Zeitschrift: Helvetica Physica Acta

Band: 24 (1951)

Heft: III

Artikel: Allgemeine Theorie der Dämpfungsphänomene für nicht-stationäre Prozesse. I., Grundlagen und Zusammenhang mit dem S-Matrix-Formalismus

Autor: Arnous, E. / Zienau, S.

DOI: https://doi.org/10.5169/seals-112217

Allgemeine Theorie der Dämpfungsphänomene für nicht-stationäre Prozesse.

I. Grundlagen und Zusammenhang mit dem *S*-Matrix-Formalismus

von **E. Arnous***) und **S. Zienau****).

Seminar für theoretische Physik, Universität Zürich.

(20. III. 1951.)

Abstract: The damping theory of discrete states is adapted to the positron theory in an operator form. A solution of HEITLER's integral equation can be obtained in closed form and an operator is defined which combines the damping constants and the elements of the collision operator, when written in energy representation. The formalism is the result of an *exact* time integration of the Schrödinger equation. The connection with the S-Matrix formalism is discussed.

Einleitung.

Der in letzter Zeit im Verständnis der Quantenelektrodynamik erzielte Fortschritt ist bisher vorwiegend der Theorie der Wechselwirkung zwischen freien Teilchen zugute gekommen. Man konnte zeigen, dass die kovariante Formulierung der Pauli-Heisenbergschen Theorie die von TOMONAGA[1]), FEYNMAN[2]), SCHWINGER[3]) und anderen geleistet wurde, zur Grundlage einer allgemeinen Behandlung von Stossprozessen zwischen Elektronen, Positronen und Photonen gemacht werden kann[4]). In der Theorie derartiger Prozesse, bei denen bekanntlich auch Erzeugungen und Vernichtungen von Teilchen eine Rolle spielen, kann man entweder die schon vor einiger Zeit vorgeschlagene stationäre Methode von HEITLER und PENG[5]) benutzen, oder aber einen Formalismus der im wesentlichen auf Heisenberg zurückgeht und besonders neuerdings befürwortet wird.

In diesem betrachtet man einen Operator, die sogenannte *S*-Matrix, deren Elemente durch konsequente Anwendung der Störungsrechnung bis zu jeder vorgeschriebenen Ordnung in der Kopplungs(Feinstruktur)-Konstante berechenbar sind. Für derartige Rechnungen sind Regeln angegeben worden ,und es wird angenom-

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

**) Travelling Fellow, University of London.

men, dass alle in höheren Näherungen angetroffenen Divergenzen durch die Idee der Massen- und Ladungsrenormalisierung eliminiert werden können. Die physikalischen Aussagen der Theorie, z. B. Streuquerschnitte, sind übrigens auch durch die gewöhnliche Störungsrechnung im Impulsraum berechenbar, wenn die Renormalisationstechnik hinzugezogen wird[6]). Es möge bemerkt werden, dass der physikalische Inhalt des Heitlerschen Formalismus identisch mit dem der S-Matrix ist (bis auf geringfügige Unterschiede auf die wir noch zurückkommen werden).

Anders steht es allerdings mit Problemen, bei welchen gebundene Zustände eine Rolle spielen. Es ist zwar gezeigt worden, dass die Linienverschiebung, die von der Wechselwirkung mit der Strahlung herrührt, in eindeutiger Weise in Übereinstimmung mit dem Experiment (Lamb-Retherford shift) berechenbar ist[7]). Aber bis jetzt scheint kein Versuch gemacht worden zu sein, Fragen die mit der Linienbreite verbunden sind (z. B. die höheren strahlungstheoretischen Korrektionen zur Linienbreite) generell im Rahmen der Löchertheorie und der Renormalisationsideen zu behandeln. Diese Klasse von Problemen scheint grundsätzlich ausserhalb des Bereichs der S-Matrix-Technik zu liegen*). Eine exakte Zeitintegration der Schrödingergleichung für diskrete Zustände wurde schon von Heitler und Ma[8]) publiziert. Der vorliegende Teil dieser Arbeit enthält eine Adaptierung dieser Theorie auf den Positron-Formalismus. Da die Arbeit von Heitler-Ma wenig bekannt zu sein scheint, werden wir alle Entwicklungen ab initio darzustellen versuchen und benutzen von vorneherein einen auf die Positronentheorie zugeschnittenen Operatorenformalismus. Die Zusammenhänge mit der Dysonschen Methode werden wir ausführlich erörtern. Neben anderem enthält die Arbeit auch eine neue, wie uns scheint, besonders einfach motivierte Ableitung der Heitlerschen Integralgleichung und deren Lösung in geschlossener (operationeller) Form. Ein Operator $\mathfrak{D}$, genannt Dämpfungsoperator, wird eingeführt, mit der Eigenschaft, dass seine Diagonalelemente die Dämpfungskonstanten geben, während die Nichtdiagonalelemente den Stossoperator darstellen. Dies wird möglich durch die von Heitler und Ma eingeführte Darstellung im Energieraum. Für die Elemente von $\mathfrak{D}$ werden nach Potenzen der Feinstrukturkonstante fortschreitende Entwicklungen angegeben. Im zweiten Teil der Arbeit wird

*) Die von Kramers angeschnittene Frage, inwieweit die Pauli-Heisenbergsche Quantenelektrodynamik prinzipiell in der Lage ist, der Wechselwirkung zwischen Strahlung und Materie in den für Linienbreitefragen wichtigen, längeren Zeitintervallen Rechnung zu tragen, wird hier nicht berücksichtigt.

gezeigt werden, wie die divergenten Anteile von diesen Ausdrücken auch hier durch Renormalisationen eliminiert werden können. Die kalkulatorische Handhabung der in dieser Arbeit dargestellten, vom Üblichen etwas abweichenden Technik wird dort ebenfalls erörtert werden, und wir hoffen auch die strahlungstheoretischen Korrekturen zur Linienbreite explizit auswerten zu können.

§ 1. Allgemeines.

Im folgenden werden gewisse singuläre Operator-Funktionen gebraucht, deren Eigenschaften hier kurz zusammengestellt seien.

$H_0 \equiv$ ungestörter Hamilton-Operator.

$\quad = H_0^{\mathrm{Mat}} + H_0^{\mathrm{Rad}} + H^S$.

H_0^{Mat} enthält hier die Wechselwirkung mit dem äusseren Feld (z. B. Kernpotential).

H^S Selbstenergieoperator.

$H \equiv H_1 - H^S$.

$H_1 \equiv$ Hamiltonoperator der Wechselwirkung Strahlung-Materie.

Die Form von H^S und H_1 wird im zweiten Teil diskutiert werden; alle Rechnungen sind davon unabhängig, wenn nicht ausdrücklich das Gegenteil bemerkt ist.

Diese Operatoren sind z. B. im Besetzungszahlraum des Elektronen-Positronen- und Photonenfeldes erklärt zu denken.

$\varphi_0 \equiv$ Schrödingerfunktional für den Ausgangszustand (Eigenfunktion von H_0) zur Zeit $t = 0$. Definiert wird nun

$$\delta(E - H_0) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{it(E-H_0)}\, dt \equiv \frac{1}{\pi} \int_{0}^{+\infty} \cos t(E - H_0) \cdot dt \tag{1}$$

$$\xi(E - H_0) \equiv -i \int_{0}^{+\infty} e^{it(E-H_0)}\, dt = -2\pi i\, \delta_+(E - H_0). \tag{2}$$

Daraus folgt ($\varepsilon(t) = \pm 1,\ t \gtrless 0$)

$$\frac{P}{E - H_0} = \xi(E - H_0) + i\pi\,\delta(E - H_0)$$

$$= \int_{0}^{\infty} \sin t(E - H_0) \cdot dt = \frac{1}{2i} \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon(t)\, e^{it(E-H_0)}\, dt \tag{3}$$

Das Gleichheitszeichen ist im Sinne der Äquivalenz unter einem Integralzeichen zu verstehen.

Diese Operatoren sind diagonal im Besetzungszahlraum oder, was damit äquivalent ist, im System der Eigenfunktionen von H_0. Wir brauchen ihre Eigenschaften

$$\xi(E-H_0)\cdot(E-H_0)=1\,. \quad \text{(Einheitsoperator)} \tag{4}$$

$$\delta(E-H_0)\cdot(E-H_0)=0\,. \tag{5}$$

$$\frac{-1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-it(E-H_0)}\,\xi(E-H_0)\,dE=\eta(t)=\begin{cases}1, t>0\\ 0, t<0\end{cases}. \tag{6}$$

$$\frac{-1}{2\pi i}\lim_{t\to\pm\infty} e^{-it(E-H_0)}\,\xi(E-H_0)=\begin{cases}\delta(E-H_0)\\ 0\end{cases} \tag{7}$$

In (1)—(7) ist E eine positive oder negative c-Zahl.

§ 2. Nicht-stationäre Lösungen der Wellengleichung.

Für nicht-stationäre Emissions- oder Streuprobleme geht man bekanntlich von der zeitabhängigen Schrödingergleichung mit Randbedingung aus:

$$\left.\begin{aligned} i\,\frac{\partial R(t)}{\partial t}&=(H_0+H)\,R(t), \quad t>0\\ R(0)&=1\,. \end{aligned}\right\} \tag{8}$$

wobei die Wellenfunktion zur Zeit t

$$\Omega(t)=R(t)\,\varphi_0 \tag{8'}$$

wird. In der Dämpfungstheorie sucht man eine nicht-stationäre Lösung und schreibt sie nach dem Vorgang von Heitler und Ma in Form einer Superposition von stationären Lösungen

$$R(t)=\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-itE}R(E)\,\lambda(E)\,dE\,, \quad t>0\,. \tag{9}$$

$\lambda(E)$ stellt die Dichte der stationären Zustände im E-Raum dar, und es genügt $\lambda(E)$ diagonal*) anzunehmen.

*) Diagonal, d. h. in bezug auf den Besetzungszahlraum der Elektronen-Positronen *und* Photonen. Im folgenden soll der diagonale Teil eines Operators durch einen Index d, der Teil ausserhalb der Diagonale durch $n.\,d.$ gekennzeichnet werden.

Durch Einsetzen in (8) folgt

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE\,(E-H_0-H)\,R(E)\,\lambda(E)\,e^{-itE}=0\,,\quad t>0\,. \tag{10}$$

Für ein festes E wäre das Problem hiermit auf den üblichen stationären Fall zurückgeführt. Dieser wird gelöst durch einen der Ausstrahlbedingung genügenden Ansatz, den man nach DIRAC (siehe z. B. Quantum Mechanics, 3rd. edtn., 1947, p. 198) in unserer Schreibweise

$$R(E)=1+\xi(E-H_0)\cdot U(E)$$

schreiben kann, wo U(E) ein Operator *ohne* Diagonalelemente ist. Mit (4) erhält man dann

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE\,(E-H_0-H+U-H\,\xi\,U)\,\lambda(E)\,e^{-itE}=0\,,\quad t>0\,, \tag{10'}$$

wo ξ für $\xi(E-H_0)$, U für $U(E)$ geschrieben ist, eine Bezeichnung, die weiter beibehalten wird. Zur Erfüllung dieser Bedingung setzen wir

$$(E-H_0-H+U-H\,\xi\,U)\,\lambda(E)=1 \quad \text{(Einheitsoperator)} \tag{10''}$$

da sich die linke Seite von (10′) dann auf $2\,\pi\delta(t)\cdot 1$ reduziert, was für $t>0$ verschwindet. Es wird sich zeigen, dass durch (10″) gerade die Anfangsbedingung erfüllt wird wodurch die Lösung eindeutig wird. Indem man den nicht-diagonalen Teil von (10″) absondert und Null setzt, folgt

$$U(E)=\big(H+H\cdot\xi(E-H_0)\,U(E)\big)_{n.d.}\,. \tag{11}$$

Dies ist die bekannte Heitlersche Integralgleichung in Operatorenform. Um $\lambda(E)$ zu bestimmen, definiert man den diagonalen Operator

$$\Gamma(E)=2\,i\,(H+H\,\xi\,U)_d \tag{12}$$

und aus dem diagonalen Teil von (10″) hat man

$$\lambda(E)=\Big(E-H_0+\frac{i}{2}\,\Gamma(E)\Big)^{-1}. \tag{13}$$

Das Schrödingerfunktional wird

$$\Omega(t)=\frac{-1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} dE\,e^{-iEt}\big(1+\xi(E-H_0)U(E)\big)\Big(E-H_0+\frac{i}{2}\Gamma(E)\Big)^{-1}\varphi_0\,,$$
$$t>0\,, \tag{14}$$

oder wenn wir nach Eigenfunktionen von H_O entwickeln

$$\Omega(t) = \sum_n b_n(t)\, e^{-iE_n t}\, \varphi_n$$

$$b_O(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE\, e^{it(E_0 - E)} \left(E - E_0 + \frac{i}{2}\Gamma_{0/0}(E)\right)^{-1}, \quad t > 0$$

$$\underset{A \neq 0}{b_A(t)} = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE\, e^{it(E_A - E)}\, \xi(E - E_A) \times$$

$$\times U_{A/0}(E) \left(E - E_0 + \frac{i}{2}\Gamma_{0/0}(E)\right)^{-1}. \qquad (14')$$

Die Normierung der Amplituden $|b_O(t)|^2 + \sum_{A \neq 0} |b_A(t)|^2 = 1$ für jede Zeit t wird im folgenden verifiziert werden.

In der sog. Wechselwirkungsdarstellung hat man allgemein für das Funktional

$$\psi(t) = e^{itH_O}\, \Omega(t) = S(t)\, \varphi_O \quad t > 0,$$

$$S(t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE\, e^{-it(E - H_O)} \left(1 + \xi(E - H_O) U(E)\right) \left(E - H_O + \frac{i}{2}\Gamma(E)\right)^{-1}. \qquad (15)$$

Die Reihenfolge der Operatoren ist übrigens hier wie oben wesentlich, denn H_O kommutiert nicht mit $U(E)$.

$S(\infty)$ ist die S-Matrix und enthält, wie wir sehen werden, auch alle Dämpfungseffekte. Es bleibt noch zu beweisen, dass dieser Operator die Anfangsbedingung $S(+0) = 1$ erfüllt. (Die Unitarität von S folgt dann aus der Wellengleichung in Wechselwirkungsdarstellung unter Berücksichtigung der Hermitizität von H).

Zum Beweis von $\lim_{t \to +0} S(t) = 1$ wollen wir $S(t)$ nun auf die negative t-Achse fortsetzen. Man sieht sofort aus (10), (10'), dass der Ansatz (10'') so beschaffen ist, dass $S(t)$ die Gleichung

$$i \frac{\partial S(t)}{\partial t} = H(t)\, S(t) + i\,\delta(t) \cdot 1$$

für alle, einschliesslich negative, t löst. $S(t)$ ist also die Green'sche Funktion zur Schrödinger-Gleichung mit Sprung 1 an der Stelle $t = 0$. Weiter kann $S(t)$ durch die Umformung

$$1 + \xi(E - H_O) U(E) = \xi(E - H_O) \left\{\left(E - H_O + \frac{i}{2}\Gamma(E) + U(E) - \frac{i}{2}\Gamma(E)\right)\right\}$$

auf die Form

$$S(t) = \eta(t) - \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} dE\, e^{-it(E - H_O)}\, \xi\left(U - \frac{i}{2}\Gamma\right) \left(E - H_O + \frac{i}{2}\Gamma(E)\right)^{-1} \quad (16)$$

gebracht werden, wobei (6) benutzt ist. Vergleich mit (7) zeigt jetzt, dass $\lim_{t \to -\infty} S(t) = 0$. Da in dem Intervall $-\infty < t < 0$, $S(t)$ der homogenen Schrödinger-Gleichung gehorcht, also auch normiert bleibt, so folgt dass $S(t)$ für $t < 0$ überhaupt auf Null normiert ist. Folglich verschwindet $S(t)$ in diesem Intervall identisch, also auch $\lim_{t \to -0} S(t) = 0$. Es folgt dann sofort $\lim_{t \to +0} S(t) = 1$*).

Die Fortsetzung von $S(t)$ auf die negative t-Achse ist hier zu rein analytischen Zwecken erfolgt und hat natürlich keinerlei physikalische Bedeutung. Ein anderer, unabhängiger Beweis der Anfangsbedingung wird sich auch weiter unten ergeben. Aus (16) folgt auch noch durch Fourierinversion, dass $U(E)\,\lambda(E)$ und $\Gamma(E)\,\lambda(E)$ keine Singularitäten in der oberen E-Halbebene besitzen (da die Singularitäten von $\xi(E-H_0)$ alle in der unteren Halbebene liegen).

Es zeigt sich also, dass die Integralgleichung für $U(E)$ den Bewegungsgleichungen mit Anfangsbedingung vollständig äquivalent ist.

Aus (16) folgt noch

$$S(+\infty) = 1 + \int_{-\infty}^{\infty} \delta(E-H_0)\left(U(E) - \frac{i}{2}\Gamma(E)\right)\left(E - H_0 + \frac{i}{2}\Gamma\right)^{-1} dE \tag{17}$$

als Darstellung der S-Matrix im Energieraum.

3. Der Dämpfungsoperator und die Lösung der Heitlerschen Gleichung.

Wir definieren einen Operator $\mathfrak{D}(E)$ der U und Γ verbindet. U wurde als nicht-diagonal vorausgesetzt, während Γ seiner Definition nach diagonal ist. Die physikalische Bedeutung von U und Γ wird noch ersichtlich werden. Durch Einführung von (15) in die Schrödingergleichung bekommt man die Formel

$$\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} dE\, e^{-iEt}\Big\{\left(E - H_0 + \frac{i}{2}\Gamma(E)\right) - H + U(E) - H \cdot \xi(E-H_0)\,U(E)$$
$$- \frac{i}{2}\Gamma(E)\Big\} \times \left(E - H_0 + \frac{i}{2}\Gamma(E)\right)^{-1} \varphi_0 = 0\,, \quad t > 0\,.$$

Daraus folgt, dass der Operator

$$-\frac{i}{2}\Gamma(E) + U(E) - H - H\,\xi(E-H_0) \cdot U(E) \tag{18}$$

*) Die Anregung zu diesem Beweis verdanken wir Herrn K. Bleuler.

ein Nulloperator ist. Die nicht-diagonalen Elemente von (18) ergeben die Heitlersche Integralgleichung

$$U(E) = \{H(1 + \xi U)\}_{n.d.} \tag{19}$$

während für die Diagonalelemente

$$\Gamma(E) = 2i\{H(1 + \xi U)\}_d \tag{20}$$

folgt. Wir definieren

$$\mathfrak{D}(E) = H\big(1 + \xi(E - H_0)\,U(E)\big) \tag{21}$$

und können schreiben

$$\begin{aligned} U(E) &= \{\mathfrak{D}(E)\}_{n.d.} \\ \Gamma(E) &= 2i\{\mathfrak{D}(E)\}_d . \end{aligned} \tag{22}$$

Der Operator $\mathfrak{D}(E)$ ist für einen bestimmten Wert des Parameters E bekannt, wenn die Lösung von (19), $U(E)$ zur Verfügung steht. Diese Gleichung kann auch

$$\{\big(1 - H\cdot\xi(E - H_0)\big)\,U(E) - H\}_{n.d.} = 0$$

geschrieben werden, oder auch in äquivalenter Form

$$(1 - H\xi)\,U(E) - H = X_d \tag{19'}$$

wo X_d ein zunächst unbekannter Operator *mit verschwindenden Nicht-Diagonalelementen ist.* Folglich

$$U(E) = \big(1 - H\cdot\xi(E - H_0)\big)^{-1}(H + X_d)$$

woraus nun X_d durch die Bedingung

$$\{U(E)\}_d = 0$$

bestimmt werden kann:

$$\{U\}_d = \{(1 - H\xi)^{-1}H\}_d + \{(1 - H\xi)^{-1}\}_d X_d = 0 .$$

Also

$$X_d = -\,[\{(1 - H\xi)^{-1}\}_d]^{-1}\{(1 - H\xi)^{-1}H\}_d$$

und endlich

$$\begin{aligned} U(E) &= \big(1 - H\xi(E - H_0)\big)^{-1}H \\ &- \big(1 - H\xi(E - H_0)\big)^{-1}\big(((1 - H\xi)^{-1})_d\big)^{-1}\big((1 - H\xi)^{-1}H\big)_d . \end{aligned} \tag{23}$$

Damit haben wir eine *explizite Lösung* für U gewonnen. Es ist nun leicht, eine Entwicklung von $U(E)$ nach Potenzen der in H steckenden Kopplungskonstante zu gewinnen. Um dies zu tun, bemerken wir, dass $(1 - H\xi)^{-1} H \equiv H(1 - \xi H)^{-1}$, dass ξ diagonal ist und entwickeln die Nenner in (23). Nach einiger Algebra folgt

$$U(E) = H_{n.d.} + (H\xi H)_{n.d.} - (H\xi)_{n.d.} H_d + (H\xi H\xi H)_{n.d.}$$
$$- H_{n.d.} (\xi H \xi H)_d - (H\xi H\xi)_{n.d.} H_d + (H\xi)_{n.d.} (H\xi)_d H_d + \cdots$$

oder auch

$$U(E) = H_{n.d.} + (H\xi H_{n.d.})_{n.d.} + \big(H\xi (H\xi H_{n.d.})_{n.d.}\big)_{n.d.} \qquad (24)$$

bis zur dritten Ordnung. Es ist konsequenter (23) in (21) einzusetzen, worauf als Entwicklung von $\mathfrak{D}(E)$

$$\mathfrak{D}(E) = H\big(1 + \xi H_{n.d.} + (\xi H(\xi H)_{n.d.})_{n.d.} + \cdots\big) \qquad (25)$$

resultiert. Die Entwicklung (24) und die von $\Gamma(E)$

$$\frac{1}{2i}\,\Gamma(E) = \{H + H\xi H_{n.d.} + H\xi (H\xi H_{n.d.})_{n.d.} + \cdots\}_d \qquad (26)$$

können dann direkt abgelesen werden. Der Operator $\Gamma(E)$ ist nicht hermitisch, und seine hermitischen und antihermitischen Teile haben verschiedene physikalische Bedeutung. Wir notieren ihre Entwicklung, wobei allerdings H als hermitisch vorausgesetzt wird: ($R\Gamma \equiv$ hermitischer Teil, $Jm\,\Gamma \equiv$ antihermitischer Teil).

$$R\Gamma(E) = 2\pi\{H\delta H_{n.d.} + H\delta(HPH_{n.d.})_{n.d.}$$
$$+ HP(H\delta H_{n.d.})_{n.d.} + \cdots\}_d \qquad (27)$$

$$\tfrac{1}{2} Jm\,\Gamma(E) = \{H + HPH_{n.d.} + HP(HPH_{n.d.})_{n.d.}$$
$$- \pi^2 H\delta(H\delta H_{n.d.})_{n.d.} \qquad (27')$$

Wir fügen noch die Ableitung einer anderen Formel für $R\Gamma(E)$ bei, die weiter unten benutzt wird. Aus (21), $\mathfrak{D}^+(E) = H + U^+(E)\cdot\xi^* H$ und entsprechenden Multiplikationen mit $-i\,U^+\xi^*$, $i\xi U$ folgt durch Addition

$$-iU^+\xi^*\mathfrak{D}(E) + i\,\mathfrak{D}^+(E)\,\xi\,U = -iU^+\xi^* H + iH\xi U\,,$$

und indem man von beiden Seiten die Diagonale nimmt

$$R\Gamma(E) = (-i\,U^{+}\xi^{*}U + i\,U^{+}\xi\,U)_d$$

oder

$$R\Gamma(E) = 2\pi\big(U^{+}(E)\,\delta(E-H_0)\,U(E)\big)_d. \tag{28}$$

§ 4. Die S-Matrix und ihre Entwicklung.

Der physikalische Inhalt der Theorie, d. h. die Aussagen, die sie über Übergangswahrscheinlichkeiten, Position und Breite von Spektrallinien und dergleichen machen kann, ist in den Operatoren $U(E)$ und $\Gamma(E)$ enthalten, deren Kenntnis im Prinzip auf der ganzen reellen E-Achse notwendig ist. (Für die wichtigsten physikalischen Fragen spielen allerdings nur gewisse Werte von E eine Rolle.) Wir haben schon einen Operator $S(t)$ eingeführt, der die Transformation des Anfangszustandes φ_0, $t = 0$ in den Zustand $\psi(t)$ (Wechselwirkungsdarstellung!) zur Zeit t leistet. Es mag von Interesse sein, aufzuzeigen, dass dieser Operator tatsächlich eine Dysonsche Entwicklung mit einer Anfangsbedingung zur Zeit $t = 0$ besitzt, wie zu erwarten wäre:

$$S(t) = 1 + (-i)\int_0^t H(t')\,dt' + (-i)^2\int_0^t dt'\int_0^{t'} dt''\,H(t')H(t'') + \cdots \tag{29}$$

wo

$$H(t) = e^{it\,H_0}\,H\,e^{-it\,H_0}.$$

(Warum jedoch diese Entwicklung allein keineswegs zur konsequenten störungsmässigen Berechnung der Linienbreite, d. h. von $R\Gamma(E)$ genügt, soll kurz im zweiten Teil besprochen werden.) Aus (17) folgt

$$S(+\infty) = 1 + \int_{-\infty}^{\infty}\delta(E-H_0)\Big(U(E) - \frac{i}{2}\Gamma(E)\Big)\Big(E - H_0 + \frac{i}{2}\Gamma(E)\Big)^{-1} dE$$

$$= 1 + \int_{-\infty}^{\infty}\delta(E-H_0)\,\mathfrak{D}(E)\big(1-\xi(E-H_0)\,\mathfrak{D}_d(E)\big)^{-1}\xi(E-H_0)\,dE$$

$$= 1 + \int_{-\infty}^{\infty}\delta(E-H_0)\,(\mathfrak{D}\xi + \mathfrak{D}\xi\,\mathfrak{D}_d\xi + \mathfrak{D}\xi\,\mathfrak{D}_d\xi\,\mathfrak{D}_d\xi + \cdots)\,dE$$

und mit Hilfe von (25) und (26)

$$S(+\infty) = 1 + \int_{-\infty}^{\infty} \delta(E - H_0)\,(H\xi + H\xi H\xi + \cdots)\,dE \tag{30}$$

was man die *Entwicklung der S-Matrix im Energieraum* nennen darf. In geschlossener Form schreibt sich diese Darstellung auch

$$S(\infty) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(E - H_0)\,\bigl(1 - H\,\xi\,(E - H_0)\bigr)^{-1} dE\,. \tag{30'}$$

Die Form (30) ist nun aber mit (29) identisch, wenn dort $t \to +\infty$. Man betrachte z. B. das dritte Glied in (30):

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE\,\delta(E - H_0)\,H\,\xi(E - H_0)\,H\,\xi(E - H_0)$$

$$= (-i)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dE\,\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{it(E-H_0)}\,dt \int_{0}^{\infty} H e^{it'(E-H_0)}\,dt'\,H \int_{0}^{\infty} e^{it''(E-H_0)}\,dt''$$

$$= \frac{(-i)^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{0}^{\infty} dt' \int_{0}^{\infty} dt''\, e^{i(t+t'+t'')E}\, e^{-i(t+t'+t'')H_0}\, H(t'+t'')\,H(t'')$$

$$= (-i)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{0}^{\infty} dt' \int_{0}^{\infty} dt''\,\delta(t + t' + t'')\,H(t' + t'')\,H(t'')$$

$$= (-i)^2 \int_{0}^{\infty} dt\,H(t) \int_{0}^{t} H(t')\,dt'\,.$$

So kann man (29) (für $t \to \infty$) Glied für Glied verifizieren und das bedeutet nichts weiteres als die Transformation von (30) in die Zeitdarstellung*). Ähnliche Transformationen in die Zeitdarstellung existieren für $U(E)$ und $\Gamma(E)$. Im Gegensatz zum Fall freier Partikel beschreibt (29) oder (30) einen nicht-stationären Prozess und enthält Übergänge bei denen die ungestörte Energie nicht erhalten bleibt.

Man könnte zwar in (29) die Terme herausfinden, die zu der Entwicklung von $\Gamma(E)$, (25), beitragen aber nicht in eindeutiger Weise. In der Bereitstellung einer derartigen Entwicklung, die für die Anwendung auf die Löchertheorie angepasst ist, geht der Dämpfungs-

---

*) Für endliche t, vergleiche Anhang.

formalismus von Heitler und Ma über den S-Matrix-Formalismus hinaus.

Wir wollen hier noch einige Worte für den Fall *freier* Partikel einfügen und auf die erwähnte Identität der Heitlerschen und der Dysonschen Formulierungen zurückkommen. Hier darf man die Anfangsbedingung nach $t = -\infty$ verlegen und also den Ansatz machen

$$S(t) = 1 + \int_{-\infty}^{+\infty} dE\, e^{-it(E-H_0)}\, \xi(E - H_0)\, U'(E) \tag{31}$$

der der Anfangs- und Ausstrahlungsbedingung genügt, wenn $U'(E)$ keine Diagonalelemente besitzt. (Vgl. (7)). Durch Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung (Wechselwirkungsdarstellung!) folgt

$$U'(E) = H \cdot \delta\,(E - H_0) + H\xi(E - H_0)\, U'(E)$$

und daraus mit der Definition $U'(E) = U(E)\delta(E - H_0)$.

$$U(E) = H\big(1 + \xi(E - H_0)\, U(E)\big)$$

oder

$$U = (1 - H\xi)^{-1} H = H + H\xi H + \cdots \tag{32}$$

Der zweite Term in (23) erscheint hier nicht. Mit (31) ist aber U als Operator mit verschwindender Diagonale festgelegt. *Wenn* (32) einen *derartigen* Operator darstellt, folgt auch

$$\Gamma = 2i\big(H(1 + \xi U)\big)_d = 2i\big((1 - H\xi)^{-1} H\big)_d = 0\,. \tag{32'}$$

Der Realteil von Γ hängt bekanntlich mit der Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit zusammen (man ziehe Formel (28) heran; oder vergleiche auch weiter unten) und bei unendlichem Normierungsvolumen verschwindet $R\Gamma$ tatsächlich. Die Forderung (32′) geht darüber hinaus, indem auch $Im\Gamma = 0$ ist. In der Tat stellt nun (32) nur dann einen Operator der gewünschten Form dar, wenn die Selbstenergie vom Störungsoperator abgezogen ist, so dass z. B. $(H_1\xi H_1 - H^S)_d = 0$. Eine *widerspruchsfreie* Formulierung der Stosstheorie freier Partikel verlangt also die Einführung der Selbstenergie(Massen)-Korrektur. (32) ist der schon früher für freie Partikel abgeleitete Ausdruck für U. Man erhält ihn als Grenzfall aus der Darstellung (23) oder (19) für gebundene Partikel, wenn $\Gamma \to 0$.

(Das zweite Glied von (23) enthält nämlich Γ als Faktor, wie Vergleich mit (32′) zeigt.) Für $t \to +\infty$ erhält man dann

$$S(\infty) = 1 - 2\pi i \int_{-\infty}^{\infty} \delta(E - H_0)\, U(E)\, \delta(E - H_0)\, dE$$

$$= 1 - 2\pi i \int_{-\infty}^{\infty} (\delta H \delta + \delta H \xi H \delta + \cdots)\, dE. \qquad (31')$$

Man beachte, dass U nur für einen scharfen E-Wert notwendig ist. Durch Transformation in die Zeitdarstellung folgt

$$S(\infty) = 1 + (-i) \int_{-\infty}^{\infty} H(t)\, dt + (-i)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{t} dt' H(t) H(t') + \cdots \qquad (31'')$$

also die Dysonsche Entwicklung*). Es ist klar, dass diese Entwicklung versteckt die Dämpfungseffekte enthält und nicht etwa über die Heitlersche Theorie hinausgeht.

§ 5. Physikalisches.

Die Entwicklungen der §§ 2 und 3 sollen in der folgenden Arbeit dem Problem der natürlichen Linienbreite in der Positronentheorie zugrunde gelegt und sie können als die generelle Grundlage der Dämpfungstheorie gebundener Zustände betrachtet werden. Der in Strenge zu berücksichtigenden Impulsbilanz kann leicht Rechnung getragen werden, wir rechnen aber im folgenden mit einem festen äusseren Potentialfeld.

Um den zweiten Teil der Arbeit vorzubereiten, seien hier in aller Kürze noch einige Formeln und Begriffe zusammengestellt, die mit der Linienbreite zu tun haben. Wir gehen in die Zeitdarstellung zurück und haben dann für den Wert der Amplitude eines Zustandes

---

*) Da diese Entwicklung nicht störungsmässig unitär ist, stellt man manchmal S unitär durch einen hermitischen Operator K mittels der Cayley'schen Formel dar,

$$K = \left(1 - H \frac{P}{E - H_0}\right)^{-1} H \delta(E - H_0).$$

Letzterer kann störungsmässig entwickelt werden und die Ausdrücke verschiedener Ordnung, $K^{(n)}$, sind sehr leicht mittels der entsprechenden Ausdrücke in der S-Entwicklung zu bilden. Es bleibt dabei aber noch eine Schwierigkeit von $K^{(4)}$ an bestehen, auf die wir an anderer Stelle zurückkommen.

A (Anfangszustand 0) nach unendlich langer Zeit ($\Gamma t \to \infty$) — man vergleiche Formel (14):

$$b_A(\infty) = \langle A, S(\infty)\, 0 \rangle = \left\langle A, \int_{-\infty}^{\infty} dE\, \delta(E - H_0)\, \mathfrak{D}(E) \left(E - H_0 + \frac{i}{2}\Gamma\right)^{-1} 0 \right\rangle$$

und nach Ausführung der doppelten Matrixsummation

$$b_A(\infty) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\delta(E - E_A) \langle A, \mathfrak{D}(E)\, 0 \rangle}{E - E_0 + i/2\, \Gamma_{0/0}(E)}\, dE$$

wo

$$\Gamma_{0/0}(E) = \langle 0, \Gamma(E)\, 0 \rangle;$$

also

$$\underset{A \neq 0}{b_A(\infty)} = \frac{\langle A, U(E_A)\, 0 \rangle}{E_A - E_0 + i/2\, \Gamma_{0/0}(E_A)}\,; \quad b_0(\infty) = 0\,. \tag{33}$$

Die Quantität $|b_A(\infty)|^2$ wird in üblicher Weise als Wahrscheinlichkeitsdichte (kontinuierliches Spektrum!) interpretiert und für die Wahrscheinlichkeit, dass das zur Zeit $t = 0$ im Zustand O befindliche System nach einer unendlich langen Zeit einen Übergang in die Zustände A eines gewissen Intervalls ausgeführt hat, wobei seine (ungestörte) Energie E_A fest in einem Intervall dE_A liegt, hat man

$$w(E_A)\, dE_A = \sum_A \frac{|\langle A, U(E_A)\, 0 \rangle|^2\, dE_A}{\left(E_A - E_0 - \frac{Jm}{2}\, \Gamma_{0/0}(E_A)\right)^2 + (R\,\Gamma_{0/0}(E_A)/2)^2} \tag{34}$$

$$(E_A \text{ fest in } dE_A)\,.$$

Wenn der Anfangszustand O z. B. einem angeregten Elektron und keinem anwesenden Lichtquant, der Endzustand A einem emittierten Lichtquant und dem Elektron im Grundzustand entspricht, so hat (34) die übliche Form einer Emissionslinie. Allerdings ist Γ im Prinzip energie-(also frequenz-)abhängig. Man verifiziert auch, dass $Jm\Gamma_{0/0}(E)/2$ an der Stelle $E = E_0$ mit dem stationär berechneten Ausdruck für den Lamb-Retherford-shift für das Ausgangsniveau 0 übereinstimmt.

Zum Schluss sei noch die Formel für die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit, z. B. für den Übergang $O \to A$ abgeleitet. Dieser Begriff ist aber approximativ und beansprucht nur in der Grenze verschwindenden Γ's strenge Gültigkeit.

Vergleich von (14) und (7) zeigt, dass (33) unter der Voraussetzung $E_A\, t \to \infty$ gültig ist. Wir nehmen von vorneherein $\Gamma \lll E_0$ an und beschränken uns auf ein Zeitintervall, so dass $E_A\, t \gg 1$, $\Gamma t \ll 1$ gleichzeitig erfüllt ist. Durch Benutzung der Darstellungen (der imaginäre Teil von $\Gamma_{0/0}$ sei vernachlässigt)

$$\frac{1}{E_A - E_0 + i\,\Gamma_{0/0}(E_A)/2} \to \xi(E_A - E_0), \quad \Gamma t \ll 1,$$

$$|\xi(E_A - E_0)|^2 = 2 \lim_{E_A t \to \infty} \frac{1 - \cos(E_A - E_0)\,t}{(E_A - E_0)^2}$$

$$= 2\pi\, t\, \delta(E_A - E_0),$$

folgt dann aus (33)

$$w_{A/0} \equiv \lim_{\substack{E_A t \to \infty \\ \Gamma t \to 0}} \frac{1}{t} |b_A|^2 = 2\pi\, |U_{A/0}(E_A)|^2\, \delta(E_A - E_0). \tag{35}$$

Man hat auch

$$\sum_{A,\, E_A = E_0} w_{A/0} = R\, \Gamma_{0/0}(E_0)$$

wenn man (28) berücksichtigt. Diese Ableitung ist nicht streng und der Begriff Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit hat eben nur Gültigkeit, wenn die Linienbreite vernachlässigbar ist*).

Für freie Partikel wo $\Gamma = 0$, ist (35) streng gültig, wenn auf Volumen 1 normiert.

Die dieser Arbeit zugrunde gelegte Störungstheorie geht von den durch den Energieaustausch mit der Strahlung unbeeinflussten Energieniveaus aus. Das bewirkt, dass bei Einschaltung der Wechselwirkung die Atomzustände (auch der Grundzustand) an alle Zustände (mit Strahlung) angekoppelt werden, welche dann mit sehr kleiner Amplitude virtuell auftreten. In der Formel für $b_A(\infty)$ sind diese virtuellen Zustände noch mit enthalten. Es wäre zu wünschen, wenn auch hier zwischen „reellen" und „virtuellen" Übergängen scharf unterschieden werden könnte, ähnlich wie bei freien Teilchen, wo dann die letzteren durch eine Bloch-Nordsiek-Transformation in die ungestörten Niveaus absorbiert werden.

---

*) Im Rahmen des Formalismus dieser Arbeit kann eine Formel für

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle 0, S^+(t)\, A \rangle \langle A, S(t)\, 0 \rangle$$

gefunden werden ohne die obigen Darstellungen von ξ bzw. ξ^2 heranzuziehen. In der Grenze $\Gamma \lll E_0$ wird dann (35) erhalten, wenn noch gewisse Annahmen über das Verhalten von $U(E)$ gemacht werden, die wohl auch der obigen Ableitung zugrunde liegen.

Eine solche Trennung ist aber nicht bei endlicher Linienbreite bekannt.

Bei der Interpretation einer Formel wie (34) muss deshalb, streng genommen, eine gewisse Vorsicht angewandt werden. Die Elimination der virtuellen Zustände hängt eng mit der Subtraktion der Selbstenergie zusammen. Dies wird ausführlich in der zweiten Arbeit gezeigt werden.

Die Formel (34) zeigt eine gewisse Unsymmetrie in bezug auf den Anfangszustand, dessen Lamb-shift im Nenner enthalten ist, während die Linienverschiebung des Endzustands nicht auftritt. Diese kann beseitigt werden (bis auf einen geringfügigen Unterschied der von der E_A Abhängigkeit von $Jm\Gamma_{0/0}(E_A)/2$ herrührt, während der stationäre Lamb-shift-Ausdruck $Jm\,\Gamma_{0/0}(E_0)/2$ ist) wenn*) die Lambverschiebung in die ungestörten Energieniveaus aufgenommen wird. Beim Übergang in die Wechselwirkungsdarstellung $\psi \to e^{-itH_0}\psi'$ ist also zu H_0 ein Operator ΔE zu addieren, derart, dass $(H^S + \Delta E)_{0/0}$ die gesamte Selbstenergie des gebundenen Elektrons im Zustand 0 darstellt. Die Wechselwirkung wird dann $H - \Delta E$ und man überzeugt sich, dass dadurch im wesentlichen der Term $Jm\,\Gamma_{0/0}/2$ aus dem Nenner von (34) verschwindet, während alle auftretenden Atomenergien nun die *verschobenen* Niveaus sind.

Wir möchten Herrn Professor W. Heitler für seine Anregung und wohlwollende Förderung im Laufe der Arbeit, wie auch für die Überlassung unpublizierten Materials herzlichst danken. Auch Herrn Dr. K. Bleuler sind wir für Diskussionen sehr verpflichtet. Unsere Zusammenarbeit wurde durch Stipendien des Centre National de la Recherche Scientifique, Paris, und der Universität London ermöglicht, wofür wir diesen Institutionen bestens danken.

Literatur.

1) Tomonaga, S., Prog. Theor. Phys. **1**, 27 (1946).
2) Feynman, R. P., Phys. Rev., **76**, 749 u. 769 (1949).
3) Schwinger, J., Phys. Rev. **73**, 416 (1948).
4) Dyson, J., Phys. Rev. **75**, 486 (1949).
5) Heitler, W. und Peng, Proc. Camb. Soc. **38**, 296 (1942).
6) Z. B. Jost, R. und Corinaldesi, E., H.P.A. **21**, 183 (1948) oder Schafroth, R., H.P.A. **22**, 501 (1949).
7) French, J. und Weisskopf, V., Phys. Rev. **75** 1240 (1949).
8) Heitler, W. und Ma, S. T., Proc. Roy. Ir. Acad. **52**, 109 (1949).

*) Einer Anregung von Prof. W. Heitler folgend.

Anhang.

Um die Entwicklung (29), § 4 für t endlich zu gewinnen, geht man auf die Darstellung (16) von $S(t)$ zurück. Durch Vergleich von (16) und (17) sieht man, dass in diesem Fall die (30) entsprechende Formel

$$S(t) = 1 - \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} d E e^{-it(E-H_0)} \, \xi (H\xi + H\xi H\xi + \ldots) \tag{30'}$$

lautet. Wir betrachten z. B. den Term

$$-\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-it(E-H_0)} \, \xi H \xi H \xi$$

$$= (-i)^2 \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d E \int_0^{\infty} d t_1 \int_0^{\infty} d t_2 \int_0^{\infty} d t_3 e^{-i(t-t_1-t_2-t_3)(E-H_0)} H(t_2+t_3) H(t_3)$$

$$= (-i)^2 \int_0^{\infty} d t_1 \int_0^{\infty} d t_2 \int_0^{\infty} d t_3 \, \delta(t_1+t_2+t_3-t) \, H(t_2+t_3) \, H(t_3)$$

Das t_1 Integral ist nur von Null verschieden wenn, $t_1 = t - t_2 - t_3 > 0$, also $0 < t_2 + t_3 < t$. Da auch $t_3 < t_3 + t_2$ bekommt man sofort durch die Transformation $t' = t_2 + t_3$, $t'' = t_3$,

$$(-i)^2 \int_0^{t} d t' \int_0^{t'} d t'' \, H(t') \, H(t''),$$

womit das dritte Glied von (29) verifiziert ist.

Man liest aus (29) ab, dass $S(t) \to 1$ wenn $t \to +0$ geht, womit ein neuer Beweis der Anfangsbedingung geliefert ist.