

Zeitschrift:	Helvetica Physica Acta
Band:	51 (1978)
Heft:	5-6
Artikel:	Methode zur schnellen und genauen Berechnung des Vakuum-Polarisations-Potentials der Ordnung (Z)
Autor:	Dubler, Th.
DOI:	https://doi.org/10.5169/seals-114971

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. [Mehr erfahren](#)

Conditions d'utilisation

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. [En savoir plus](#)

Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. [Find out more](#)

Download PDF: 18.01.2026

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>

Methode zur schnellen und genauen Berechnung des Vakuum-Polarisations-Potentials der Ordnung $\alpha(Z\alpha)^1$

von Th. Dubler²⁾

Physikalisches Institut der Universität, 1700 Freiburg, Schweiz³⁾

(16. X. 1978)

Zusammenfassung. Es wird eine Methode zur schnellen und genauen Berechnung des Vakuum-polarisations-Potentials der Ordnung $\alpha(Z\alpha)$ beschrieben. Der Approximationsfehler ist kleiner als 2.5 ppm für Radien $r \leq \lambda_e$.

Abstract. A method for the fast and accurate computation of the vacuum-polarization potential of order $\alpha(Z\alpha)$ is presented. The accuracy of the approximation is better than 2.5 ppm for $r \leq \lambda_e$.

Die experimentelle Technik hat in den letzten Jahren einen Stand erreicht, der es erlaubt, Übergangssenergien in myonischen Atomen auf etwa 20 ppm genau zu bestimmen [1]. Mit den neuen Kristallspektrometern wird eine noch höhere Genauigkeit erwartet.

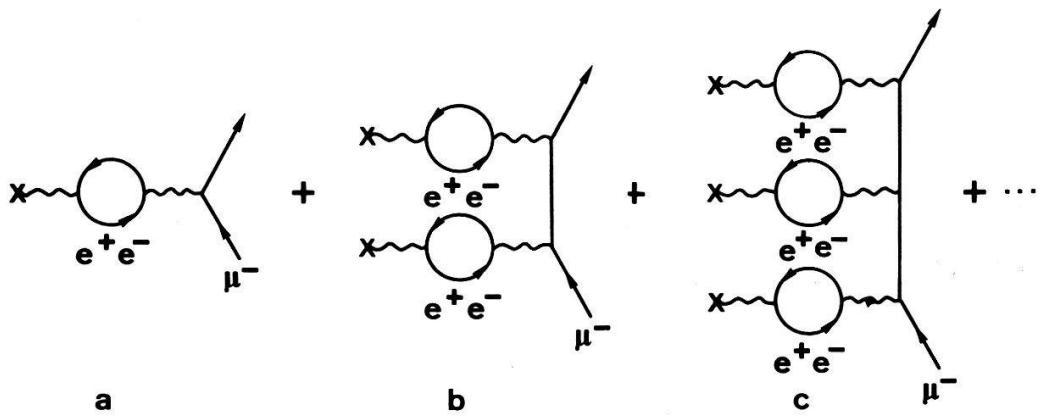
In den letzten Jahren wurden mehrere Experimente durchgeführt, die eine eventuelle Diskrepanz zwischen den experimentellen und den mit der QED berechneten Übergangssenergien aufdecken sollen [1–4].

Um diesen Vergleich durchführen zu können, müssen die theoretischen Energien mit einer Genauigkeit von einigen ppm berechnet werden. Dies wird durch numerische Integration der Dirac-Gleichung für den ausgedehnten Kern erreicht. Da die meisten Korrekturen relativ klein sind ($\lesssim 100$ ppm), werden sie zweckmäßig in Störungsrechnung berücksichtigt. Die (e^+e^-) -Vakuum-polarisationskorrektur der Ordnung $\alpha(Z\alpha)$ (Figur 1a) hingegen beträgt etwa 0.5 % der Übergangssenergie und ist deshalb bei der geforderten Genauigkeit eine grosse Korrektur.

Diesem Umstand wird dadurch Rechnung getragen, dass man das (e^+e^-) -Vakuum-polarisations-Potential der Ordnung $\alpha(Z\alpha)$ zum Coulombpotential addiert und die Dirac-Gleichung für dieses Potential numerisch integriert. Durch dieses Vorgehen werden automatisch alle iterierten Feynman-Graphen eingeschlossen (Figur 1b u. c), was bei der Berechnung der Korrekturen höherer Ordnung berücksichtigt werden muss.

Die Berechnung des Vakuum-polarisations-Potentials ist unabhängig von der Art

¹⁾ Diese Arbeit wurde teilweise vom Schweizerischen Nationalfond unterstützt.
²⁾ Die vorliegende Arbeit ist Teil der Dissertation Nr. 765 der mathematisch-naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität Freiburg in der Schweiz.
³⁾ Gegenwärtige Adresse: Kreuzeggweg 27, 8400 Winterthur, Schweiz.



Figur 1
Feynman-Graphen der Vakuumpolarisation der Ordnungen $(\alpha(Z\alpha))^n$.

der betrachteten Atome; die in dieser Arbeit angegebenen Formeln gelten also sowohl für elektronische als auch myonische und andere exotische Atome. Die angegebenen Formeln sind auch allgemein für die Vakuumpolarisation durch elektromagnetische Erzeugung von Fermionenpaaren des Spins 1/2 anwendbar. In den Formeln ist jeweils die entsprechende Comptonwellenlänge λ einzusetzen. Im folgenden sprechen wir nur von der Vakuumpolarisation durch (e^+e^-) -Paare.

Das (e^+e^-) -Vakuumpolarisations-Potential der Ordnung $\alpha(Z\alpha)$ V_{VP1} (sog. Uehling-Potential) lautet für eine beliebige Ladungsverteilung [5]:

$$V_{\text{VP1}}(\vec{r}) = -Z\alpha \frac{2\alpha}{3\pi} \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} Z_0\left(\frac{|\vec{r} - \vec{r}'|}{\lambda_e}\right) d^3r', \quad (1)$$

wobei

$$\int \rho(\vec{r}') d^3r' = 1.$$

Die Funktionen $Z_n(x)$, $(x = |\vec{r} - \vec{r}'|/\lambda_e)$, sind dabei wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} Z_n(x) &= \int_1^\infty \exp(-2x\xi) \left(1 + \frac{1}{2\xi^2}\right) \frac{\sqrt{\xi^2 - 1}}{\xi^2 + n} d\xi \\ &= \int_0^1 \exp\left(-2\frac{x}{y}\right) (1 + \frac{1}{2}y^2) \sqrt{1 - y^2} y^{n-1} dy. \end{aligned} \quad (3)$$

Es gilt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} Z_n(x) &= (-2)Z_{n-1}(x) \\ Z_n^{(\gamma)}(x) &= (-2)^\gamma Z_{n-\gamma}(x). \end{aligned} \quad (4)$$

Für eine kugelsymmetrische Ladungsverteilung ergibt sich

$$V_{\text{VP1}}(r) = -Z\alpha \frac{4\alpha\lambda_e}{3} \int_0^\infty \rho(r') \frac{r'}{r} \left[Z_1\left(\frac{|r - r'|}{\lambda_e}\right) - Z_1\left(\frac{|r + r'|}{\lambda_e}\right) \right] dr'. \quad (5)$$

Da die Funktion $Z_1(x)$ durch ein nicht elementares Integral [Gl. (3)] definiert ist, erfordert die Berechnung des Vakuumpolarisations-Potentials V_{VP1} an jeder Stelle r die

numerische Integration von zwei Doppelintegralen [Gl. (5)]. Der dazu erforderliche Rechenaufwand ist bei der geforderten hohen Genauigkeit beträchtlich.

Es ist deshalb von grossem Interesse, Approximationen genügender Genauigkeit für die Funktion $Z_1(x)$ zu finden.

Für kleine Werte von x entwickelte McKinley [6] $Z_1(x)$ in eine Potenzreihe nach x und $\ln x$:

$$Z_1(x) = \frac{9\pi}{32} + 2x \left((\gamma + \ln x) \left\{ 1 - x^4 \left(\frac{1}{20} + \frac{1}{630} x^2 \left\{ 1 + \frac{1}{32} x^2 \cdot \left(1 + \frac{4}{165} x^2 \right) \right\} \right) \right\} - \frac{1}{6} - \pi x \left(\frac{3}{8} + \frac{1}{12} x^2 \right) + \frac{1}{2} x^2 \left\{ 1 + \frac{1}{150} x^2 \cdot \left(38 + \frac{1}{882} x^2 \left\{ 949 + \frac{1}{96} x^2 \left(2987 + \frac{138778}{1815} x^2 \right) \right\} \right) \right\} \right) + (\gamma + \ln x) 0(x^{13}) + 0(x^{13}),$$

$$Z_1(0) = \frac{9\pi}{32}, \quad (6)$$

wobei γ die Eulersche Konstante ist [7].

Der relative Fehler der Approximation von Z_1 nach Gl. (6) beträgt bei $x = 1$ etwa 2.5 ppm, bei $x = 2$ aber schon 30 %. Sie ist also nur bis $x = 1$ brauchbar.

Für Radien weit ausserhalb des Kernradius $r \gg R_K$ wird die Differenz

$$\left\{ Z_1 \left(\frac{|r - r'|}{\lambda_e} \right) - Z_1 \left(\frac{|r + r'|}{\lambda_e} \right) \right\}$$

sehr klein, so dass sich numerische Fehler bei der Berechnung von Z_1 stark auf V_{VP1} auswirken. Aus diesem Grunde erweist sich die Entwicklung der Differenz an der Stelle r in eine Taylorreihe als zweckmässig:

$$Z_1 \left(\frac{|r - r'|}{\lambda_e} \right) - Z_1 \left(\frac{|r + r'|}{\lambda_e} \right) = -2 \left\{ Z_1^I \left(\frac{r}{\lambda_e} \right) \frac{r'}{\lambda_e} + \frac{1}{3!} Z_1^{III} \left(\frac{r}{\lambda_e} \right) \cdot \left(\frac{r'}{\lambda_e} \right)^3 + \frac{1}{5!} Z_1^V \left(\frac{r}{\lambda_e} \right) \cdot \left(\frac{r'}{\lambda_e} \right)^5 + \dots \right\}. \quad (7)$$

Mit den k -ten Momenten der Kernladungsverteilung

$$\langle r^k \rangle = 4\pi \int_0^\infty \rho(r') r'^{k+2} dr', \quad (8)$$

erhalten wir zusammen mit Gl. (4)

$$V_{VP1}(r) = -\frac{2}{3\pi} \frac{Z\alpha^2}{r} \left\{ Z_0 \left(\frac{r}{\lambda_e} \right) + \frac{2}{3} Z_{-2} \left(\frac{r}{\lambda_e} \right) \frac{\langle r^2 \rangle}{\lambda_e^2} + \frac{2}{15} Z_{-4} \left(\frac{r}{\lambda_e} \right) \frac{\langle r^4 \rangle}{\lambda_e^4} + \dots \right\}. \quad (9)$$

Die Entwicklung der Z_n in eine Potenzreihe ergibt für kleine x :

$$\begin{aligned}
 Z_0(x) = & (\gamma + \ln x) \left\{ -1 + \frac{1}{2} x^4 \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{5} x^2 \left\{ \frac{1}{9} + \frac{1}{56} x^2 \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{135} x^2 \right) \right\} \right) \right\} \\
 & - \frac{5}{6} + \pi x \left(\frac{3}{4} + \frac{1}{3} x^2 \right) - \frac{1}{2} x^2 \left\{ 3 + \frac{1}{6} x^2 \left(7 + \frac{1}{50} x^2 \right. \right. \\
 & \cdot \left. \left. \cdot \left\{ \frac{127}{9} + \frac{1}{784} x^2 \left(\frac{949}{2} + \frac{6079}{405} x^2 \right) \right\} \right) \right\} \\
 & + (\gamma + \ln x) 0(x^{12}) + 0(x^{12}). \tag{10}
 \end{aligned}$$

Der relative Fehler der Approximation von Z_0 beträgt für $x = 1$ 17 ppm, für $x = 2$ 67%.

$$\begin{aligned}
 Z_{-2}(x) = & (\gamma + \ln x) \frac{1}{4} x^2 \left\{ 3 + x^2 \left(\frac{1}{3} + \frac{1}{40} x^2 \left\{ 1 + \frac{1}{21} x^2 \right\} \right) \right\} \\
 & + \frac{1}{4} \frac{1}{x^2} - \frac{3}{4} + \frac{\pi}{2} x - \frac{1}{16} x^2 \left\{ 21 + \frac{1}{3} x^2 \left(7 + \frac{1}{400} x^2 \right. \right. \\
 & \cdot \left. \left. \cdot \left\{ 239 + \frac{1849}{147} x^2 \right\} \right) \right\} + (\gamma + \ln x) 0(x^{10}) + 0(x^{10}). \tag{11}
 \end{aligned}$$

Der relative Fehler der Approximation von Z_{-2} beträgt für $x = 1$ 0.21 %, für $x = 2$ 25'000 % (d.h. unbrauchbar).

$$\begin{aligned}
 Z_{-4}(x) = & (\gamma + \ln x) \frac{1}{4} \left\{ \frac{3}{2} + x^2 \left(1 + \frac{1}{4} x^2 \left\{ \frac{3}{4} + \frac{1}{15} x^2 \right\} \right) \right\} \\
 & + \frac{3}{8} \frac{1}{x^4} - \frac{1}{8} \left\{ \frac{3}{4} + x^2 \left(\frac{7}{3} + \frac{1}{2} x^2 \left\{ \frac{21}{32} + \frac{203}{1575} x^2 \right\} \right) \right\} \\
 & + (\gamma + \ln x) 0(x^8) + 0(x^8). \tag{12}
 \end{aligned}$$

Der relative Fehler der Approximation von Z_{-4} beträgt für $x = 1$ 12 %, für $x = 2$ 15'000 % (d.h. unbrauchbar).

Da die Approximationen nach obigen Gleichungen nur für $x \lesssim 1$ gute Resultate liefern, müssen wir für $x > 1$ andere Approximationen suchen. Wie man schon aus Gl. (3) sieht, fallen die Funktionen Z_n für $x \rightarrow \infty$ etwa wie $\exp(-2x)$. Wir machen deshalb folgenden Ansatz:

$$Z_n(x) = \exp(-2x) \cdot f_n(x). \tag{13}$$

Die Funktionen $f_n(x)$ approximieren wir wie folgt: Wir transformieren das Intervall (b_n, ∞) in das Intervall $(-1, +1)$:

$$y = \frac{2b_n}{x} - 1 \tag{14}$$

und approximieren f_n durch ein Tschebyscheff-Polynom.

Zur Bestimmung der Koeffizienten transformieren wir das Intervall $(-1, +1)$ nochmals in das Intervall $(0, \pi)$:

$$\vartheta = \arccos(y). \tag{15}$$

Anschliessend führen wir eine Fourieranalyse der Funktion f_n durch. Dadurch wird

$$\int_0^\pi |\Delta f_n(\theta)|^2 \cdot d\theta = \text{minimal.} \quad (16)$$

Auf diese Weise erhalten wir eine Approximation der Z_n folgender Form:

$$Z_n(x) \approx \exp(-2x) \sum_{k=0}^{M_n} A_{n,k} \cdot \left(\frac{2b_n}{x} - 1 \right)^k, \quad (17)$$

gültig im Intervall $b_n \leq x < \infty$.

Die Wahl des Polynomgrades M_n erfolgt nach der gewünschten Approximationsgenauigkeit; b_n wird so gewählt, dass für $x = b_n$ beide Approximationen etwa gleich grosse Fehler haben.

In den Tabellen 1 bis 4 sind die Koeffizienten $A_{n,k}$ für $n = 1, 0, -2$ und -4 zusammengestellt.

Tabelle 1
Koeffizienten $A_{1,k}$ für $M_1 = 23$, $b_1 = 1.0$

Genauigkeit der Approximation $\frac{|\Delta Z_1(x)|}{\exp(-2x)} \lesssim \begin{cases} 1 \text{ ppm für } 1 \leq x \leq 4 \\ 8 \text{ ppm für } 4 \leq x < \infty \end{cases}$

k	$A_{1,k}$	k	$A_{1,k}$
0	0.10607'26757'789	12	-15.97995'30030'1
1	0.10100'13498'104	13	37.25354'10047'4
2	-1.65013'46151'44 · 10 ⁻²	14	32.20037'45979'3
3	-1.33867'34290'42 · 10 ⁻⁴	15	-68.56890'45659'0
4	-4.78114'94859'53 · 10 ⁻³	16	-41.58378'92235'3
5	2.97983'80738'80 · 10 ⁻²	17	82.11155'46525'4
6	0.11687'35777'109	18	33.28462'23289'0
7	-0.41824'90107'946	19	-61.63524'96961'3
8	-1.00198'44129'76	20	-15.03469'27758'0
9	3.00949'70880'79	21	26.33613'02021'2
10	5.07958'22967'91	22	2.93027'67618'86
11	-13.23452'40085'0	23	-4.88835'28135'62

Da für $x > 1$ das Vakuumpolarisations-Potential zweckmässigerweise nach Gl. (9) berechnet wird, werden die Koeffizienten $A_{1,k}$ nach Tabelle 1 in der Regel nicht benötigt. Dasselbe gilt für die Koeffizienten $A_{-4,k}$ nach Tabelle 4, da für $x > 1$ der Anteil der Funktion Z_{-4} am Vakuumpolarisations-Potential auch für die grössten Kerne immer kleiner ist als der Fehler der Approximation von Z_0 nach Gl. (17) mit den Koeffizienten $A_{0,k}$ aus Tabelle 2.

Die Wahl des Radius r_M , bei dem bei der Berechnung von V_{VP1} von Gl. (5) auf Gl. (9) übergegangen werden soll, hängt von der gewünschten Genauigkeit ab. In unserem Programm wählten wir $r_M = 90$ fm ($x \approx 0.233$). Bei diesem Radius beträgt der Anteil des Gliedes Z_{-4} max. 2.5 ppm. Wenn wir die Reihe in Gl. (9) nach dem 2. Gliede abbrechen, beträgt der Fehler für $x = 0.233$ also je nach Kern max. 2.5 ppm, für $x = 1$ max. 0.1 ppm.

Tabelle 2
Koeffizienten $A_{0,k}$ für $M_0 = 23$, $b_0 = 0.87$

Genauigkeit der Approximation $\frac{|\Delta Z_0(x)|}{\exp(-2x)} \lesssim \begin{cases} 1 \text{ ppm für } 0.87 \leq x \leq 2 \\ 10 \text{ ppm für } 2 \leq x < \infty \end{cases}$

k	$A_{0,k}$	k	$A_{0,k}$
0	0.15253'66795'627	12	-19.65119'99773'0
1	0.16180'26249'636	13	45.85599'19698'6
2	-1.11965'63506'89 · 10 ⁻²	14	39.59381'17983'9
3	-4.52213'39877'46 · 10 ⁻³	15	-84.39392'85217'4
4	-4.24610'29605'83 · 10 ⁻³	16	-51.12594'67340'3
5	3.61368'61724'51 · 10 ⁻²	17	101.05124'12781
6	0.14391'92425'145	18	40.91736'32797'4
7	-0.51497'98119'205	19	-75.84321'42344'8
8	-1.23245'98793'36	20	-18.47994'55985'3
9	3.70518'92771'77	21	32.40306'06341'4
10	6.24714'72973'52	22	3.60121'55549'09
11	-16.29212'80971'5	23	-6.01364'06627'55

Der Fehler von $V_{\text{VP1}}(r)$ verhält sich wie folgt:

$r \leq r_M = 90 \text{ fm}:$

In diesem Bereich verwenden wir zur Berechnung von V_{VP1} Gl. (5) mit Z_1 nach Gl. (6). Da der Fehler von Z_1 für kleine Radien kleiner als 10^{-9} ist, wird der Fehler durch die Integrationsgenauigkeit bestimmt. Er ist abhängig von der gewählten Integrationsmethode und der Schrittweite.

$x_M = 0.233 \leq x \leq 0.87:$

In diesem Bereich berechnen wir V_{VP1} nach Gl. (9) mit Z_0 und Z_{-2} nach Gl. (10) und (11). Für $x_M = 0.233$ beträgt der Approximationsfehler max. 2.5 ppm (bedingt durch die Vernachlässigung von Z_{-4}), bei $x = 0.87$ 2.15 ppm (bedingt durch den Fehler von Z_0). Dazwischen ist der Approximationsfehler kleiner.

$0.87 \leq x < \infty:$

In diesem Bereich wird ebenfalls Gl. (9) verwendet, mit Z_0 und Z_{-2} nach Gl. (17)

Tabelle 3
Koeffizienten $A_{-2,k}$ für $M_{-2} = 7$, $b_{-2} = 1.0$

Genauigkeit der Approximation $\frac{|\Delta Z_{-2}(x)|}{\exp(-2x)} \lesssim \begin{cases} 7 \cdot 10^{-5} \text{ für } 1 \leq x \leq 2 \\ 2.6 \cdot 10^{-4} \text{ für } 2 \leq x < \infty \end{cases}$

k	$A_{-2,k}$	k	$A_{-2,k}$
0	0.21981'82	4	-1.91135'6 · 10 ⁻³
1	0.32603'87	5	6.93444'8 · 10 ⁻³
2	8.38431'7 · 10 ⁻²	6	8.93042'0 · 10 ⁻³
3	-1.26526'3 · 10 ⁻²	7	-9.37820'6 · 10 ⁻³

Tabelle 4

Koeffizienten $A_{-4,k}$ für $M_{-4} = 3$, $b_{-4} = 1.0$ Genauigkeit der Approximation $\frac{|\Delta Z_{-4}(x)|}{\exp(-2x)} \lesssim 10^{-2}$ für $1 \leq x < \infty$

k	$A_{-4,k}$	k	$A_{-4,k}$
0	0.42994	2	0.65643
1	0.91559	3	0.17577

bzw. Gl. (11). Der Approximationsfehler beträgt

$$\frac{|\Delta V_{VP1}|}{V_{VP1}}(x) \lesssim 2.7 \cdot 10^{-6} \cdot x^{1.7}. \quad (18)$$

Unabhängig von dieser Arbeit befassten sich in letzter Zeit auch andere Autoren mit dem Problem der schnellen und genauen Berechnung des Vakuumpolarisations-Potentials [8, 9]. Die Ergebnisse der verschiedenen Approximationen sind innerhalb der angegebenen Fehlerschranken identisch.

Ich danke den Professoren Dr. L. Schellenberg, Dr. L. A. Schaller und Dr. H. Schneuwly für die anregenden Diskussionen und dem Leiter des Physikinstitutes der Universität Freiburg i. Ue., Prof. Dr. O. Huber, für sein stetes Interesse.

LITERATUR

- [1] T. DUBLER, K. KAESER, B. ROBERT-TISSOT, L. A. SCHALLER, L. SCHELLENBERG and H. SCHNEUWLY, Nuclear Physics *A294*, 397 (1978).
- [2] L. TAUSCHER, G. BACKENSTOSS, K. FRANSSON, H. KOCH, A. NILSSON and J. DE RAEDT, Phys. Rev. Lett. *35*, 410 (1975).
- [3] C. K. HARGROVE, E. P. HINCKS, R. J. MCKEE, H. MES, A. L. CARTER, M. S. DIXIT, D. KESSLER, J. S. WADDEN, H. L. ANDERSON and A. ZEHNDER, Phys. Rev. Lett. *39*, 307 (1977).
- [4] R. EICHLER, B. AAS, W. BEER, I. BELTRAMI, P. EBERSOLD, TH. V. LEDEBUR, H. J. LEISI, W. W. SAPP, J. C. DOUSSE, J. KERN and W. SCHWITZ, Phys. Lett. *76B*, 231 (1978).
- [5] B. FRICKE, Z. Physik *218*, 495 (1969).
- [6] MCKINLEY, private Mitteilung, 1969, zitiert in R. ENGFER, H. SCHNEUWLY, J. L. VUILLEUMIER, H. K. WALTER and A. ZEHNDER, At. Data Nucl. Data Tables *14*, 509 (1974).
- [7] M. ABRAMOWITZ and I. A. STEGUN, Handbook of Mathematical Functions, Dover Publications, New York (1965).
- [8] L. W. FULLERTON and G. A. RINKER JR., Phys. Rev. *A13*, 1283 (1976).
- [9] K. N. HUANG, Phys. Rev. *A14*, 1311 (1976).