)$$

und

$$p^4 = m_0 c + W/c. \quad (3.14)$$

Dann ergibt die rechte Seite von (3.8), gleich Null gesetzt,

$$\begin{aligned} -z^4 W/c + \frac{1}{2} z^4 (\mathfrak{p}^2 + e \hbar / c \cdot (\mathfrak{B} \mathfrak{l}) + e^2 / c^2 \cdot \mathfrak{M}^2) (p^4)^{-1} \\ - e \hbar / 2 c \cdot (z^4 \mathfrak{M} + I \vec{t}) \mathfrak{B} (p^4)^{-1} = 0 \end{aligned} \quad (3.15)$$

oder in linearer Näherung in \mathfrak{B} , mit

$$(p^4)^{-1} \simeq (m_0 c)^{-1}$$

⁷ L. L. FOLDY u. S. A. WOUTHUYSEN, Phys. Rev. **78**, 29 [1950]; L. L. FOLDY, ebenda **87**, 688 [1952].

und nach Multiplikation mit $(\alpha^4)^{-1}$:

$$W = \frac{p^2}{2m_0} + \frac{e\hbar}{2m_0 c} (\mathbb{I} - \mathfrak{M}) \mathfrak{B} - \frac{e\hbar}{2m_0 c} (\alpha^4)^{-1} I(\vec{t}\mathfrak{B}). \quad (3.16)$$

Wie man sieht, kommt der Anomaliefaktor völlig falsch heraus – an Stelle von $\mathbb{I} - \mathfrak{M}$ sollte $\mathbb{I} + 2\mathfrak{M}$ stehen – und das letzte Glied sollte überhaupt fehlen. Wir fügen daher jetzt die Terme mit l^2/e aus (3.2) hinzu, wobei wir annehmen, daß die $c_1 \dots c_3$ die Größenordnung 1 haben. Diese Glieder haben dann wegen des Wertes (2.11) von l^2 und wegen $p^4 \simeq m_0 c$ bereits die Größenordnung der gegenwärtig betrachteten Terme und brauchen daher nicht mehr L -transformiert zu werden. Wir können vielmehr die Terme mit \mathfrak{p} neben p^4 noch vernachlässigen. Gl. (3.15) nimmt mit diesen Zusätzen nach der gleichen Behandlung wie vorhin die folgende Form an:

$$W = \frac{p^2}{2m_0} + \frac{e\hbar}{2m_0 c} \cdot \{ \mathbb{I} + (c_3 - 1) \mathfrak{M} + (c_2 - 1) (\alpha^4)^{-1} I\vec{t} \} \mathfrak{B}. \quad (3.17)$$

Der richtige Anomaliefaktor erfordert also, daß man $c_2 = 1$, $c_3 = 3$ setzt. Wir werden weiter unten für die Feinstruktur nur die etwas schwächere Forderung erfüllen können, daß Gleichung (3.17) für die erste Teilmatrix von \mathfrak{M} (die zum Spin $\frac{1}{2}$ gehört) und für die entsprechende Teilmatrix von $(\alpha^4)^{-1}\vec{t}$, das in-

$$\begin{aligned} \mu + \alpha(\vec{\alpha}\mathfrak{p}) - \alpha^4 p^4 - \alpha^2 \alpha^4 / r + \frac{1}{2} c_1 \alpha^3 K \{ -(\vec{\alpha}\mathfrak{p}) p^4 + \alpha \vec{t}^4 (\vec{\alpha}\mathfrak{p}) - \frac{1}{2} i \alpha \vec{t}^4 \operatorname{div} (\vec{\alpha}\mathfrak{p}) \\ + \frac{1}{2} c_2 \alpha^4 I\vec{t} (\vec{\alpha}\mathfrak{p}) + \frac{1}{2} c_3 \alpha^3 \{ (\alpha \vec{\alpha}\mathfrak{p} - \alpha^4 p^4) (\mathfrak{B}\mathfrak{p}) - \frac{1}{2} i \alpha (\vec{\alpha}\nabla) (\mathfrak{B}\mathfrak{p}) \} \} = 0. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Ohne das COULOMB-Feld und die daraus abgeleiteten Zusatzglieder würden wir diese Gleichung auf ein Schwerpunktssystem mit $\mathfrak{p} = 0$ transformieren können durch die LORENTZ-Transformation (3.7) von l. c. III, die in unseren jetzigen Einheiten lautet

$$L = e^{-i\alpha\vartheta(\mathfrak{p}\mathfrak{p})} \quad (4.4)$$

$$\text{mit } \vartheta = \frac{1}{\alpha p} \operatorname{Ar} \mathfrak{T} \operatorname{ang} \alpha p / p^4. \quad (4.5)$$

Es folgt

$$L^\dagger(\alpha \vec{\alpha}\mathfrak{p} - \alpha^4 p^4) L = -\alpha^4 V(p^4)^2 - \alpha^2 \mathfrak{p}^2, \quad (4.6)$$

wobei aus Stetigkeitsgründen ($\mathfrak{p} \rightarrow 0$) rechts, wenn man unter p^4 die positive Energie ($:c$) versteht, das

$$[\varPhi, \alpha \vec{\alpha}\mathfrak{p} - \alpha^4 p^4] = i \alpha(\vec{\alpha}\mathfrak{p}) p^4 \vartheta - i \alpha^2 \alpha^4 \mathfrak{p}^2 \vartheta - i \alpha^3(\vec{\alpha}\mathfrak{p}) p^4 / r + i \alpha^4 \{ (\mathfrak{p}\mathfrak{p}) (\vec{\alpha}\mathfrak{p}) + \alpha^4 \mathfrak{p}^2 / r \}. \quad (4.8)$$

Infolge der Symmetrisierung von \varPhi sind auch hier wieder alle Glieder, die \mathfrak{p} und r nebeneinander enthalten, symmetrisch, was wir nicht besonders zum Ausdruck bringen. Die zweite Vertauschung ergibt

soweit auch vom \mathfrak{M} -Typ ist, erfüllt sein soll. Es gilt nämlich mit dieser Einschränkung, wie wir im Anhang zeigen,

$$I\vec{t} = -\frac{1}{3} \alpha^4 \mathfrak{M}; \quad (3.18)$$

es genügt daher, in (3.17) zu verlangen, daß

$$-c_2 + 3c_3 = 8 \quad (3.19)$$

sei. Diese Gleichung wird sich beim Feinstrukturproblem wiederholen. Das Glied mit c_1 trat bisher nicht in Erscheinung, weil es in (3.2) nur von der Größenordnung \mathfrak{p} ist. Es hat übrigens dort \mathfrak{M} -Charakter, was sich beim Multiplizieren mit $(\alpha^4)^{-1}$ in \mathfrak{p} -Charakter verwandelt.

IV. Es folge nun das COULOMB-Feld und die Wasserstoff-Feinstruktur. Wir benutzen als Einheit der Energie $m_0 c^2$, des Impulses $\alpha m_0 c$, wobei

$$\alpha = e^2 / \hbar c \quad (4.1)$$

die Feinstrukturkonstante ist, und als Einheit der Länge den Wasserstoffradius $a = \hbar^2 / m_0 e^2$. Dadurch erscheinen das Potential in Vielfachen von e/a und die Feldstärke von e/a^2 . Den Massenoperator schreiben wir

$$m_I(K) = \mu m_0, \quad (4.2)$$

wobei wir wieder von dem Eigenwert 1 von $(\alpha^4)^{-1} m_I / m_0$ ausgehen wollen. Die Eigenwertgleichung für die Energie lautet ($\mathfrak{E} = \mathfrak{r}/r^3$):

$$\begin{aligned} \mu + \alpha(\vec{\alpha}\mathfrak{p}) - \alpha^4 p^4 - \alpha^2 \alpha^4 / r + \frac{1}{2} c_1 \alpha^3 K \{ -(\vec{\alpha}\mathfrak{p}) p^4 + \alpha \vec{t}^4 (\vec{\alpha}\mathfrak{p}) - \frac{1}{2} i \alpha \vec{t}^4 \operatorname{div} (\vec{\alpha}\mathfrak{p}) \\ + \frac{1}{2} c_2 \alpha^4 I\vec{t} (\vec{\alpha}\mathfrak{p}) + \frac{1}{2} c_3 \alpha^3 \{ (\alpha \vec{\alpha}\mathfrak{p} - \alpha^4 p^4) (\mathfrak{B}\mathfrak{p}) - \frac{1}{2} i \alpha (\vec{\alpha}\nabla) (\mathfrak{B}\mathfrak{p}) \} \} = 0. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Minuszeichen stehen und die Wurzel positiv verstanden werden muß. In Gegenwart eines COULOMB-Feldes setzen wir $L = e^{-i\vartheta}$ mit

$$\varPhi = \alpha(\mathfrak{p}\mathfrak{B}) (\vartheta - \alpha^2 / r), \quad (4.7)$$

wobei wir uns den Ausdruck symmetrisiert denken. Da wir bis zur Ordnung α^4 entwickeln wollen, müssen wir die der Gl. (3.4) oder (3.8) entsprechende Reihe bis zum Gliede mit $1/4!$ nehmen. Man erhält bei Ausführung der Vertauschungen, wenn man immer nur Glieder bis einschließlich α^4 beibehält [man unterscheide im folgenden $(\mathfrak{p}^2)^2$ von der Energie p^4]

$$[\mathcal{D}[\mathcal{D}, \alpha \vec{\mathbf{p}} - \alpha^4 p^4]] = \alpha^2 \alpha^4 p^4 (\partial \mathbf{p})^2 - \alpha^3 (\vec{\mathbf{p}}) (\partial \mathbf{p})^2 - \alpha^4 \{ (\mathbf{p} \mathbf{B}) (\vec{\mathbf{p}} \mathbf{E}) - (\vec{\mathbf{p}} \mathbf{B}) (\mathbf{B} \mathbf{E}) + 2 \alpha^4 \mathbf{p}^2/r \} p^4 \partial. \quad (4.9)$$

Die Glieder mit α^4 sind wieder symmetrisiert zu denken. Schließlich ergeben die dritte und vierte Vertauschung

$$[\mathcal{D}[\mathcal{D}[\mathcal{D}, \dots]]] = -i \alpha^3 (\vec{\mathbf{p}}) p^4 \mathbf{p}^2 \partial^3 + i \alpha^4 \alpha^4 (\mathbf{p}^2)^2 \partial^3, \quad (4.10)$$

$$[\mathcal{D}[\mathcal{D}[\mathcal{D}[\mathcal{D}, \dots]]]] = -\alpha^4 \alpha^4 p^4 (\mathbf{p}^2)^2 \partial^4. \quad (4.11)$$

Insgesamt bekommt man so, mit Entwicklung der Wurzel in (4.6),

$$L^\dagger (\alpha \vec{\mathbf{p}} - \alpha^4 p^4) L = -\alpha^4 p^4 \{ 1 - \frac{1}{2} \alpha^2 \mathbf{p}^2 (p^4)^{-2} - \frac{1}{8} \alpha^4 (\mathbf{p}^2)^2 (p^4)^{-4} \} + \alpha^3 (\vec{\mathbf{p}}) p^4/r - \alpha^4 \{ \alpha^2 \mathbf{p}^2/r + (\mathbf{p} \mathbf{B}) (\vec{\mathbf{p}} \mathbf{E}) (1 - \frac{1}{2} p^4 \partial) + \frac{1}{2} (\vec{\mathbf{p}} \mathbf{B}) (\mathbf{B} \mathbf{E}) p^4 \partial - \alpha^4 p^4 \partial \mathbf{p}^2/r \}. \quad (4.12)$$

In dem Gliede mit $1/r$, das schon mit α^2 erscheint, brauchen wir nur bis α^2 zu entwickeln:

$$L^\dagger \alpha^4 L = \alpha^4 + \alpha (\vec{\mathbf{p}}) (p^4)^{-1} + \frac{1}{2} \alpha^2 \alpha^4 \mathbf{p}^2 (p^4)^{-2} \quad (4.13)$$

$$L^\dagger \frac{1}{r} L = \frac{1}{r} - \alpha (\mathbf{B} \mathbf{E}) (p^4)^{-1} - \frac{\alpha^2}{2} \left\{ \Pi_i \Pi_k \frac{\partial E^k}{\partial x^i} - \mathcal{M}(\mathbf{E} \times \mathbf{p}) \right\} (p^4)^{-2}. \quad (4.14)$$

Die Matrix des Tensors $\Pi_i \Pi_k$ hat Übergangselemente von $\iota^4 = 3/2$ nach $\iota^4 = 3/2$ und $7/2$. Wenn wir am Schlusse wie beim Übergang von (3.15) nach (3.16) die ganze Gleichung mit $(\alpha^4)^{-1}$ multiplizieren, so daß die Glieder bis zur Ordnung α^2 mit der Einheitsmatrix multipliziert erscheinen, und dann zur Wellengleichung übergehen, so erscheinen also in der Ordnung α^4 Terme mit $\psi_{7/2}$. Anderseits hat der Tensor $\Pi_i \Pi_k$ auch Übergangselemente von $\iota^4 = 7/2$ nach $\iota^4 = 3/2$. Die Funktion $\psi_{7/2}$ wird dadurch auf $\alpha^2 \psi_{3/2}$ zurückgeführt, so daß $\alpha^4 \psi_{7/2}$ proportional $\alpha^6 \psi_{3/2}$ wird und neben $\alpha^4 \psi_{3/2}$ vernachlässigt werden kann. Für die $(\frac{1}{2} \frac{1}{2})$ -Elemente des Tensors berechnen wir im Anhang

$$\Pi_1^2 = \Pi_2^2 = \Pi_3^2 = \frac{3}{4}, \quad (4.15)$$

$$\Pi_i \Pi_k + \Pi_k \Pi_i = 0, \quad i \neq k, \quad (4.16)$$

daher, im Hinblick auf $\text{rot } \mathbf{E} = 0$,

$$\Pi_i \Pi_k \frac{\partial E^k}{\partial x^i} = \frac{3}{4} \text{div } \mathbf{E}. \quad (4.17)$$

In den Gliedern mit α^4 können wir $p^4 = 1$ und daher auch $\partial = 1$ setzen, womit sich der letzte Term in (4.12) vereinfacht. Bei der Bildung von $L^\dagger \alpha^4/r L$ verschwindet ein Glied mit $\alpha^4 (\mathbf{B} \mathbf{E})$ in der gewünschten Näherung wegen Symmetrisierung. Das Glied mit $(\vec{\mathbf{p}}) (\mathbf{B} \mathbf{E})$, das dabei auftritt, vereinigt sich mit entsprechenden Gliedern in (4.12) unter Heranziehung von Formel (A 9) des Anhangs zu (symmetrisieren!).

$$(\vec{\mathbf{p}}) (\mathbf{B} \mathbf{E}) - (\mathbf{p} \mathbf{B}) (\vec{\mathbf{p}} \mathbf{E}) = \frac{1}{2} \alpha^4 \text{div } \mathbf{E} - \frac{2}{3} \alpha^4 \mathcal{M}(\mathbf{E} \times \mathbf{p}). \quad (4.18)$$

Für $\mathbf{E} \times \mathbf{p}$ kann man schließlich $1/r^3$ setzen. So ergibt sich im ganzen

$$L^\dagger (\mu + \alpha (\vec{\mathbf{p}}) - \alpha^4 p^4 - \alpha^2 \alpha^4/r) L = \mu - \alpha^4 p^4 + \alpha^2 \alpha^4 \left(\frac{1}{2} \mathbf{p}^2 (p^4)^{-1} - \frac{1}{r} \right) + \alpha^4 \alpha^4 \left\{ \frac{1}{8} (\mathbf{p}^2)^2 - \frac{1}{2} \mathbf{p}^2 \frac{1}{r} + \frac{5}{8} \text{div } \mathbf{E} - \frac{5}{6} \frac{\mathcal{M} 1}{r^3} \right\}. \quad (4.19)$$

Wir entwickeln nun auch die Energie nach α :

$$p^4 = W_0 + \alpha^2 W_1 + \alpha^4 W_2 + \dots \quad (4.20)$$

und setzen den ganzen Ausdruck, vorläufig ohne die Zusatzglieder von (4.3), gleich Null. Es folgt mit $\mu = \alpha^4$ wie oben $W_0 = 1$, sodann aus dem Gliede mit α^2 :

$$W_1 = \frac{\mathbf{p}^2}{2} - \frac{1}{r}. \quad (4.21)$$

Wir entnehmen hieraus $\mathbf{p}^2 = 2(W_1 + 1/r)$ und in

Operatorenenschreibweise

$$\mathbf{p}^2 \frac{1}{r} = \frac{2}{r} \left(W_1 + \frac{1}{r} \right) + 2(\mathbf{E} \nabla) + \text{div } \mathbf{E}, \quad (4.22)$$

$$(\mathbf{p}^2)^2 = 4 \left(W_1 + \frac{1}{r} \right) + 4(\mathbf{E} \nabla) + 2 \text{div } \mathbf{E}. \quad (4.23)$$

Hier heben sich jeweils die letzten Glieder, da wir mit Rücksicht auf die gleichen Erwartungswerte [siehe etwa l. c. ⁶, Formel (12.15)]

$$\text{div } \mathbf{E} = 4\pi \delta(r) = -2(\mathbf{E} \nabla)$$

setzen können. Die Glieder mit α^4 ergeben dann unter Berücksichtigung eines Beitrages von $(p^4)^{-1} = 1 - \alpha^2 W_1$:

$$-\alpha^4 \alpha^4 \left\{ W_2 + \frac{1}{2} \left(W_1 + \frac{1}{r} \right)^2 + \frac{5}{4} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} + \frac{5}{6} \frac{\mathfrak{M} I}{r^3} \right\} = 0, \quad (4.24)$$

also wieder ein falsches Resultat, denn die Klammer sollte heißen [l. c. 6, Sect. 13]

$$W_2 + \frac{1}{2} \left(W_1 + \frac{1}{r} \right)^2 + \frac{1}{4} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} - \frac{1}{2} \frac{\mathfrak{M} I}{r^3} = 0. \quad (4.25)$$

Wir ziehen also jetzt die Glieder mit $c_1 \dots c_3$ heran. In dem Gliede mit c_1 heben sich wegen (4.23) die beiden letzten Terme. Der erste muß noch L -transformiert werden, weil er nur von der Größenordnung α^3 ist. Die Invariante K kommutiert mit \mathfrak{P} , und \vec{t} und \mathfrak{E} transformieren sich nach

$$L^\dagger \vec{t} L = \vec{t} + \alpha t^4 \mathfrak{p}, \quad (4.26)$$

$$L^\dagger \mathfrak{E} L = \mathfrak{E} + \alpha (\mathfrak{P} \nabla) \mathfrak{E}. \quad (4.27)$$

Schließlich ergibt sich

$$L^\dagger \{ (\alpha \vec{z} \mathfrak{p} - \alpha^4 p^4) (\mathfrak{P} \mathfrak{E}) + \dots \} L = -\alpha^4 (\mathfrak{P} \mathfrak{E}) - \alpha \alpha^4 \left\{ \left(\frac{\mathfrak{P}^2}{r^3} - 3 \frac{(\mathfrak{r} \mathfrak{P})^2}{r^5} \right) - \frac{1}{2} (\mathfrak{E} \nabla) - \frac{\mathfrak{M} I}{r^3} \right\} \quad (4.33)$$

bringen, wo das erste Glied wegen Symmetrisierung, das zweite wegen (4.15), (4.16) noch wegfallen. Zusammengestellt ergeben die Zusatzglieder in (4.3) schließlich

$$\alpha^4 \alpha^4 \left\{ c_1 \frac{1}{6} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} + c_2 \frac{1}{6} \frac{\mathfrak{M} I}{r^3} - c_3 \left(\frac{1}{4} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} + \frac{1}{2} \frac{\mathfrak{M} I}{r^3} \right) \right\}, \quad (4.34)$$

und fügt man dies Gl. (4.24) hinzu, um (4.25) zu erhalten, so ergibt sich

$$-c_2 + 3c_3 = 8, \quad -2c_1 + 3c_3 = 12. \quad (4.35)$$

Man hat also nur zwei Gleichungen für die drei Konstanten und könnte noch eine von ihnen fortlassen oder (3.17) streng erfüllen, doch muß man c_1 oder c_2 auf jeden Fall mitführen, und im Hinblick auf eine einfache Deutung des ganzen Zusatzes wird man sie nicht gut als verschieden annehmen können, sondern noch

$$c_1 = c_2 \quad (4.36)$$

verlangen müssen. Damit ergibt sich

$$c_1 = c_2 = -4, \quad c_3 = \frac{4}{3}. \quad (4.37)$$

Der Materieteil unserer LAGRANGE-Funktion heißt

$$L^\dagger K \vec{t} \mathfrak{E} L = L^\dagger K \mathfrak{E} \vec{t} L \\ = K \vec{t} \mathfrak{E} + \alpha K \left(t^4 \mathfrak{E} \mathfrak{p} + \Pi_i \iota_k \frac{\partial E^k}{\partial x^i} \right). \quad (4.28)$$

wobei bis auf $\Pi_i \iota_k$ alles symmetrisiert zu denken ist. Dabei ist in genügender Näherung

$$K \vec{t} + \vec{t} K = 0, \quad (4.29)$$

so daß das erste Glied rechter Hand verschwindet, und für $i \neq k$

$$\Pi_i \iota_k + \Pi_k \iota_i = 0, \quad (4.30)$$

so daß wegen $\text{rot } \mathfrak{E} = 0$ die gemischten Glieder wegfallen. Den Rest muß man weitläufiger berechnen, da dreifache Produkte zu symmetrisieren sind. Es ergibt sich nach einer im Anhang erläuterten Rechnung schließlich als Beitrag des Gliedes mit c_1 :

$$L^\dagger K \vec{t} \mathfrak{E} L = \frac{1}{3} \alpha \alpha^4 (\mathfrak{E} \nabla) + \dots. \quad (4.31)$$

Das Glied mit c_2 kann mit (3.10) und (3.18) geschrieben werden

$$I \vec{t} (\mathfrak{E} \times \mathfrak{p}) = -\frac{1}{3} \alpha \alpha^4 (\mathfrak{M} I) / r^3. \quad (4.32)$$

Da es mit α^4 multipliziert ist, bedarf es keiner L -Transformation mehr. Das Glied mit c_3 läßt sich durch ähnliche Rechnungen auf die Form

also endgültig

$$\mathcal{L} = L_0 - 4(L_1 + L_2 - \frac{1}{3} L_3), \quad (4.38)$$

und der Längenfaktor des „HEISENBERG-Terms“ (2.12) reduziert sich auf die Konstante (2.11).

Mathematischer Anhang

Wie eine t^4 -Darstellung des Matrizenringes auszurechnen ist, wurde in QM allgemein gezeigt. Es wurden dort insbesondere die (eine Darstellung der LORENTZ-Transformation bildenden) \mathfrak{P} - und \mathfrak{M} -Matrizen angegeben, aus deren ersten sich durch Vertauschen mit t^4 die \vec{t} -Matrizen, mit α^4 die \vec{z} -Matrizen herleiten lassen. Die t^4 -Matrix, a. a. O. und im folgenden ohne Index geschrieben, wenn sie selbst

als Index dient, hat die Eigenwerte $I+1$, $I+2$ etc., also für unseren Fall $3/2$, $5/2$, $7/2$ etc., vgl. Abb. 1. Die Matrix K ist a. a. O. (3.22) vollständig wieder-

gegeben; die Matrix \mathbf{z}^4 ergibt sich daraus als $\mathbf{z}^4 = i[\mathbf{t}^4 K]$, das ist mit der jetzt benutzten Bezeichnung σ statt \mathbf{z} :

$$\langle \mathbf{t}^4 \sigma | \mathbf{z}^4 | \mathbf{t}^4' \sigma' \rangle = \frac{1}{2} i \{ V(\mathbf{t}^4 + \sigma)(\mathbf{t}^4 - \sigma - 1) \delta_{\sigma, \sigma' + 1} - V(\mathbf{t}^4 + \sigma + 1)(\mathbf{t}^4 - \sigma) \delta_{\sigma, \sigma' - 1} \} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad (\text{A } 1)$$

Die \mathfrak{M} -Matrizen sind die (mehrmals aufgeschriebenen) Matrizen des Drehimpulses $1/2$, $3/2$ usw. Die Formel für die \mathfrak{P} -Matrizen lassen sich auch in geschlossener Form angeben [siehe (3.9) und (3.24) a. a. O.], doch läßt sich damit schlecht rechnen, weil

sie wegen der Irreduzibilität weder in σ noch in \mathbf{t}^4 diagonal sind. Man verfährt daher bequemer so, daß man erst die reduziblen $\vec{\mathbf{z}}$ berechnet und dann die \mathfrak{P} durch $\mathfrak{P} = i[\mathbf{z}^4 \vec{\mathbf{z}}]$ erzeugt. Man braucht nur $\mathbf{z}^3 = -i[\mathbf{z}^4 \Pi_3]$ mit Hilfe der expliziten Formel für Π_3 auszurechnen, wofür sich

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{t}^4 \sigma \mu | \mathbf{z}^3 | \mathbf{t}^4' \sigma' \mu' \rangle = & -\delta_{\mu'} \{ c^\sigma V(\mathbf{t}^4 + \sigma)(\mathbf{t}^4 - \sigma)(\sigma + \mu)(\sigma - \mu) \delta_{\sigma, \sigma' + 1} + I \mathbf{t}^4 \mu \delta_{\sigma\sigma'} / \sigma(\sigma + 1) \\ & + c^{\sigma+1} V(\mathbf{t}^4 + \sigma + 1)(\mathbf{t}^4 - \sigma - 1)(\sigma + \mu + 1)(\sigma - \mu + 1) \delta_{\sigma, \sigma' - 1} \} \delta_{\mu\mu'} \end{aligned} \quad (\text{A } 2)$$

ergibt. Die Koeffizienten c^σ sind allgemein durch QM (3.23) gegeben. Für $I = \frac{1}{2}$ reduzieren sie sich auf

$$c^\sigma = 1/2 \sigma. \quad (\text{A } 3)$$

Hieraus erhält man \mathbf{z}^1 und \mathbf{z}^2 durch Vertauschen mit M_1 und M_2 : es ist

$$\langle \mathbf{t}^4 \sigma \mu | \mathbf{z}^1 + i \mathbf{z}^2 | \mathbf{t}^4' \sigma' \mu' \rangle = \delta_{\mu'} \{ c^\sigma V(\mathbf{t}^4 + \sigma)(\mathbf{t}^4 - \sigma)(\sigma + \mu)(\sigma + \mu - 1) \delta_{\sigma, \sigma' + 1} \} \quad (\text{A } 4)$$

$$- I \mathbf{t}^4 V(\sigma + \mu)(\sigma - \mu + 1) / \sigma(\sigma + 1) \delta_{\sigma\sigma'} - c^{\sigma+1} V(\mathbf{t}^4 + \sigma + 1)(\mathbf{t}^4 - \sigma - 1)(\sigma - \mu + 1)(\sigma - \mu + 2) \delta_{\sigma, \sigma' - 1} \} \delta_{\mu, \mu' + 1}$$

und $\mathbf{z}^1 - i \mathbf{z}^2$ die hierzu hermitesch konjugierte Matrix. Man findet für die $\vec{\mathbf{z}}$ -Matrix, die in Abb. 1 das erste (obere linke) Quadrat bildet:

$$\langle \frac{3}{2} \frac{1}{2} \mu | \vec{\mathbf{z}} | \frac{3}{2} \frac{1}{2} \mu' \rangle = -I \{ i \sigma_1 + j \sigma_2 + f \sigma_3 \} = -I \vec{\sigma}, \quad (\text{A } 6)$$

wobei die σ_1 , σ_2 , σ_3 die „PAULI-Matrizen“ und i , j , f orthogonale Einheitsvektoren sind. Das zweite Quadrat wird gebildet von den Matrizen

$$\begin{aligned} \langle \frac{5}{2} \frac{1}{2} \mu | \vec{\mathbf{z}} | \frac{5}{2} \frac{1}{2} \mu' \rangle &= -\frac{5}{3} I \vec{\sigma}, \\ \langle \frac{5}{2} \frac{1}{2} \mu | \vec{\mathbf{z}} | \frac{5}{2} \frac{3}{2} \mu' \rangle &= i \frac{1}{3} \begin{pmatrix} \sqrt{6} & 0 & -\sqrt{2} & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{6} \end{pmatrix} + j \frac{1}{3} \begin{pmatrix} i\sqrt{6} & 0 & i\sqrt{2} & 0 \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 & i\sqrt{6} \end{pmatrix} + f \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 0 & -2\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}, \\ \langle \frac{5}{2} \frac{3}{2} \mu | \vec{\mathbf{z}} | \frac{5}{2} \frac{1}{2} \mu' \rangle &= \text{dasselbe hermitesch konjugiert} \quad (\text{A } 7) \\ \langle \frac{5}{2} \frac{3}{2} \mu' | \vec{\mathbf{z}} | \frac{5}{2} \frac{3}{2} \mu' \rangle &= -\frac{2}{3} I \mathfrak{M}_{3/2}, \end{aligned}$$

wobei $\mathfrak{M}_{3/2}$ die Matrix zum Drehimpuls $3/2$ bedeutet. Schreiben wir schließlich noch kürzer $\mathbf{z}_{35,1}^4$ für $\langle \frac{3}{2} \frac{1}{2} | \mathbf{z}^4 | \frac{5}{2} \frac{1}{2} \rangle$ und $\vec{\mathbf{z}}_{5,11}$ für $\langle \frac{5}{2} \frac{1}{2} \mu | \vec{\mathbf{z}} | \frac{5}{2} \frac{1}{2} \mu' \rangle$ usw., so gilt

$$\langle \frac{3}{2} \frac{1}{2} \mu | \Pi_j^2 | \frac{3}{2} \frac{1}{2} \mu' \rangle = \mathbf{z}_{35,1}^4 \mathbf{z}_{53,1}^4 \{ (\mathbf{z}_{5,11}^j - \mathbf{z}_{3,11}^j)^2 + \mathbf{z}_{5,13}^j \mathbf{z}_{5,31}^j \} \delta_{\mu\mu'}. \quad (\text{A } 8)$$

was für $j = 1, 2, 3$ jeweils $3/4$ ergibt, wie in (4.15) behauptet. Ähnlich ergibt sich (4.16).

Ferner berechnen wir für zwei beliebige Vektoren \mathbf{a} , \mathbf{b} :

$$\begin{aligned} \langle \frac{3}{2} \frac{1}{2} \mu | (\mathbf{a} \vec{\mathbf{z}}) (\mathbf{b} \vec{\mathfrak{P}}) | \frac{5}{2} \frac{1}{2} \mu' \rangle &= -\frac{1}{6} i \mathbf{z}_{35,1}^4 \{ (\mathbf{a} \mathbf{b}) + i \vec{\sigma} (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \}, \\ \langle \frac{3}{2} \frac{1}{2} \mu | (\mathbf{a} \vec{\mathbf{z}}) (\mathbf{b} \vec{\mathfrak{P}}) | \frac{3}{2} \frac{1}{2} \mu' \rangle &= \frac{1}{6} i \mathbf{z}_{35,1}^4 \{ 7(\mathbf{a} \mathbf{b}) - i \vec{\sigma} (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \}, \end{aligned} \quad (\text{A } 9)$$

wo $\vec{\sigma}$ die Vektormatrix von (A 6) ist. Setzt man hier für \mathbf{a} und \mathbf{b} geeignete Einheitsvektoren ein, so ergibt sich für die $(\frac{3}{2} \frac{5}{2})$ - bzw. $(\frac{5}{2} \frac{3}{2})$ -Elemente

$$(\vec{\mathbf{z}} \times \vec{\mathfrak{P}}) = \frac{2}{3} \mathbf{z}^4 \mathfrak{M} \quad (\text{A } 10)$$

und daraus in Verbindung mit der allgemein gültigen Formel (3.12) die Formel (3.18).

Formel (4.31) schließlich erhielten wir wie folgt: in (4.28) kann man mit Benutzung von (4.23) und den Vertauschungsrelationen $\iota^4 = i[\Pi_1 \iota_1] = i[\Pi_2 \iota_2] = i[\Pi_3 \iota_3]$ schreiben

$$\frac{1}{2} (K \iota^4 + \iota^4 K) (\mathfrak{E} \mathfrak{p}) + \Pi_i \frac{1}{2} (K \iota_k + \iota_k K) \frac{\partial E^k}{\partial x^i} = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^3 \{ K (\iota_i \Pi_i + \Pi_i \iota_i) + (\iota_i \Pi_i + \Pi_i \iota_i) K \} \frac{\partial E^i}{\partial x^i}. \quad (\text{A 11})$$

Die Matrizen $\iota_i \Pi_i + \Pi_i \iota_i$, $i=1, 2, 3$, haben die ersten nichtverschwindenden Elemente an den Stellen $(\frac{3}{2} \frac{7}{2})$ bzw. $(\frac{7}{2} \frac{3}{2})$ von Abb. 1. Diese zerfallen wieder nach σ in Elemente $(\frac{1}{2} \frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2} \frac{3}{2})$, $(\frac{1}{2} \frac{5}{2})$ und deren Adjungierte. Von diesen sind die Elemente $(\frac{1}{2} \frac{1}{2})$ für $i=1, 2, 3$ unter sich gleich, und es gilt hierfür (*nicht* summieren!)

$$\Pi_i \iota_i + \iota_i \Pi_i = -\frac{1}{3} (K \mathbf{z}^4 + \mathbf{z}^4 K). \quad (\text{A 12})$$

Die Elemente $(\frac{1}{2} \frac{3}{2})$ und $(\frac{1}{2} \frac{5}{2})$ sind unter sich ungleich für $i=1, 2, 3$, und für sie gilt diese Gleichung nicht. Beim Symmetrisieren mit K , wie es in (4.28)

ebenso wie in (1.3) verlangt wird, ergeben sich nichtverschwindende Elemente an den Stellen $(\frac{3}{2} \frac{5}{2})$ und $(\frac{5}{2} \frac{3}{2})$ der Abb. 1. Die unter sich gleichen Elemente erscheinen hier bei $(\frac{1}{2} \frac{1}{2})$ in σ , die ungleichen bei $(\frac{1}{2} \frac{3}{2})$ und $(\frac{3}{2} \frac{1}{2})$. Die ersten ergeben unter dem Summenzeichen von (A 11) einfach

$$-\frac{1}{3} (K^2 \mathbf{z}^4 + 2 K \mathbf{z}^4 K + \mathbf{z}^4 K^2) \operatorname{div} \mathfrak{E}, \quad (\text{A 13})$$

was sich ohne weitere Komplikationen ausrechnen lässt und auf (4.31) führt. Die letztgenannten Elemente fallen bei der Multiplikation mit $(\mathbf{z}^4)^{-1}$ weg und sind daher in (4.31) nur durch Punkte ange deutet.

Über die Erweiterung der Hartree-Fockschen Näherung durch Korrelationsfunktion

Von LEVENTE SZÁSZ

Aus dem Max-Planck-Institut für Physik und Astrophysik, Institut für Astrophysik, München
(Z. Naturforsch. 14 a, 1014—1020 [1959]; eingegangen am 26. September 1959)

To take into account the correlation between the valence electrons of an atom with N core electrons and two valence electrons we make use of the trial function suggested by FOCK, WESSELOW and PETRASHEN

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{(N+2)!}} \tilde{A} \varphi_1(1) \varphi_2(2) \dots \varphi_N(N) \tilde{\Phi}(N+1, N+2).$$

(Here \tilde{A} is the antisymmetrisation operator, $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N$ are the atomic core one-electron wave functions and $\tilde{\Phi}$ is the two-electron wave function of the valence electrons.)

We study the question: which system of equations will provide us with the best determination of the functions $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \tilde{\Phi}$? With the aid of the energy minimum principle it is shown that if one neglects the effect of the valence electrons on the atomic core the core electron functions can be determined from the HARTREE-FOCK equations $H_F \varphi_i = E_i \varphi_i$, (H_F =HARTREE-FOCK HAMILTONIAN operator, $i=1, 2, \dots, N$) while the valence electron function satisfies the equation:

$$\left[H_F(1) + H_F(2) + (1 - \mathcal{Q}(1,2)) \frac{1}{r_{12}} \right] \tilde{\Phi} = E \tilde{\Phi}.$$

{The operator $[1 - \mathcal{Q}(1,2)]$ is a projection operator with the following property: if one expands the function $\tilde{\Phi}(1,2)$ in terms of the functions of the operator $H_F(1) + H_F(2)$ then the operator $[1 - \mathcal{Q}(1,2)]$ removes the core functions $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N$ from the expansion.}

Das am häufigsten angewandte Näherungsverfahren zur Berechnung der Eigenfunktion und Energie der Atome ist bekanntlich die HARTREE-FOCKSche Methode. Bei diesem Näherungsverfahren wird die Eigenfunktion des Atoms aus Einelektroneneigenfunktionen aufgebaut; die Variation des Energieausdrucks nach den Einelektroneneigenfunktionen liefert ein System von Differentialgleichungen, das

mit der Methode des „self-consistent-field“ lösbar ist¹.

Obwohl die HARTREE-FOCKSche Methode bezüglich der Eigenfunktion und der Energie der Atome im

¹ Eine ausführliche Zusammenfassung über die HARTREE-FOCKSche Methode findet man bei D. R. HARTREE, „The calculation of the atomic structures“, John Wiley & Sons, Inc., New York 1957.