Vorlesung 20

Die Lamb-Verschiebung

Unter der Lamb-Verschiebung versteht man die Differenz zwischen den Energien der $2S_{1/2}$ und $2P_{1/2}$ Zustände im Wasserstoffatom. Zur Erinnerung – die Energien der Zustände $2S_{1/2}$ und $2P_{1/2}$ des Wasserstoffatoms sind sogar nach der Betrachtung der Feinstruktur identisch. Experimentell (Lamb, 1947) sind die Energien aber unterschiedlich:

$$E(2S_{1/2}) - E(2P_{1/2}) \approx 1 \text{ GHz.}$$
 (1)

Die Lamb-Verschiebung kann als Folge der Wechselwirkung des gebundenen Elektrons mit virtuellen Photonen verstanden werden, die für kurze Zeit aus dem Vakuum erzeugt werden und dann zurück ins Vakuum verschwinden. Diese Erklärung (Bethe, 1948) hat großen Schwung in die Entwicklung der relativistischen Quantenfeldtheorie gebracht.

Wir wollen in dieser Vorlesung die Argumentation von Bethe präsentieren. Die Wechselwirkung des Elektrons mit dem elektromagnetischen Feld beschreibt man mit dem Hamiltonoperator

$$H_{\rm int} = -\frac{e}{cm} \vec{A} \cdot \vec{p} + \mathcal{O}(\vec{A}^2), \tag{2}$$

wobei

$$\vec{A}(t,\vec{r}) = \sum_{\vec{k},\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k V}} \left(\vec{\epsilon}_{\lambda,\vec{k}} a_{\vec{k},\lambda} e^{-i\omega_k t + i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \epsilon_{\vec{k},\lambda}^* a_{\vec{k},\lambda}^{\dagger} e^{i\omega_k t - i\vec{k}\cdot\vec{r}} \right). \tag{3}$$

Wir können uns die Frage stellen, ob $H_{\rm int}$ die Energieniveaus des Wasserstoffatoms verschieben kann. Um diese Frage zu beantworten, wollen wir die Zustände des Wasserstoffatom so klassifizieren, dass wir die Wechselwirkung in Gl. (2) betrachten können. Weil die Wechselwirkung, $H_{\rm int}$, Photonen enthält, müssen wir die üblichen Zustände des Wasserstoffatoms $|n\rangle$ neu interpretieren

$$|n\rangle \to |n\rangle \otimes |0\rangle,$$
 (4)

wobei $|0\rangle$ der Vakuumzustand des elektromagnetischen Feldes ist.

Es folgt dann, dass in erster Ordnung der Störungstheorie in $H_{\rm int}$ die Energieniveaus nicht verschoben sind, weil

$$\langle 0|\vec{A}|0\rangle = 0. \tag{5}$$

Allerdings können wir in zweiter Ordnung eine Verschiebung erhalten

$$\Delta E_{\nu} = \sum_{\nu' \neq \nu} \frac{\langle \nu | H_{\text{int}} | \nu' \rangle \langle \nu' | H_{\text{int}} | \nu \rangle}{E_{\nu} - E_{\nu'}}, \tag{6}$$

wobei

$$|\nu\rangle = |n\rangle \otimes |0\rangle, \quad |\nu'\rangle = |n'\rangle \otimes |\vec{k}, \lambda\rangle,$$
 (7)

und

$$E_{\nu} = E_n, \quad E_{\nu'} = E_{n'} + \hbar \omega_k. \tag{8}$$

Beachten Sie, dass wir in Gl. (6) nur die Zustände mit einem Photon berücksichtigen, weil der Operator \vec{A} die Zahl von Photonen nur um ein Photon ändern kann. Die Matrixelemente des \vec{A} -Operators sind aus den vorangegangenen Vorlesungen bekannt

$$\langle \vec{k}, \lambda | \vec{A} \cdot \vec{p} | 0 \rangle = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k V}} \ \vec{p} \cdot \vec{\epsilon}_{\lambda, \vec{k}}^* e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad \langle 0 | \vec{A} \cdot \vec{p} | \vec{k}, \lambda \rangle = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k V}} \ \vec{p} \cdot \vec{\epsilon}_{\lambda, \vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}. \quad (9)$$

Die Summe über alle möglichen Zustände ν' schreiben wir als

$$\sum_{\nu'} = \int \frac{\mathrm{d}^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} V \sum_{n,\lambda} . \tag{10}$$

Wir erhalten

$$\Delta E = \int \frac{\mathrm{d}^{3}\vec{k}}{(2\pi)^{3}} V \frac{2\pi\hbar c^{2}}{\omega_{k}V} \frac{e^{2}}{m^{2}c^{2}} \sum_{n' \neq n,\lambda} \frac{\langle n|\vec{p}\cdot\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}|n'\rangle\langle n'|\vec{p}\cdot\vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}^{*}e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}|n\rangle}{E_{n} - E_{n'} - \hbar\omega_{k}}$$
(11)

Es ist schwierig, ΔE exakt zu berechnen. Dennoch ist es interessant, sich den Beitrag von hochenergetischen Photonen, d.h. Photonen mit Energien $\hbar\omega_k \gg E_n, E_{n'}$, anzusehen. Eine solche Rechnung gibt uns die Möglichkeit, ΔE abzuschätzen und auch ein interessantes Problem aufzuzeigen.

Falls $\hbar\omega_k \gg E_{n,n'}$ ist, können wir den Nenner in Gl. (11) in $(E_n - E_{n'})/(\hbar\omega_k)$ entwickeln. Wir werden die ersten zwei Terme in der Entwicklung betrachten und schreiben dementsprechend

$$\Delta E = \Delta E_1 + \Delta E_2 + \dots \tag{12}$$

Um $\Delta E_{1,2}$ am einfachsten zu schreiben, ist es nützlich, in Gl. (11) den Vorfaktor und das Integrationsmaß zu vereinfachen. Wir schreiben

$$\frac{\mathrm{d}^{3}\vec{k}}{(2\pi)^{3}}V \frac{2\pi\hbar c^{2}}{\omega_{k}V} \frac{e^{2}}{m^{2}c^{2}} \frac{1}{\hbar\omega_{k}} = \frac{\alpha}{\pi} \frac{\mathrm{d}E_{k}}{m^{2}c^{2}} \frac{\mathrm{d}\Omega_{k}}{4\pi}, \tag{13}$$

wobei $\alpha = e^2/(\hbar c)$ und $E_k = \hbar \omega_k$ sind. Wir erhalten dann

$$\Delta E_1 = -\frac{\alpha}{\pi} \frac{1}{m^2 c^2} \int dE_k \frac{d\Omega_k}{4\pi} \sum_{n' \neq n, \lambda} \langle n | \vec{p} \cdot \vec{\epsilon}_{\vec{k}, \lambda} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} | n' \rangle \langle n' | \vec{p} \cdot \vec{\epsilon}_{\vec{k}, \lambda}^* e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} | n \rangle$$
(14)

und

$$\Delta E_2 = -\frac{\alpha}{\pi} \frac{1}{m^2 c^2} \int \frac{\mathrm{d}E_k}{E_k} \frac{\mathrm{d}\Omega_k}{4\pi} \sum_{n' \neq n, \lambda} (E_n - E_{n'}) \langle n | \vec{p} \cdot \vec{\epsilon}_{\vec{k}, \lambda} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} | n' \rangle \langle n' | \vec{p} \cdot \vec{\epsilon}_{\vec{k}, \lambda}^* e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} | n \rangle$$
 (15)

Wir betrachten ΔE_1 , Gl. (14), und sehen, dass wir die Summe über n' mit Hilfe der Vollständigkeitsrelation¹

$$\sum_{n'} |n'\rangle\langle n'| = \hat{1} \tag{16}$$

¹Die Summe geht über $n' \neq n$; es ist aber einfach zu sehen, dass das Matrixelement $\langle n | \vec{p} \cdot \epsilon_{\lambda,k} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} | n \rangle$ Null ist.

ausführen können. Wir erhalten

$$\Delta E_1 = -\frac{\alpha}{\pi} \frac{1}{m^2 c^2} \int dE_k \, \frac{d\Omega_k}{4\pi} \sum_{\lambda} \langle n | \vec{p} \cdot \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda} \vec{p} \cdot \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}^* | n \rangle. \tag{17}$$

Wir benutzen dann

$$\sum_{\lambda} \epsilon_{\vec{k},\lambda} \epsilon_{\vec{k},\lambda}^* = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{\vec{k}^2},\tag{18}$$

mitteln über die Richtungen des \vec{k} -Vektors² und erhalten

$$\Delta E_1 = -\frac{2\alpha}{3\pi} \frac{1}{m^2 c^2} \int dE_k \sum_{\lambda} \langle n|\bar{p}^2|n\rangle.$$
 (19)

Wir führen die Energie des Photons als $E_k = \hbar \omega_k$ ein und schreiben Gl. (19) um zu

$$\Delta E_1 = -\frac{4\alpha}{3\pi} \langle n | \frac{\vec{p}^2}{2m} | n \rangle \frac{1}{mc^2} \int dE_k.$$
 (20)

Das Integral über E_k in Gl. (20) ist divergent. Wir führen einen Cut-off ein und schreiben

$$\int dE_k \to \int_0^{E_{\text{max}}} dE_k = E_{\text{max}}.$$
 (21)

Wir erhalten dann

$$\Delta E_1 = -\frac{4\alpha}{3\pi} \langle n | \frac{\vec{p}^2}{2m} | n \rangle \frac{E_{\text{max}}}{mc^2}, \tag{22}$$

und sehen, dass der Limes $E_{\rm max} \to \infty$ nicht existiert.

Wir haben festgestellt, dass ΔE_1 unendlich ist. Was bedeutet dieses Ergebnis? Um das zu verstehen, müssen wir beachten, dass dieses Ergebnis für alle möglichen Zustände gilt (d.h. wir haben in der Berechnung nicht benutzt, dass wir es mit Wasserstoffatomzuständen zu tun haben). In der Tat können wir ein freies Elektron betrachten, das wir mit folgendem Hamiltonoperator beschreiben

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + H_{\text{int}} \tag{23}$$

und dann fragen, welche Energie ein Elektron mit dem Impuls \vec{p} hat. Falls wir die Effekte zweiter Ordnung in $H_{\rm int}$ berücksichtigen, finden wir

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} \left(1 - \frac{4\alpha}{3\pi} \frac{E_{\text{max}}}{mc^2} \right). \tag{24}$$

Andererseits ist die Energie eines freien Elektrons mit dem Impuls \vec{p} durch

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m_{\text{phys}}} \tag{25}$$

²Das bedeutet: $\delta_{ij} \to \delta_{ij}$ und $k_i k_j / \vec{k}^2 \to 1/3 \delta_{ij}$.

gegeben ist, wobei $m_{\rm phys}$ die physikalische Elektronmasse ist. Die Relation zwischen m und $m_{\rm phys}$ ist dann

$$m_{\rm phys} = m \left(1 + \frac{4\alpha}{3\pi} \frac{E_{\rm max}}{mc^2} \right). \tag{26}$$

Diese Gleichung ist sehr merkwürdig, weil im Limes $E_{\rm max} \to \infty$ die rechte Seite divergiert. Es gibt einen physikalischen Cut-off $E_{\rm max} \sim mc^2$, da wir sonst die nichtrelativistische Quantenmechanik nicht benutzen können. Auf jeden Fall, was unsere Berechnung betrifft, werden wir ΔE_1 ignorieren, weil wir uns für Effekte der gebundenen Zustände interessieren, und nicht für die Effekte, die auch für ein freies Elektron in Frage kommen.

Wir betrachten dann ΔE_2 in Gl. (15). Wir werden die Berechnung von ΔE_2 in der Dipol-Näherung $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \to 1$ durchführen. Das bedeutet, dass $ka_B \ll 1$, wobei $a_B = \hbar/(me^2)$ ist. Diese Begrenzung bedeutet, dass $E_k \sim \alpha mc^2$ sein soll. Andererseits, weil $E_n \sim mc\alpha^2$ ist, können wir in E_n/E_k entwickeln und in der Dipol-Näherung arbeiten. Wir erhalten

$$\Delta E_2 = -\frac{\alpha}{\pi} \frac{1}{m^2 c^2} \int \frac{dE_k}{E_k} \frac{d\Omega_k}{4\pi} \sum_{n' \neq n, \lambda} (E_n - E_{n'}) \langle n | \vec{p} \cdot \vec{\epsilon}_{\vec{k}, \lambda} | n' \rangle \langle n' | \vec{p} \cdot \vec{\epsilon}_{\vec{k}, \lambda}^* | n \rangle$$
 (27)

Als ersten Schritt summieren wir über die Polarisationen λ und integrieren über die Richtungen des \vec{k} -Vektors. Wir erhalten

$$\Delta E_{2} = -\frac{2\alpha}{3\pi} \frac{1}{m^{2}c^{2}} \int \frac{dE_{k}}{E_{k}} \sum_{n'} (E_{n} - E_{n'}) \langle n|\vec{p}_{i}|n' \rangle \langle n'|\vec{p}_{i}|n \rangle$$

$$= -\frac{2\alpha}{3\pi} \frac{1}{m^{2}c^{2}} \int \frac{dE_{k}}{E_{k}} \sum_{n'} \langle n|[H, \vec{p}_{i}]|n' \rangle \langle n'|\vec{p}_{i}|n \rangle$$

$$= -\frac{2\alpha}{3\pi} \frac{1}{m^{2}c^{2}} \int \frac{dE_{k}}{E_{k}} \langle n|[H, \vec{p}_{i}]\vec{p}_{i}|n \rangle$$
(28)

Das letzte Matrixelement können wir dann so berechnen

$$\langle n|[H,\vec{p}_{i}]\vec{p}_{i}|n\rangle = -e^{2}\hbar^{2} \int d^{3}\vec{r} \,\Psi_{n}(\vec{r}) \,\left[\partial_{i},\frac{1}{r}\right] \,\partial_{i}\Psi_{n}(\vec{r})$$

$$= -\frac{e^{2}\hbar^{2}}{2} \int d^{3}\vec{r} \,\partial_{i} \left(\Psi_{n}^{2}(\vec{r})\right) \,\partial_{i} \left(\frac{1}{r}\right) = \frac{e^{2}\hbar^{2}}{2} \int d^{3}\vec{r} \,\Psi_{n}^{2}(\vec{r}) \,\vec{\partial}^{2} \left(\frac{1}{r}\right)$$
(29)

Wir benutzen

$$\vec{\partial}^2 \left(\frac{1}{r}\right) = -4\pi \delta^{(3)}(\vec{r}) \tag{30}$$

und erhalten dann

$$\langle n|[H,\vec{p_i}]|\vec{p_i}|n\rangle = -2\pi\hbar^2 e^2 |\Psi_n(0)|^2,$$
 (31)

wobei für das Wasserstoffatom

$$\Psi_n(0) = \frac{1}{\pi a_B^3 n^3} \delta_{l0},\tag{32}$$

wobei l der Eigenwert des Bahndrehimpulses ist.

Wir können jetzt die Berechnung von ΔE_2 fortsetzen. Wir bekommen

$$\Delta E_2 = -\frac{2\alpha}{3\pi} \frac{1}{m^2 c^2} \left(-2\pi \hbar^2 e^2 \right) \frac{1}{\pi n^3 a_B^3} \, \delta_{l0} \, \int \frac{\mathrm{d}E_k}{E_k} = \frac{4\alpha}{3\pi} \, \frac{e^2}{a_B} \frac{\hbar^2}{m^2 c^2 a_B^2} \, \delta_{l0} \, \int \frac{\mathrm{d}E_k}{E_k} \quad (33)$$

Wir benutzen dann

$$a_B = \frac{\hbar}{mc\alpha}, \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \quad \Rightarrow \frac{e^2}{a_B} = mc^2\alpha^2 = 2E_{1S}, \quad \frac{\hbar^2}{m^2c^2a_B^2} = \alpha^2,$$
 (34)

und erhalten

$$\Delta E = \Delta E_2 = \frac{4mc^2\alpha^5}{3\pi n^3} \delta_{l0} \int_{mc\alpha^2}^{E_{\text{max}}} \frac{dE_k}{E_k} \approx \frac{4mc^2\alpha^5}{3\pi n^3} \delta_{l0} \ln \frac{E_{\text{max}}}{mc\alpha^2}$$
(35)

Für den letzten Schritt haben wir über E_k über das Intervall $mc^2\alpha^2 < E_k < E_{\rm max}$ integriert. Die untere Integrationsgrenze entsteht aus der Näherung $E_n \sim mc\alpha^2 \ll E_k$. Die obere Integrationsgrenze müsste eigentlich $E_{\rm max} \sim mc\alpha$ sein, um unsere Dipol-Näherung zu rechtfertigen. Man kann aber zeigen, dass man die Dipol-Näherung nicht wirklich braucht, um das Integral in Gl. (35) zu erreichen. In dem Fall ist $E_{\rm max} \sim mc^2$, so dass das richtige Ergebnis in der logarithmischen Näherung lautet

$$\Delta E_{nS_{1/2}} = \frac{4mc^2\alpha^5}{3\pi n^3} \delta_{l0} \ln \frac{1}{\alpha^2}.$$
 (36)